

РАЗРАБОТКА И РЕАЛИЗАЦИЯ В МОДУЛЕ ЛОГОС-ТЕПЛО ДВУХТЕМПЕРАТУРНОЙ МОДЕЛИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЕПЛА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ УЛЬТРАКОРОТКОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА НА МЕТАЛЛЫ

Р. И. Карнова, В. А. Глазунов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Введение

В последние два десятилетия всё больше внимания привлекает к себе обработка металлов с помощью короткоимпульсных лазеров. Они широко используются для прецизионной обработки широкого класса материалов (лазерная сварка, резка труднообрабатываемых материалов, гравировка, бурение глубоких отверстий малого диаметра и т. д.).

Специфика воздействия сверхкоротких импульсов на металлы состоит в том, что тепло не успевает далеко распространиться за пределы области взаимодействия. Кроме того абляция (удаление) вещества происходит не в виде капель расплавленного материала (как в случае использования наносекундных лазерных импульсов), а в виде пара и плазмы. Эти факторы увеличивают точность обработки с возможностью получения резких границ на субмикронном уровне. Одной из закономерностей импульсного воздействия является то, что чем короче длительность и выше интенсивность излучения, тем больше наблюдается аномалий и отклонений в поведении процессов, тем ограниченнее возможности экспериментальных подходов и выше их стоимость. В этих ситуациях особую значимость приобретают теоретические представления на основе анализа и прогноза, осуществляемых методами математического моделирования [1].

Сложность моделирования заключается в том, что время воздействия, определяемое длительностью импульса, существенно меньше времени релаксации температуры от электронов к ионной решётке. Это не позволяет использовать традиционный подход однотемпературного приближения, и используются более сложные модели распространения тепла. Одним из подходов является использование двухтемпературного приближения, при котором раздельно вводятся электронную и решеточную температуры.

Двухтемпературная модель теплопроводности

Уравнения сохранения энергии для двухтемпературной модели при отсутствии деформаций записываются в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho E_e}{\partial t} = \text{div}(\chi_e \text{grad } T_e) - G(T_e - T_l) + Q_T \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho E_l}{\partial t} = \text{div}(\chi_l \text{grad } T_l) + G(T_e - T_l) \quad (2)$$

где:

ρ – плотность вещества;

E_e, E_l – внутренние удельные энергии электронов и решётки;

χ_e, χ_l – коэффициенты теплопроводности электронов и решётки;

T_e, T_l – температуры электронов и решётки;

G – коэффициент скорости обмена энергией электронов с решёткой;

$G(T_e - T_l)$ – определяет энергию, получаемую решеткой от электронного газа в единице объема в единицу времени, т. е. имеет физический смысл теплового источника для решетки;

Q_T – мощность, получаемая электронами в результате поглощения излучения, отнесенная к единице объема.

Численный метод решения

Для простоты, рассмотрим уравнение теплопроводности только для электронов. Для решётки все выкладки будут аналогичными. Проинтегрируем уравнение (1) по объему ячейки ΔV_P , ограниченной

поверхностью $\Sigma_P = \bigcup_{f=1}^F \Delta S_f$ и, используя формулу

Гаусса-Остроградского, запишем интегральный закон сохранения энергии:

$$\begin{aligned} \int_{\Delta V_P} \frac{\partial \rho E_e}{\partial t} dV - \oint_{\Sigma_P} (\chi_e \text{grad } T_e \cdot \vec{n}) dS &= \\ &= \int_{\Delta V_P} Q dV - \int_{\Delta V_P} G(T_e - T_l) dV \end{aligned} \quad (3)$$

Используя квадратурные формулы, заменим интегральные выражения разностными. При интегрировании будем использовать теорему о среднем. Тогда уравнение (3) в полудискретном виде запишется так:

Дельта-форма разностных уравнений

$$\begin{aligned} (\rho\Delta V)_P \left(\frac{\partial E_e}{\partial t} \right)_P - \sum_{f=1}^F (\chi_e \text{grad } T_e \cdot \vec{n})_f \Delta S_f &= \\ = (Q\Delta V)_P - G(T_e - T_l)(\Delta V)_P & \end{aligned} \quad (4)$$

Для описания численных алгоритмов обозначим через $\Lambda(T)$ разностный оператор, аппроксимирующий потоки тепла через грани ячейки.

Аппроксимация производной по времени

Производную по времени будем аппроксимировать по следующей формуле:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{\tau^n} \left(1 + \frac{\sigma\tau^n}{\tau^n + \tau^{n-1}} \right) (E^{n+1} - E^n) - \frac{\sigma\tau^n}{\tau^{n-1}(\tau^n + \tau^{n-1})} \times \\ \times (E^n - E^{n-1}), \end{aligned} \quad (5)$$

где параметр σ может принимать значения: $0 \leq \sigma \leq 1$. Для схемы первого порядка аппроксимации $\sigma = 0$. Для схемы второго порядка аппроксимации $\sigma = 1$.

Подставляя выражение для производной по времени (5) в (4) и аппроксимируя разностный оператор по верхнему временному слою, получим следующую неявную схему:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau^n} \left(1 + \frac{\sigma\tau^n}{\tau^n + \tau^{n-1}} \right) (\rho\Delta V)_P \left((E_e)_P^{n+1} - (E_e)_P^n \right) - \Lambda(T_e^{n+1}) = \\ = (Q\Delta V)_P + \frac{\sigma\tau^n (\rho\Delta V)_P}{\tau^{n-1}(\tau^n + \tau^{n-1})} \times \\ \times \left((E_e)_P^n - (E_e)_P^{n-1} \right) - G \left((T_e)_P^{n+1} - (T_l)_P^{n+1} \right) (\Delta V)_P, \end{aligned} \quad (6)$$

Определение теплофизических свойств веществ

При расчете нелинейных задач, в которых теплофизические свойства веществ и граничные условия зависят от решения, численное решение на новом временном слое находится методом итераций по нелинейности. В этом методе, значения теплофизических свойств веществ, таких как коэффициент теплопроводности, определяются по температуре с предыдущей итерации γ . Значение E^{n+1} определяется с использованием линеаризации по Ньютону:

$$\begin{aligned} E^{n+1} = E^{\gamma+1} = E^\gamma + \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)^\gamma (T^{\gamma+1} - T^\gamma) = \\ = E^\gamma + (C_p)^\gamma (T^{\gamma+1} - T^\gamma) \end{aligned} \quad (7)$$

Будем искать решение на новом временном слое по неявной схеме методом итераций. Тогда разностное уравнение примет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau^n} \left(1 + \frac{\sigma\tau^n}{\tau^n + \tau^{n-1}} \right) (\rho\Delta V)_P \left((E_e)_P^{\gamma+1} - (E_e)_P^\gamma \right) - \Lambda(T_e^{\gamma+1}) = \\ = \frac{\sigma(\rho\Delta V)_P}{(\tau^n + \tau^{n-1})} \left(\frac{\tau^n}{\tau^{n-1}} (E_e)_P^n - (E_e)_P^{n-1} \right) - G \left((T_e)_P^\gamma - (T_l)_P^\gamma \right) \times \\ \times (\Delta V)_P + (Q)_P^n (\Delta V)_P, \end{aligned} \quad (8)$$

где γ – номер итерации.

Проводя линеаризацию приращения внутренней энергии по (7), получим:

$$E^{\gamma+1} - E^\gamma = (C_p)^\gamma \Delta T + (E^\gamma - E^n) \quad (9)$$

где

$$\Delta T = T^{\gamma+1} - T^\gamma \quad (10)$$

Линеаризация потоков тепла приводит к выражению:

$$\Lambda(T^{\gamma+1}) = \Lambda(T^{\gamma+1}) - \Lambda(T^\gamma) + \Lambda(T^\gamma) = \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial T} \right) \Delta T + \Lambda(T^\gamma), \quad (11)$$

где

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial T} \right) \Delta T = \sum_{f=1}^F \left((\chi_e \text{grad } \Delta T) \cdot \vec{n} \right)_f \Delta S_f \quad (12)$$

С учетом (9)–(11) разностное уравнение (8) примет вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau^n} \left(1 + \frac{\sigma\tau^n}{\tau^n + \tau^{n-1}} \right) (\rho\Delta V)_P (C_e)_P^\gamma \Delta T_e - \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial T_e} \right)^\gamma \Delta T_e = \\ = \Lambda(T_e^\gamma) - G \left((T_e)_P^\gamma - (T_l)_P^\gamma \right) (\Delta V)_P - \\ - \frac{1}{\tau^n} \left\{ \left(1 + \frac{\sigma\tau^n}{\tau^n + \tau^{n-1}} \right) \left((E_e)_P^\gamma - (E_e)_P^n \right) - \frac{\sigma\tau^n}{(\tau^n + \tau^{n-1})} \times \right. \\ \left. \times \left(\frac{\tau^n}{\tau^{n-1}} (E_e)_P^n - (E_e)_P^{n-1} \right) \right\} (\rho\Delta V)_P + (Q)_P^n (\Delta V)_P \end{aligned} \quad (13)$$

Это так называемая дельта-форма разностных уравнений, в которой искомым решением является приращение температуры в ячейках разностной сетки, а правая часть разностных уравнений является невязкой, то есть погрешностью разностной аппроксимации уравнения баланса энергии.

Численное решение тестовых задач

Проверку реализованной двухтемпературной модели теплопроводности будем осуществлять на задачах, имеющих известное решение. В работах [2–3] описано численное решение задачи короткоимпульсного воздействия на тонкие металлические плёнки. Все приведенные ниже примеры имеют сходные постановки. Отличие состоит в облучаемом металле (золото, медь, титан, вольфрам), мощности и длительности воздействия. Поэтому приведём общую постановку задачи и описание математической модели. Значения теплофизических характеристик, энергии излучения, времени воздействия и полученные результаты будут приведены для каждого эксперимента в соответствующем подразделе.

Постановка задачи

Рассматривается задача теплопроводности в тонкой металлической плёнке толщиной L (рис. 1). Фронтальная поверхность плёнки ($z = 0$) облучается ультракоротким лазерным импульсом длительностью τ .

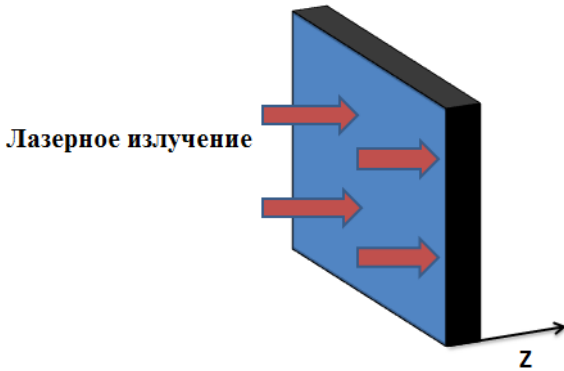


Рис. 1. Постановка задачи

Начальная температура электронов и решётки выбиралась равной 300 К:

$$T_e(t=0) = T_l(t=0) = 300$$

Так как длительность лазерного импульса невелика, теплообменом плёнки с окружающей средой можно пренебречь. Таким образом, для ионной температуры получаем граничное условие в виде:

$$q = 0$$

Теплоемкость и теплопроводность электронов рассчитываются по следующим формулам:

$$C_e = C_{e0} \times T_e$$

$$K_e = K_{e0} \times \frac{T_e}{T_l}$$

Здесь C_{e0} – коэффициент для теплоёмкости электронов, K_{e0} – коэффициент для электронной тепло-

проводности. Скорость электрон-решёточной релаксации является постоянной величиной.

Расчётная модель

При численном моделировании будем рассматривать фрагмент тонкой плёнки толщиной 100 нм. Для случая тонких металлических плёнок диаметр пятна облучения намного больше характерной глубины, на которой идут активные процессы, стимулированные лазерным облучением. Исходя из этого, нагрев носит существенно одномерный характер (в направлении оси Z), и размеры области (по осям X , Y) не оказывают влияния на прогрев. Область моделирования показана на рис. 2.

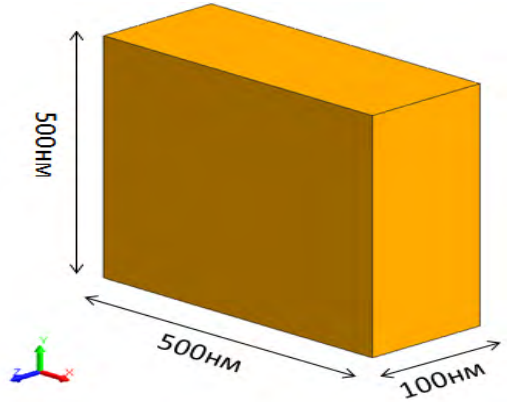


Рис. 2. Расчётная область

При численном моделировании будем рассматривать структурированную расчётную сетку, показанную на рис. 3.

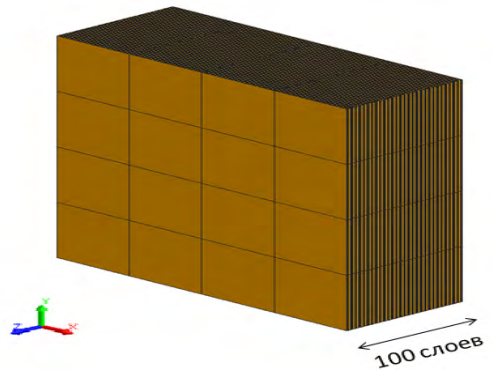


Рис. 3. Общий вид расчетной сетки

Ниже приведём результаты численного моделирования воздействия в модуле ЛОГОС-ТЕПЛО и их сравнение с решением, приведённым в работах [2–3]. Относительное отклонение решения в ЛОГОС-ТЕПЛО от результатов, приведённых в работах [2–3] будем определять по формуле:

$$\delta = \frac{|T_{LGS} - T_{ET}|}{|T_{ET}^{\max} - T_{ET}^{\min}|} \cdot 100 \%,$$

где T_{LGS} – значение величины, подсчитанной с помощью модуля ЛОГОС-ТЕПЛО, T_{ET} – значение величины из работ [2–3], T_{ET}^{max} – максимальное значение величины из работ [2–3], T_{ET}^{min} – минимальное значение величины из работ [2–3].

Нагрев золотой плёнки импульсом длительностью 200 фс

Рассмотрим первую задачу – нагрев тонкой золотой плёнки импульсом длительностью 200 фс.

Для металлов ослабление лазерного излучения при его распространении вглубь вещества описывается в соответствие с законом Ламберта – Бэра. Импульсы излучения лазера ультракороткой длительности хорошо аппроксимируются гауссовой зависимостью от времени.

В данной задаче функция источника нагрева имела следующий вид (рис. 4.):

$$Q(z, t) = \frac{2I(1-R)\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \cdot \tau} \exp\left(-4 \ln 2 \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right) \times \frac{e^{-z/\lambda_0}}{\lambda_0(1 - e^{-d/\lambda_0})}$$

Здесь I – плотность потока лазерного излучения, τ – длительность импульса, R – коэффициент отражения, d – толщина плёнки, λ_0 – глубина оптического поглощения.

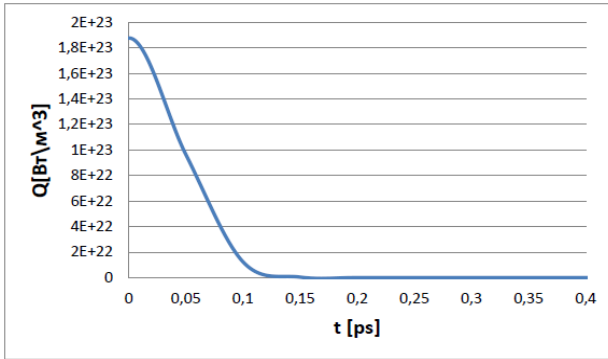


Рис. 4. График функции источника нагрева из работы [2]

Плёнка облучалась лазерным импульсом длительностью $\tau = 200$ фс с плотностью потока лазерного излучения $I = 450$ Дж/м². Вклад теплопроводности решётки в перенос тепла в плёнке не учитывался, так как на временах до нескольких десятков пикосекунд он пренебрежимо мал по сравнению со вкладом электронов. На рис. 5. приведены графики зависимости температуры электронов и решетки от времени в центральной ячейке на облучаемой границе пленки.

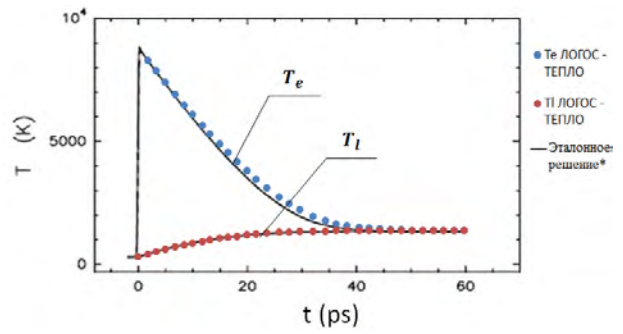


Рис. 5. График температур электронов и ионов

По итогам тестового расчета можно сделать вывод, что динамика нагрева электронов и ионной решетки из статьи и в расчёте ЛОГОС-ТЕПЛО имеет качественно одинаковый характер. Из численных значений в таблице и из рисунка, можно видеть, что время электрон-решёточной релаксации и температура решётки визуально совпадают. Наблюдается небольшое различие в температуре электронов и в установившейся температуре, не превышающее 0,5 %.

Нагрев золотой плёнки импульсом длительностью 100 фс

Рассмотрим вторую задачу нагрева тонкой золотой плёнки. В ней функция источника нагрева задавалась следующим образом:

$$Q(z, t) = \frac{2I(1-R)\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \cdot \tau} \exp\left(-4 \ln 2 \cdot \left(\frac{t - 2\tau}{\tau}\right)^2\right) \frac{e^{-z/\lambda_0}}{\lambda_0}$$

График функции источника представлен на рис. 6.

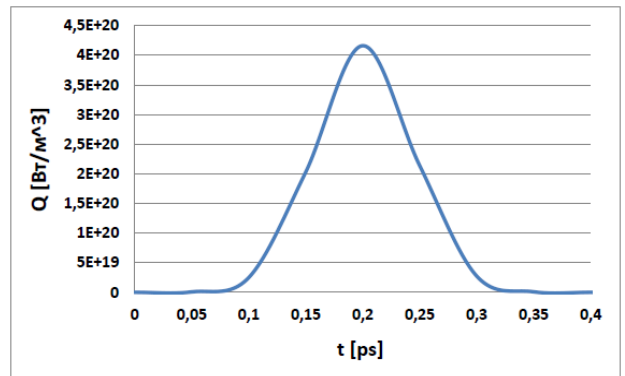


Рис. 6. График функции источника из работы [3]

Продолжительность лазерного импульса составляла $\tau = 100$ фс, плотностью потока лазерного излучения $I = 10$ Дж/м². Так же учитывался вклад теплопроводности решётки в перенос тепла в плёнке ($K_L = \text{const}$). Остальные параметры остались такими же, как и в 1 задаче. На рис. 7. приведены графики

зависимости температуры электронов от времени в центральной ячейке на облучаемой границе пленки.

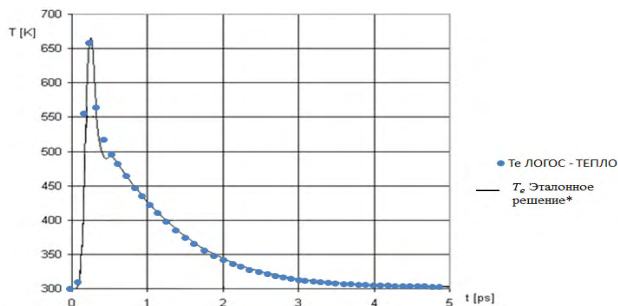


Рис. 7. График температуры электронов

Полученные в ЛОГОС результаты демонстрируют качественное и количественное совпадение с результатами, приведёнными в статье. Динамика нагрева и максимальная температура имеют незначительные отличия.

Однако следует отметить, что при остывании электронов в решении внешнего источника на момент времени $\sim 0,5$ пс наблюдается эффект обратного нагрева электронов, повторить который в ЛОГОС не удалось. При этом изучение статьи, использованной там модели и постановки численного эксперимента не дало ответ на вопрос наличия данного расхождения. Возможно, этот эффект обусловлен теплофизическими характеристиками материала и требует дополнительного исследования.

Нагрев тонкой медной плёнки ультракоротким лазерным импульсом

Рассмотрим задачу нагрева тонкой медной плёнки. Постановка задачи в данном случае полностью аналогична описанной выше задаче. На рис. 8. приведены графики зависимости температуры электронов от времени в центральной ячейке на облучаемой границе пленки.

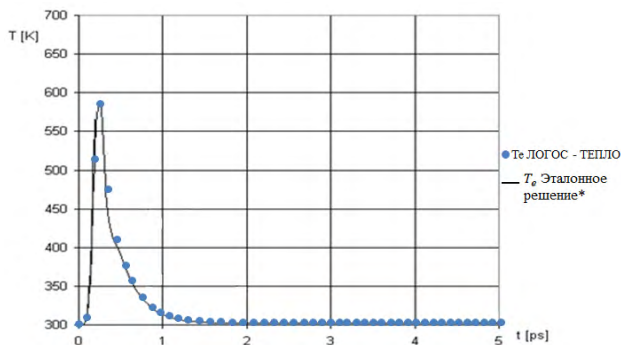


Рис. 8. График температуры электронов

Полученные результаты демонстрируют хорошее качественное и количественное совпадение с результатами из внешнего источника. Максимальное относительное отклонение не превышает 1,7 %.

Нагрев тонкой титановой плёнки ультракоротким лазерным импульсом

Рассмотрим задачу нагрева тонкой титановой плёнки. Постановка задачи аналогична описанной выше задаче. На рис. 9. приведены графики зависимости температуры электронов и решетки от времени в центральной ячейке на облучаемой границе пленки.

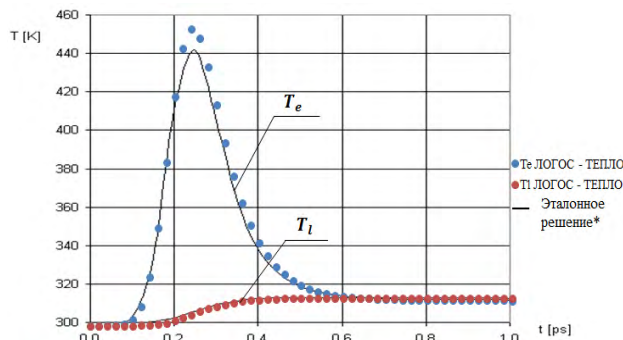


Рис. 9. График температур электронов и решётки

Полученные в ЛОГОС результаты по динамике нагрева электронов и ионной решётки показывают хорошее качественное совпадение. При этом максимальное относительное отклонение для максимальной и установившейся температур составляет 7,7 %.

На рис. 10 представлены профили распределения температуры электронов по толщине плёнки на различные моменты времени.

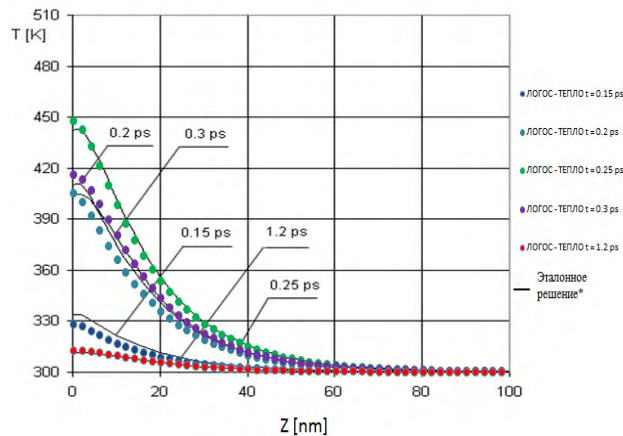


Рис. 10. Распределение температуры электронов вдоль оси Z на различные моменты времени

Из графиков видно, что в целом процесс распространения тепла в ЛОГОС имеет тот же характер, что и в использованном источнике. Различия наблюдаются на переходном этапе, в момент достижения пика лазерного излучения (кривые на моменты времени 0,2 пс и 0,3 пс).

Нагрев тонкой плёнки из вольфрама ультракоротким лазерным импульсом

Рассмотрим задачу нагрева тонкой плёнки из вольфрама. Постановка задачи аналогична описанной выше задаче. На рис. 11 приведены графики зависимости температуры электронов и решетки от времени в центральной ячейке на облучаемой границе пленки.

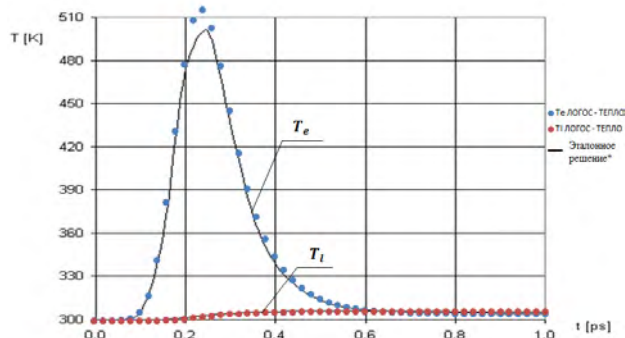


Рис. 11. График температуры электронов и решётки

Максимальная погрешность анализируемых величин оказалась равной 6,6 %.

На рис. 12 показаны профили распределения температуры электронов по толщине плёнки на различные моменты времени.

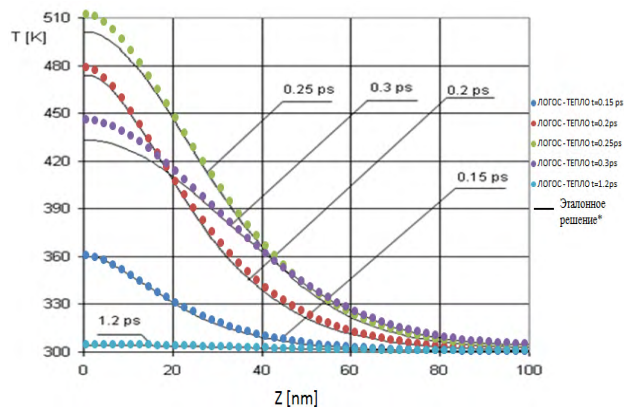


Рис. 12. Распределение температуры электронов вдоль оси Z на различные моменты времени

Как и при нагреве титановой плёнки в предыдущем примере, характер нагрева, процесс распространения температуры, полученные в ЛОГОС-ТЕПЛО и во внешнем источнике демонстрируют хорошее качественное и количественное совпадение.

Была исследована сходимость решения при уточнении сеточной дискретизации на примере задачи нагрева плёнки из вольфрама. На рис. 13 приведены графики зависимости температуры электронов от времени вблизи облучаемой границы пленки из вольфрама.

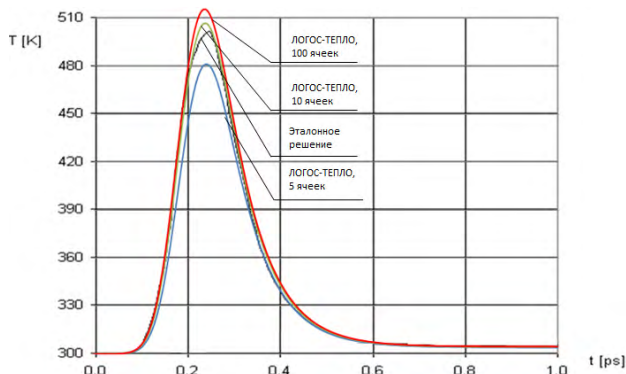


Рис. 13. Сходимость решения при уточнении сеточной дискретизации

Проверка на сходимость, показала, что при изменении количества слоев расчетной сетки по толщине плёнки решение сходится к точному.

Так же было произведено исследование решения по временной переменной на примере задачи нагрева плёнки из вольфрама. На рис. 14 приведены графики зависимости температуры электронов от времени вблизи облучаемой границы пленки из вольфрама.

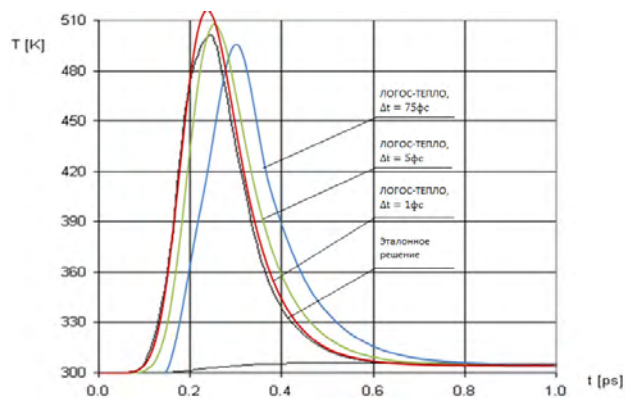


Рис. 14. Сходимость решения при уменьшении шага по времени

Проверка на сходимости показала, что при уменьшении шага по времени решение сходится к точному.

Было произведено сравнительное моделирование 1Т и 2Т моделей. На рис. 15 приведены графики зависимости температуры электронов от времени вблизи облучаемой границы пленки из вольфрама.

Данный пример показывает, что если длительность лазерных импульсов меньше, чем время установления теплового равновесия между электронами и ионами, то решение для изменения температуры в металле необходимо искать, используя двухтемпературную модель.

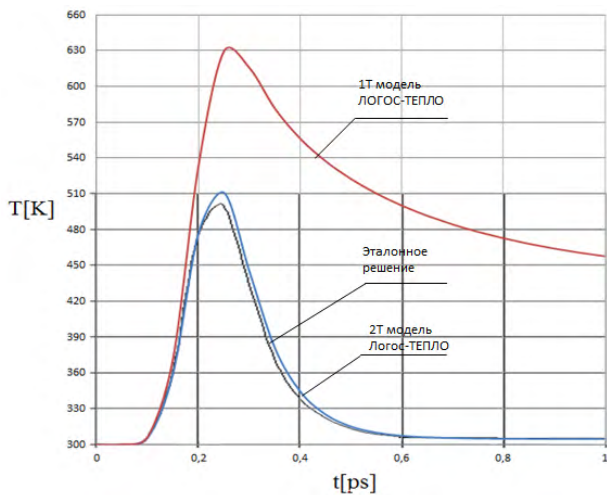


Рис. 15. Сравнение однотемпературной и двухтемпературной моделей

Однотемпературный подход в данном случае показал плохое качественное и количественное совпадение, относительное отклонение максимальной температуры электронов и установившейся температуры от численного решения, приведённого во внешнем источнике, составило более 64 %.

Заключение

В результате проведённой работы выполнена разработка и реализация в модуле ЛОГОС-ТЕПЛО численного метода решения задач нагрева тонких металлических плёнок ультракоротким лазерным импульсом. Была выполнена проверка разработан-

ной модели на примере решения тестовых задач в различных постановках, имеющих численное решение. Сравнение результатов расчета с результатами из внешних источников показало хорошее качественное и количественное совпадение. Было проведено исследование сходимости решения по времени и по пространству, результаты которого показали, что с уменьшением шага по времени и при уточнении сеточной дискретизации наблюдается сходимость численного решения к решению из внешних источников. Было проведено сравнительное моделирование нагрева плёнки ультракоротким импульсом с помощью однотемпературной и двухтемпературной моделей. Однотемпературный подход продемонстрировал свою неприменимость в данных задачах.

Таким образом, можно сделать вывод, что разработанная двухтемпературная модель сохраняет достаточную точность решения и может быть применима в реальных задачах.

Литература

1. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. М.: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”, 2009.
2. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. М.: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”, 2009.
3. Wellershoff S.-S., Hohlfield J. The role of electron-phonon coupling in femtosecond laser damage of metals // Appl. Phys. A / Digital Object Identifier (DOI) 10.1007, 1999.