

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ УЛЬТРАКОРОТКИХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ НА МЕТАЛЛЫ

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

В статье приводятся физические, математические и численные модели лазерно-индуцированного возбуждения акустических импульсов в металлах для изучения закономерностей распространения акустических сигналов, возбуждаемых ультракороткими лазерными импульсами различных пространственных структур. Проведено численное моделирование пространственно-временной структуры температурных полей и волн давления, возбуждаемых в металлах, в зависимости от длительности лазерных импульсов, их пространственной структуры (гауссов пучок, оптический вихрь) и теплофизических характеристик материалов.

Введение

Изобретение лазеров как новых источников электромагнитного излучения открыло широкие возможности для изучения процессов взаимодействия интенсивного излучения с веществом. Несмотря на прошедшие 60 лет, эта область физики по-прежнему развивается быстрыми темпами. Явления взаимодействия интенсивного излучения с веществом включают в себя множество различных эффектов, часто совершенно разных по своей природе: это генерация гармоник в нелинейных кристаллах, лазерное плавление или разрушение материалов, воздействие на биологические ткани и многие другие [1]. Особенно богата физика взаимодействия интенсивного лазерного излучения с металлами [2]. В зависимости от продолжительности и интенсивности лазерного излучения характерными процессами являются нагрев, плавление и испарение материала мишени, тепловое и фотоэлектронное излучение, а также образование высокотемпературной плазмы. Соответственно, возможно реализовать различные технологические режимы воздействия лазерного излучения (резка, сварка, пробивка отверстий и т.д.). Для теоретического описания указанных явлений в соответствии с возможностями современной вычислительной техники развиваются модели различного уровня сложности, включающие решение нелинейных тепловых задач, задач описания фазовых переходов (плавление, испарение материала), гидродинамических задач, связанных как с тепловой конвекцией расплава, так и динамикой разлета плазменного облака. Взаимодействие сверхкоротких лазерных импульсов (пико- и фемтосекундной длительности) с металлами в настоящее время является областью исследований с многочисленными потенциальными или уже реализованными приложениями. За времена порядка десятков - сотен фемтосекунд происходит нагрев электронного газа с последующей релаксацией энергии возбуждения в ионную подсистему. Дальнейшая динамика ионной решетки определяется первоначальной локализацией и дальнейшим распространением акустических деформаций, имеющих характерный масштаб (единицы – десятки нанометров), связанный с глубиной проникновения излучения в металл. Генерация таких пространственно-локализованных возмущений перспективна в таких применениях, как, например, неразрушающий контроль параметров материалов в нано- и микродиапазоне.

Теоретическая модель

Теоретическое рассмотрение взаимодействия сверхкоротких лазерных импульсов с металлами требует развития моделей, учитывающих существенно неравновесный характер процесса лазерного нагрева металлов. Для того, чтобы решать задачу о нагреве металла при поглощении энергии сверхкороткого лазерного импульса принято использовать так называемую двухтемпературную модель для электронного газа и ионной решетки [2]. В рамках такого подхода записываются следующие уравнения для температур электронного газа и ионной решетки:

$$\rho_e C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = k_T^e \left(\frac{\partial^2 T_e}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial z^2} \right) + Q_s - \gamma(T_e - T_i), \quad (1)$$

$$\rho_i C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = \gamma (T_e - T_i). \quad (2)$$

Здесь величины ρ (плотность), C (теплоемкость), T (температура), k_T (теплопроводность). С индексом “e” относятся к электронной подсистеме, а с индексом “i” – к ионной. Параметр γ определяет скорость релаксации энергии от электронного газа к ионам кристаллической решетки. Величина Q_S определяется источником энерговыделения:

$$Q_S = \kappa I_0 \frac{t}{\tau_p} e^{-t/\tau_p}, \text{ где } I_0 \text{ интенсивность светового пучка, } \kappa \text{ коэффициент поглощения сре-$$

ды, и τ_p длительность лазерного импульса. При воздействии импульсного лазерного излучения на поглощающую среду происходит ее локальный нагрев, расширение и генерация акустического импульса. Эти процессы могут быть эффективно смоделированы путем численного решения уравнений движения среды в форме Лагранжа.

Уравнения непрерывности имеет вид:

$$V = V_0 \left[\frac{\partial x_e}{\partial x_1} \left(\frac{\partial y_e}{\partial y_1} \frac{\partial z_e}{\partial z_1} - \frac{\partial y_e}{\partial z_1} \frac{\partial z_e}{\partial y_1} \right) - \right. \\ \left. - \frac{\partial y_e}{\partial x_1} \left(\frac{\partial x_e}{\partial y_1} \frac{\partial z_e}{\partial z_1} - \frac{\partial x_e}{\partial z_1} \frac{\partial z_e}{\partial y_1} \right) + \frac{\partial z_e}{\partial x_1} \left(\frac{\partial x_e}{\partial y_1} \frac{\partial y_e}{\partial z_1} - \frac{\partial x_e}{\partial z_1} \frac{\partial y_e}{\partial y_1} \right) \right], \quad (3)$$

где, $V_0 = 1/\rho_0$, $V = 1/\rho$ - начальный и текущий удельные объемы; (x_1, y_1, z_1) – лагранжевы координаты; (x_e, y_e, z_e) – эйлеровы координаты.

Уравнения движения в предположении отсутствия внешних сил записываются в виде:

$$\frac{\partial u_{x_e}}{\partial t} = -V_0 \left[\frac{\partial P}{\partial x_1} \left(\frac{\partial y_e}{\partial y_1} \frac{\partial z_e}{\partial z_1} - \frac{\partial y_e}{\partial z_1} \frac{\partial z_e}{\partial y_1} \right) - \right. \\ \left. - \frac{\partial y_e}{\partial x_1} \left(\frac{\partial P}{\partial y_1} \frac{\partial z_e}{\partial z_1} - \frac{\partial P}{\partial z_1} \frac{\partial z_e}{\partial y_1} \right) + \frac{\partial z_e}{\partial x_1} \left(\frac{\partial P}{\partial y_1} \frac{\partial y_e}{\partial z_1} - \frac{\partial P}{\partial z_1} \frac{\partial y_e}{\partial y_1} \right) \right], \quad (4)$$

$$\frac{\partial u_{y_e}}{\partial t} = -V_0 \left[\frac{\partial x_e}{\partial x_1} \left(\frac{\partial P}{\partial y_1} \frac{\partial z_e}{\partial z_1} - \frac{\partial P}{\partial z_1} \frac{\partial z_e}{\partial y_1} \right) - \frac{\partial P}{\partial x_1} \left(\frac{\partial x_e}{\partial y_1} \frac{\partial z_e}{\partial z_1} - \frac{\partial x_e}{\partial z_1} \frac{\partial z_e}{\partial y_1} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\partial z_e}{\partial x_1} \left(\frac{\partial x_e}{\partial y_1} \frac{\partial P}{\partial z_1} - \frac{\partial x_e}{\partial z_1} \frac{\partial P}{\partial y_1} \right) \right], \quad (5)$$

$$\frac{\partial u_{z_e}}{\partial t} = -V_0 \left[\frac{\partial x_e}{\partial x_1} \left(\frac{\partial y_e}{\partial y_1} \frac{\partial P}{\partial z_1} - \frac{\partial y_e}{\partial z_1} \frac{\partial P}{\partial y_1} \right) - \frac{\partial y_e}{\partial x_1} \left(\frac{\partial x_e}{\partial y_1} \frac{\partial P}{\partial z_1} - \frac{\partial x_e}{\partial z_1} \frac{\partial P}{\partial y_1} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\partial P}{\partial x_1} \left(\frac{\partial x_e}{\partial y_1} \frac{\partial y_e}{\partial z_1} - \frac{\partial x_e}{\partial z_1} \frac{\partial y_e}{\partial y_1} \right) \right]. \quad (6)$$

Уравнения изменения эйлеровых координат записываются следующим образом:

$$u_{x_e} = \frac{\partial x_e}{\partial t}, \quad u_{y_e} = \frac{\partial y_e}{\partial t}, \quad u_{z_e} = \frac{\partial z_e}{\partial t}. \quad (7)$$

В качестве уравнения состояния используем уравнение Ми-Грюнайзена [3]:

$$P = \rho_{i0} u_0^2 \left(1 - \frac{V_i}{V_{i0}} \right) + \Gamma_i \frac{C_i (T_i - T_0)}{V_i} + \Gamma_e \frac{C_e (T_e - T_0)}{V_e}, \quad (8)$$

где V_{i0} , $V_{i,e}$ начальный и текущий объемы, $V_{i0} = 1/\rho_{i0}$, $V_{i,e} = 1/\rho_{i,e}$, где ρ_{i0} , $\rho_{i,e}$ соответствующие плотности, $\Gamma_{i,e}$ коэффициенты Грюнайзена, u_0 скорость распространения звука в металле.

Результаты и обсуждение

При моделировании использовались теплофизические характеристики металлов (золото, никель), приведенные в таблице 1.

Таблица 1

Теплофизические и акустические характеристики рассматриваемых металлов.

	Au	Ni
C_e , Дж/см ³ К	$5.472 \cdot 10^{-2}$	$2.733 \cdot 10^{-2}$
k_T^e , Вт/см К	3.115	0.90
Γ_e	1.5	1.5
γ , Вт/см ³ К	$2.5 \cdot 10^{10}$	$4.05 \cdot 10^{12}$
C_i , Дж/см ³ К	2.550	3.910
Γ_i	1.11	1.83
u_S , см/с	$3.24 \cdot 10^5$	$5.63 \cdot 10^5$

Выбор этих двух металлов обусловлен значительной разницей в параметрах, характеризующих скорость релаксации энергии возбуждения электронов в ионной решетке, коэффициент теплопроводности и скорость звука. Большие значения коэффициента электрон-фононной релаксации в никеле одновременно с более низким значением коэффициента теплопроводности и более высоким значением скорости звука позволяют рассчитывать на более эффективное возбуждение акустических импульсов в никеле, поскольку первоначально нагретый объем при этих условиях должен быть меньше, и, следовательно, можно ожидать образования более резкого фронта волны сжатия. Проведены численные эксперименты по расчету структуры акустического импульса, генерируемого в металлическом слое, для различных типов лазерных пучков (гауссов пучок, оптический вихрь). Пространственное распределение температуры и давления после окончания лазерного импульса показано на рисунках 1 и 2.

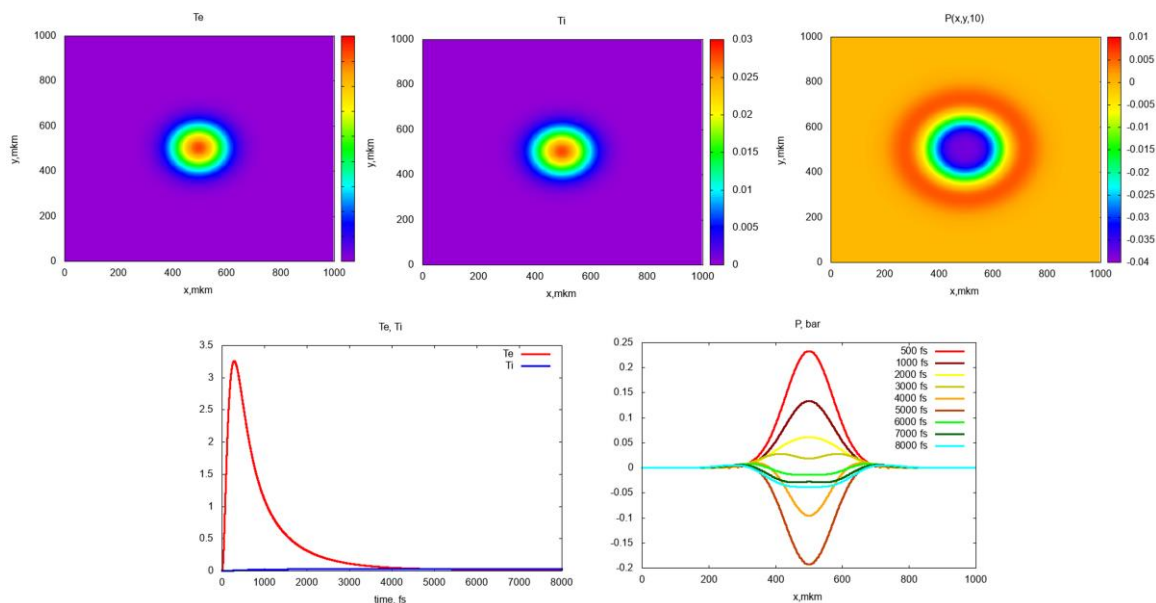


Рисунок 1 – Графики распределения температуры электронного газа, температуры ионной решетки, давления в приповерхностном слое золота в сечении, перпендикулярном направлению распространения гауссового светового пучка

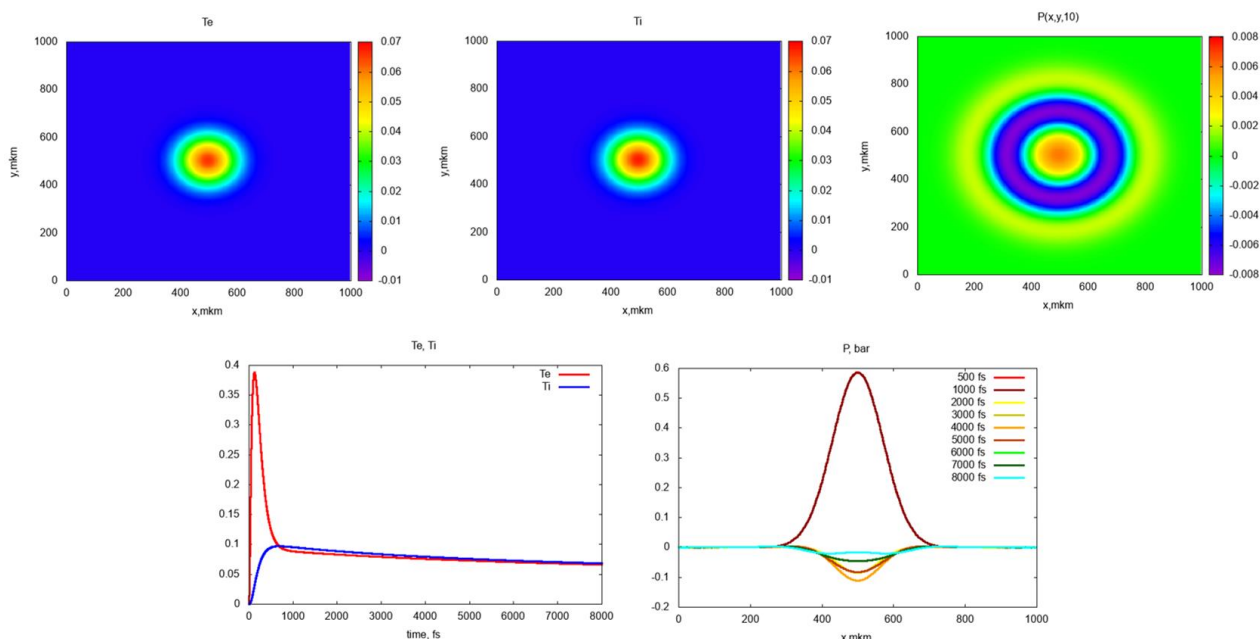


Рисунок 2 – Графики распределения температуры электронного газа, температуры ионной решетки, давления в приповерхностном слое никеля в сечении, перпендикулярном направлению распространения гауссова светового пучка

Как следует из тестового расчета для одномерной геометрии задачи при используемых параметрах золота установление температурного равновесия двух подсистем (электронной и ионной) происходит за время порядка 4 пс, а никеля – за 1 пс.

Заключение

Разработанная модель позволяет оценить результаты термомеханического воздействия ультракоротких лазерных импульсов на металлические слои. Данная модель основана на двухтемпературной модели для электронного газа и ионной решетки, а также на уравнениях движения сплошных сред в форме Лагранжа и уравнении состояния Ми-Грюнайзена.

Список литературы

1. Дж. Рэди. Действие мощного лазерного излучения. М.: Мир. 1974. 468с.
2. С. И. Анисимов, Я. А. Имас, Г. С. Романов, Ю. В. Ходыко. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1970. – 272с.
3. О. Г. Романов, Г. И. Желтов, Г. С. Романов. Воздействие фемтосекундных лазерных импульсов на металлические наночастицы в жидкости // Известия РАН. Серия физическая. – 2011. Т.75. – № 12. С.1691-1693.