

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ, ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

И. Сархадов

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

e-mail ibrohim@jinr.ru



Back

Close

1. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ МАТЕРИАЛОВ, ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ В РАМКАХ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И УРАВНЕНИЯ МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

2. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ, ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ В РАМКАХ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ГИПЕРБОЛИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

3. ПЛАН БУДУЩИХ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ



Back

Close

1.1 ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АБЛЯЦИИ МАТЕРИАЛОВ, ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ В РАМКАХ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

И.В. Амирханов, Н.Р. Саркар, И. Сархадов

Аннотация В настоящей работе проведено численное моделирование лазерной абляции материала под действием ультракоротких лазерных импульсов. Тепловой механизм лазерной абляции описывается в рамках одномерного нестационарного уравнения теплопроводности в системе координат, связанной с движущимся фронтом испарения. Действие лазера учтено через функции источника в уравнении теплопроводности, задавая координатную и временную зависимости источника лазера. Получены зависимости максимума температуры на поверхности образца и толщины слоя абляции от дозы излучения падающего лазерного импульса. Численные расчеты проведены с применением метода конечных разностей. Полученные результаты согласуются с результатами работ других авторов. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта № 19-01-00645а.



Back

Close

1.Исходные уравнения

$$\rho(T)c(T)\left[\frac{\partial T}{\partial t} - v(T_s)\frac{\partial T}{\partial z}\right] = \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial z}\right) + A(z, t), \quad (1)$$

$$T(z, 0) = T_0; \quad 0 \leq z \leq z_{max}, \quad (2)$$

$$\lambda(T)\frac{\partial T(z, t)}{\partial z}\Big|_{z=0} = v(T_s)L_{ev}\rho; \quad T(z_{max}, t) = T_0;$$

$$h = \int_0^t v(t)dt, \quad T_s = T(0, t), \quad A(z, t) = f_1(z)f_2(t),$$

$$f_1(z) = A_s \alpha e^{-\alpha z} e^{-\alpha_g h}, \quad A_s = 1 - R(T_s), \quad f_2(t) = I_0 f(t), \quad \Phi = \int_0^\infty f_2(t)dt$$

$$f(t) = \frac{t}{t_1} \exp\left(-\frac{t}{t_1}\right); \quad \lambda(T) = 0,155 \cdot (T/300)^{0,28} \frac{W}{mK},$$

$$c(T) = 2550 - 1590 \cdot \exp[(300 - T)/460] \frac{J}{kgK}, \quad v = v_0 e^{-T_a/T_s},$$

$$t_1 = 6,13 \text{ ns}, \quad v_0 = 3 \cdot 10^4 \text{ m/s}; \quad T_a = 15700 \text{ K}.$$

На рис.1 приведены графики этих зависимостей.



Back

Close

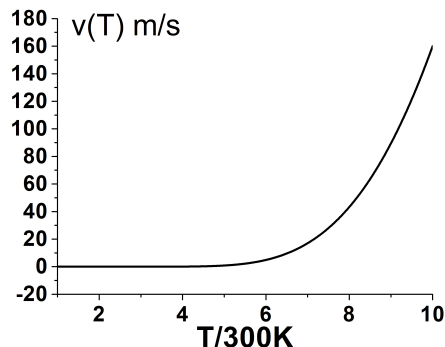
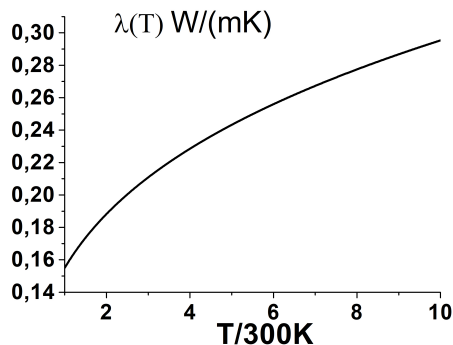
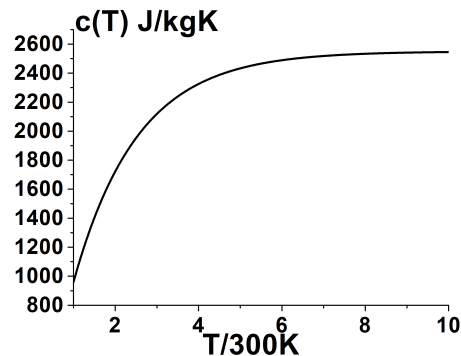
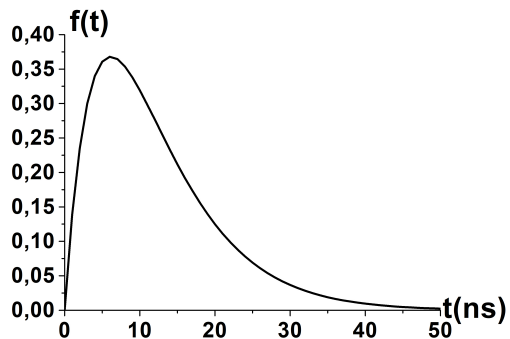


Рис.1. Временная форма источника $f(t)$, температурная зависимость удельной теплоемкости $c(T)$, коэффициента теплопроводности $\lambda(T)$ и скорости перемещения границы $v(T)$ из-за испарения.



Back

Close

2. Численный эксперимент и обсуждение его результатов

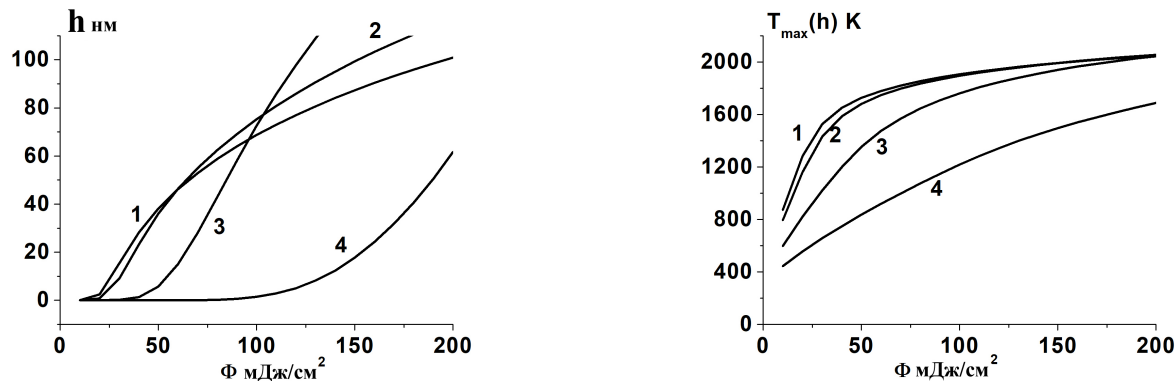


Рис.2. Зависимости максимума температуры на поверхности образца $T_{\text{max}}(h(t); t$ и глубина кратера $h(t)$ от доза облучения Φ для четырех вариантов значений A_s, α .



3. Заключение

Для заданной дозы облучения образца получены профили температуры образца при разных временах, динамики перемещения границы образца из-за испарения, скорости перемещения этой границы и температуры образца на движущей границе. Получены зависимости максимума температуры на поверхности образца и толщины слоя абляции от дозы излучения падающего лазерного импульса.

Численные расчеты проведены с применением метода конечных разностей. Полученные результаты согласуются с результатами работ других авторов. При использовании более коротких лазерных импульсов в кинетике абляции возникают особенности, которые уже нельзя описать в рамках обычной тепловой модели. В этом случае исследования проводятся в рамках других моделей (двухтемпературной модели, гидродинамической модели и т.д.), что является предметом дальнейших исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов № 19-01-00645а, №20- 51-44001 монг-а.

[Back](#)[Close](#)

1.2 ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОНЕЧНОЙ ТОЛЩИНЫ ОБРАЗЦА НА ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ МАТЕРИАЛОВ

¹И.В. Амирханов, ¹И. Сархадов, ¹З.К. Тухлиев, ²Х. Гафуров

¹ Лаборатория информационных технологий,

Объединенный Институт Ядерных Исследований,

141980, ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия

ibrohim@jinr.ru

² Худжандский государственный университет имени академика
Бободжана Гафурова, Таджикистан



Back

Close

Аннотация В предыдущих работах были проведены численное моделирование лазерной абляции материалов, возникающей под действием ультракоротких лазерных импульсов в полуограниченных образцах. Тепловой механизм лазерной абляции описывались в рамках одномерного нестационарного уравнения теплопроводности в системе координат, связанной с движущимся фронтом испарения.

Действие лазера было учтено через функции источника в уравнении теплопроводности, задавая координатную и временную зависимости источника лазера.

Были получены зависимости максимума температуры на поверхности образца и толщины слоя абляции от дозы излучения падающего лазерного импульса. Полученные результаты согласовались с результатами работ других авторов.

В настоящей работе проведено аналогичное численное исследование в образцах конечной толщины. При этом абляция материала происходит не только с первой границей образца на которую падает лазерный импульс, но и со второй границей образца. Уравнение теплопроводности и граничные условия составлены с учетом этих эффектов. Приведены численные результаты моделирования в за-



Back

Close

висимости от толщины образца, толщины слоя абляции от дозы излучения падающего лазерного импульса.

Постановка задачи

Численное моделирование лазерной абляции материалов в образцах конечных размеров проведено на основе уравнения теплопроводности, с учетом перемещения обеих границ из-за испарения:

$$\rho c \left[\frac{\partial T}{\partial t} - v_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \frac{1}{D^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + A(z, t), 0 < z < 1; \quad (3)$$

$$v_{eff} = \frac{v_{1Ph}(1 - z) - zv_{2Ph}}{D}, \quad A(z, t) = I_0 A_s \alpha e^{-\alpha z D} e^{-\alpha_g h_1(t)} e^{-t/t_1} t/t_1,$$

$$D = d - h_1(t) - h_2(t), \quad h_\alpha(t) = \int_0^t v_{\alpha Ph}(t) dt, \quad \alpha = 1, 2.$$

$$T(z, 0) = T_0; \quad 0 \leq z \leq 1; \quad (4)$$

$$q(0, t) = -DL_{ev}\rho v_{1Ph}(T(0, t)); \quad q(1, t) = DL_{ev}\rho v_{2Ph}(T(1, t)). \quad (5)$$

$$q(x, t) = -\lambda \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=x}.$$



Back

Close

Здесь $c(T)$, $\lambda(T)$, $\rho(T)$ —соответственно удельная теплоемкость, теплопроводность и плотность материала при температуре $T(z, t)$, D , $h_1(t)$, $h_2(t)$ —соответственно толщина образца, глубины кратера на левой и правой поверхностях образца в момент времени t , v_{1Ph} , v_{2Ph} —скорости перемещения границ из-за испарения, L_{ev} —удельная теплота сублимации.

Временную форму источника $f(t)$, температурную зависимость скорости перемещения границы из-за испарения $v_s(T)$, удельную теплоемкость $c(T)$ и теплопроводность $\lambda(T)$ взяты для материала полиимида, как и в работе [1]:

Заключение

В работе [21] численное моделирование лазерной абляции материалов было проведено для полуограниченных образцов. В настоящей работе предложена аналогичная постановка задачи для образцов конечной толщины. Планируется численным моделированием выявить влияния конечной толщины образца на его абляцию.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов № 19-01-00645а и № 20-51-44001 монг-а.



Back

Close

Список литературы

- [1] Фокин В.Б. Континуально-атоматическая модель и ее применение для численного расчета воздействия одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импульса на металлы. Диссертация кандидата физико-математических наук, Москва-2017г.
- [2] Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции. УФН, 2002г., т. 172, №3, стр. 301-333.
- [3] Вейко В.П., Либенсон М.Н., Червяков Г.Г., Яковлев Е.Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика. /Под ре. В.И. Конова. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. –312с. – ISBN 978-5-9221-0934-5.
- [4] Амирханов И.В., Саркер Н.Р., Сархадов И. Численное моделирование лазерной абляции материалов. Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science., ISSN:2658-4670,

[Back](#)[Close](#)

Изд:Российский университет дружбы народов. Vol. 28, N4,
2020y., ps. 398-405.

13/93



Back

Close

1.3 ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ МАТЕРИАЛОВ В ОБРАЗЦАХ КОНЕЧНОГО РАЗМЕРА

¹И.В. Амирханов, ¹И. Сархадов, ¹З.К. Тухлиев, ²Х. Гафуров

¹ *Лаборатория информационных технологий,*

Объединенный Институт Ядерных Исследований,

141980, ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия

`ibrohim@jinr.ru`

² *Худжандский государственный университет имени академика
Бободжана Гафурова, Таджикистан*

,



Back

Close

Аннотация

В предыдущих работах были проведены численное моделирование лазерной абляции материалов, возникающей под действием ультракоротких лазерных импульсов в полуограниченных образцах. Тепловой механизм лазерной абляции описывались в рамках одномерного нестационарного уравнения теплопроводности в системе координат, связанной с движущимся фронтом испарения.

Действие лазера было учтено через функции источника в уравнении теплопроводности, задавая координатную и временную зависимости источника лазера.

Были получены зависимости максимума температуры на поверхности образца и толщины слоя абляции от дозы излучения падающего лазерного импульса. Полученные результаты согласовались с результатами работ других авторов.

В настоящей работе проведено аналогичное численное исследование в образцах конечной толщины. При этом абляция материала происходит не только с первой границей образца на которую падает лазерный импульс, но и со второй границей образца. Уравнение теплопроводности и граничные условия составлены с учетом этих

[Back](#)[Close](#)

эффектов. Приведены численные результаты моделирования в зависимости от толщины образца, толщины слоя абляции от дозы излучения падающего лазерного импульса.

Введение

В последние годы импульсная лазерная абляция [1-3] (любой процесс лазерно-стимулированного удаления вещества, включая эмиссию электронов) различных материалов привлекает все больший интерес с точки зрения фундаментальных исследований процессов в веществе в экстремальных условиях сверхбыстрого подвода энергии: речь идет о построении новой физической теории, описывающей сильно нелинейные эффекты.

Для детального анализа процессов в эксперименте требуется измерять различные характеристики процессов абляции с пико- и фемтосекундным временным разрешением, что само по себе является достаточно сложной задачей. Поэтому задача математического моделирования физических явлений в этой области становится чрезвычайно актуальной.

Процесс испарения математически описывают в рамках краевой задачи теплопроводности для конденсированной среды в системе



Back

Close

координат, связанной с подвижной межфазной границей твердое тело–пар или расплав–пар, на которой происходит испарение. Если не учитывать боковой отвод энергии лазерного излучения за счет теплопроводности, что справедливо при жестком условии $r_0 \gg \sqrt{a_T \tau}$, где τ –продолжительность воздействия лазерного луча на материал, a_T – температурапроводность, r_0 –радиус пятна нагрева, то задача о движении границы испарения может быть рассмотрена в рамках одномерной модели [2].

Постановка задачи

Численное моделирование лазерной абляции материалов в образцах конечных размеров проведено на основе уравнения теплопроводности, с учетом перемещения обеих границ из-за испарения:

$$\rho c \left[\frac{\partial T}{\partial t} - v_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \frac{1}{D^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + A(z, t), 0 < z < 1; \quad (6)$$

$$v_{eff} = \frac{v_{1Ph}(1 - z) - zv_{2Ph}}{D}, \quad A(z, t) = I_0 A_s \alpha e^{-\alpha z D} e^{-\alpha_g h_1(t)} e^{-t/t_1} t/t_1,$$



Back

Close

$$D = d - h_1(t) - h_2(t), \quad h_\alpha(t) = \int_0^t v_{\alpha Ph}(t) dt, \quad \alpha = 1, 2.$$

$$T(z, 0) = T_0; \quad 0 \leq z \leq 1; \quad (7)$$

$$q(0, t) = -DL_{ev}\rho v_{1Ph}(T(0, t)); \quad q(1, t) = DL_{ev}\rho v_{2Ph}(T(1, t)). \quad (8)$$

$$q(x, t) = -\lambda \left. \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \right|_{z=x}.$$

Здесь $c(T)$, $\lambda(T)$, $\rho(T)$ —соответственно удельная теплоемкость, теплопроводность и плотность материала при температуре $T(z, t)$, D , $h_1(t)$, $h_2(t)$ —соответственно толщина образца, глубины кратера на левой и правой поверхностях образца в момент времени t , v_{1Ph} , v_{2Ph} —скорости перемещения границ из-за испарения, L_{ev} —удельная теплота сублимации.

Временную форму источника $f(t)$, температурную зависимость скорости перемещения границы из-за испарения $v_s(T)$, удельную теплоемкость $c(T)$ и теплопроводность $\lambda(T)$ взяты для материала полиимида, как и в работе [1]:

$$f(t) = (t/t_1) \exp(-t/t_1); \quad t_1 = 6, 13 \text{ ns},$$



Back

Close

$$c(T) = 2550 - 1590 \cdot \exp[(300 - T)/460] \frac{J}{kgK},$$

$$\lambda(T) = 0,155 \cdot (T/300)^{0,28} \frac{W}{mK},$$

$$v = v_0 e^{-T_a/T_s}, \quad v_0 = 3 \cdot 10^4 m/s; \quad T_a = 15700 \text{ K}.$$

На рис.1 приведены графики этих зависимостей. Источник удовлетворяет условие нормировки:

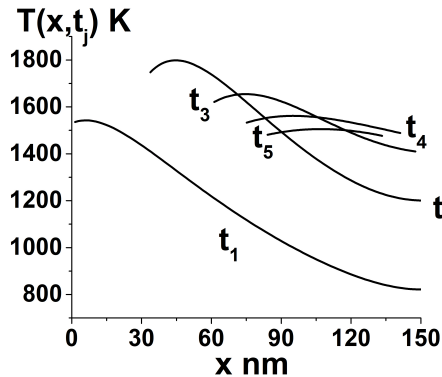
$$\int_0^\infty I(t)dt = I_0 \int_0^\infty f(t)dt = I_0 t_1 = \Phi.$$

До проведения численного моделирования лазерной абляции материалов, сразу можно заметить отличие постановки задачи для ограниченного образца от постановкой аналогичной задачи для полуограниченного образца. Во первых в уравнении (1) появился переменная толщина образа $D(t)$. Во вторых в скорость $v_{eff}(t)$ присутствует не только скорость перемещения первой границы $v_{1ph}(t)$, но и $v_{2ph}(t)$. В третьих толщина образца влияет и на пространственную часть источника. Наконец, толщина образца влияет также и на граничные условия.

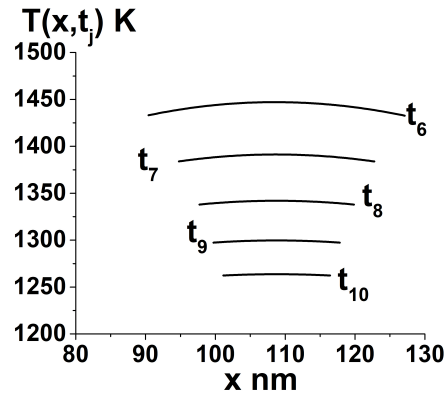


Back

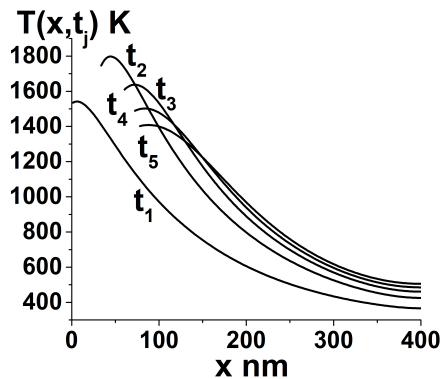
Close



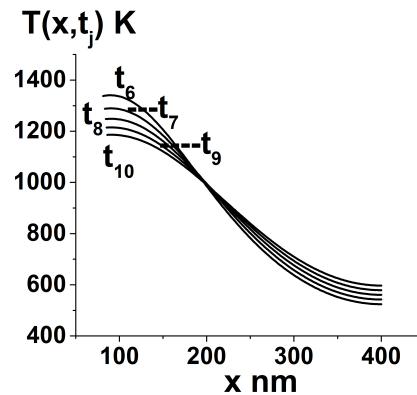
a)



b)



c)



d)

Рис.3. Динамики профилей температур при временах $t_i = i \cdot 10 \text{ ns}$ для образцов с толщинами $d_1 = 150 \text{ nm}$ (a,b) и $d_2 = 400 \text{ nm}$ (c,d)

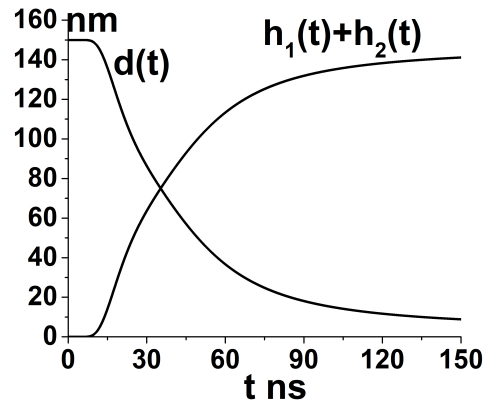
Обсуждение численных результатов

Проведено численное моделирование влияния конечной толщины образцов на лазерной абляции материалов с использованием метода конечных разностей явной и неявной численных схем. Рисунки 2-4 отражают результаты численного моделирования. Как видно один и тот же флюенс энергии имеет разные влияния в зависимости от толщины образца. В относительно тонких образцах абляция материалов происходит с обеих границ, когда в противном случае абляция происходит только с первой границы. В тонких образцах суммарная толщина испарения больше чем в случае толстых образцах. Около границ образца существует его перегрев в случае тонких образцах. В противном случае перегрев присутствует только на первой границе. Путем подбора толщины образца можно достигать наиболее оптимальное испарения материала, т.е. достигать наибольшую суммарную толщину испарения с обеих границ.

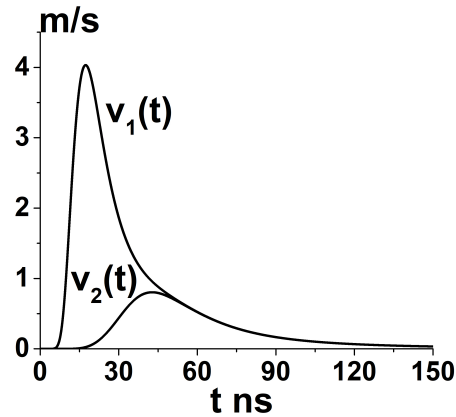


Back

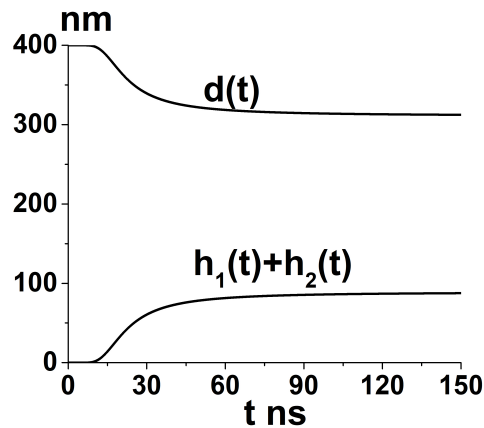
Close



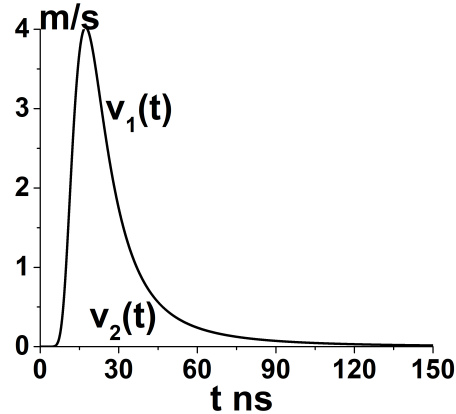
a)



b)



c)



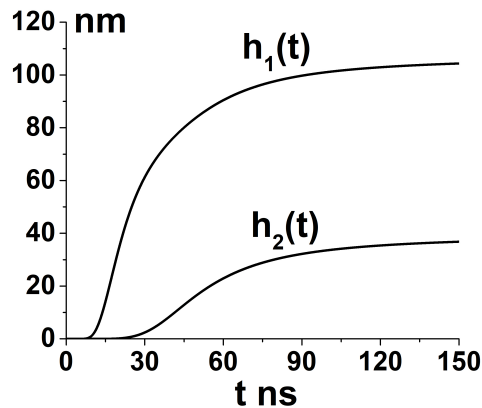
d)

Рис. 4. Динамики толщины образца и суммарной толщины смещений первой и второй границ, для образцов с толщинами $d_1 = 150 \text{ nm}$ (a,b) и $d_2 = 400 \text{ nm}$ (c,d)

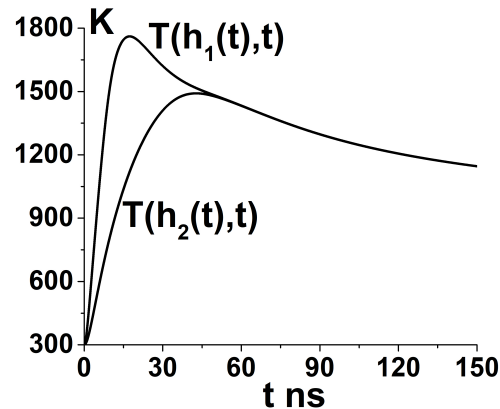


Back

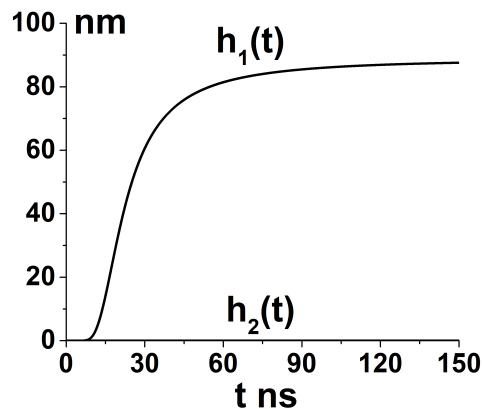
Close



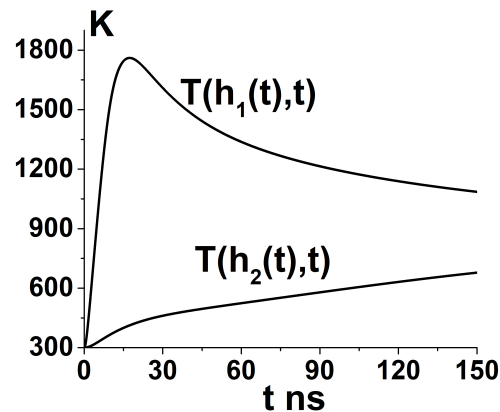
a)



b)



c)



d)

Рис. 5. Динамики толщин слоев испарений и температур в первой и второй границах, для образцов с толщинами $d_1 = 150 \text{ nm}$ (a,b) и $d_2 = 400 \text{ nm}$ (c,d).

Заключение

В работе [21] численное моделирование лазерной абляции материалов было проведено для полуограниченных образцов. В настоящей работе предложена аналогичная постановка задачи для образцов конечной толщины. Планируется численным моделированием выявить влияния конечной толщины образца на его абляцию.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов № 19-01-00645а и № 20-51-44001 монг-а.

[Back](#)[Close](#)

Список литературы

- [1] Фокин В.Б. Континуально-атоматическая модель и ее применение для численного расчета воздействия одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импульса на металлы. Диссертация кандидата физико-математических наук, Москва-2017г.
- [2] Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции. УФН, 2002г., т. 172, №3, стр. 301-333.
- [3] Вейко В.П., Либенсон М.Н., Червяков Г.Г., Яковлев Е.Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика. /Под ре. В.И. Конова. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. –312с. – ISBN 978-5-9221-0934-5.
- [4] Амирханов И.В., Саркер Н.Р., Сархадов И. Численное моделирование лазерной абляции материалов. Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science., ISSN:2658-4670,

[Back](#)[Close](#)

Изд:Российский университет дружбы народов. Vol. 28, N4, 2020y., ps. 398-405.

1.4 МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ МАТЕРИАЛОВ В РАМКАХ МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

¹И.В. Амирханов, ¹И. Сархадов, ¹З.К. Тухлиев, ²Х. Гафуров

¹ *Лаборатория информационных технологий,*

Объединенный Институт Ядерных Исследований,

141980, ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия

ibrohim@jinr.ru

² *Худжандский государственный университет имени академика
Бободжана Гафурова*



Back

Close

Аннотация.

В предыдущих работах были проведены численное моделирование лазерной абляции материалов, возникающей под действием ультракоротких лазерных импульсов в полуограниченных образцах и образцах конечной толщины. Тепловой механизм лазерной абляции описывались в рамках одномерного нестационарного уравнения теплопроводности в системе координат, связанной с движущимся фронтом испарения. Действие лазера было учтено через функции источника в уравнении теплопроводности, задавая координатную и временную зависимости источника лазера. Были получены зависимости максимума температуры на поверхности образца и толщины слоя абляции от дозы излучения падающего лазерного импульса.

В настоящей работе аналогичное моделирование проведено для полуограниченных образцах в рамках двухтемпературной модели термического пика, которая состоит из двух взаимосвязанных уравнений теплопроводностей для электронного газа и кристаллической решетки.

[Back](#)[Close](#)

Введение

В последние годы импульсная лазерная абляция [9]-[2] (любой процесс лазерно-стимулированного удаления вещества, включая эмиссию электронов) различных материалов привлекает все больший интерес с точки зрения фундаментальных исследований процессов в веществе в экстремальных условиях сверхбыстрого подвода энергии: речь идет о построении новой физической теории, описывающей сильно нелинейные эффекты.

Для детального анализа процессов в эксперименте требуется измерять различные характеристики процессов абляции с пико- и фемтосекундным временным разрешением, что само по себе является достаточно сложной задачей. Поэтому задача математического моделирования физических явлений в этой области становится чрезвычайно актуальным.

Процесс испарения математически описывают в рамках краевой задачи теплопроводности для конденсированной среды в системе координат, связанной с подвижной межфазной границей твердое тело–пар или расплав–пар, на которой происходит испарение. Если не учитывать боковой отвод энергии лазерного излучения за

[Back](#)[Close](#)

счет теплопроводности, что справедливо при жестком условии $r_0 \gg \sqrt{a_T \tau}$, где τ – продолжительность воздействия лазерного луча на материал, a_T – температуропроводность, r_0 – радиус пятна нагрева, то задача о движении границы испарения может быть рассмотрена в рамках одномерной модели [2].

Постановка задачи

Моделирование лазерной абляции материалов проведено на основе модели термического пика [2], которая состоит из уравнений (21)-(22) с начальными и граничными условиями (23):

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = C_e v_\varphi \frac{\partial T_e}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - \gamma(T_e - T_i) + A(z, t), \quad (9)$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = C_i v_\varphi \frac{\partial T_i}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) + \gamma(T_e - T_i), \quad (10)$$

$$0 < z < z_{max}; A(z, t) = f_1(z) f_2(t), f_1(z) = A_s \beta e^{-\beta z}, f_2(t) = I_0 e^{-t/t_1} t/t_1,$$

$$A_s = 1 - R(T_{is}), v_\varphi = v_0 \exp(-T_a/T_{is}); v_\varphi = \frac{dh}{dt}; T_{as} = T_\alpha(0, t); \alpha = e, i,$$

$$T_\alpha(z, 0) = T_0; \lambda_\alpha \frac{\partial T_\alpha(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} = Q_\alpha; h(0) = 0, \quad (11)$$



Back

Close

$$T_\alpha(z_{max}, t) = T_0; \quad Q_e = b_R K_B T_{es}^3 \exp(-T_u/T_{es})/q_e, \quad Q_i = L_{ev} \rho v_\varphi(T_{is}).$$

Здесь T_e, T_i —температурные поля электронного газа и кристаллической решетки облучаемого образца, $C_e, C_i, \lambda_e, \lambda_i$ —соответственно удельные теплоемкости и коэффициенты теплопроводности электронного газа и кристаллической решетки, γ —коэффициент электрон-фононного взаимодействия электронной подсистемы с решеткой; $A(z, t)$ —функция источника, которая определяет плотность мощности тепловыделения в точке с координатой z в момент времени t , ρ, v_φ —плотность и скорость абляции материала, T_a —энергия активации, T_u —работа выхода, T_0 —начальная температура образца, b_R —постоянная Ричардсона, K_B —постоянная Больцмана, q_e —заряд электрона, $h(t)$ —толщина удаленного слоя в момент времени t , L_{ev} —удельная теплота сублимации, Φ, I_0, β —соответственно поток энергии, интенсивность и коэффициент поглощения лазера, A_s —поглощательная способность. Функция $f_2(t)$ и параметры p_e, p_i удовлетворяют следующими условиями нормировок:

$$\Phi = \int_0^\infty f_2(t) dt = I_0 t_1.$$



Back

Close

Численные результаты

Численные моделирования проведены для материала алюминия с применением метода конечных разностей явной схемы. Аналогичная задача решалась нами для другого материала в рамках модели уравнения теплопроводности в работе [21]. Параметры материала образца и источника приведены из работы [2]:

$$C_e = 40350 \text{ Дж}/(\text{м}^3 \cdot \text{K}), \quad C_i = 2.43 \cdot 10^6 \text{ Дж}/(\text{м}^3 \cdot \text{K}), \quad \lambda_e = 237 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{K}),$$

$$\lambda_i = 100 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{K}), \quad \gamma = 4.05 \cdot 10^{15} \text{ Вт}/(\text{м}^3 \cdot \text{K}), \quad \rho = 2688 \text{ кг}/\text{м}^3,$$

$$v_0 = 4140 \text{ м}/\text{с}, \quad T_a = 35240 \text{ K}, \quad \beta = 1.516 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}, \quad T_u = 39400 \text{ K},$$

$$T_0 = 300 \text{ K}, \quad b_R = 120.4 \cdot 10^4 \text{ А}/(\text{м}^2 \cdot \text{K}^2), \quad K_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж}/\text{К},$$

$$\Phi = 1500 \text{ Дж}/\text{м}^2, \quad t_1 = 1 \text{ пс}, \quad A_s = 1, \quad q_e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}, \quad L_{ev} = 10^7 \text{ Дж}/\text{кг},$$

Масштабы обезразмеривания по координате и времени выбраны: $\Delta z = z_0 = 10^{-7} \text{ м}, \quad \Delta t = t_0 = 10^{-12} \text{ с}.$



Back

Close

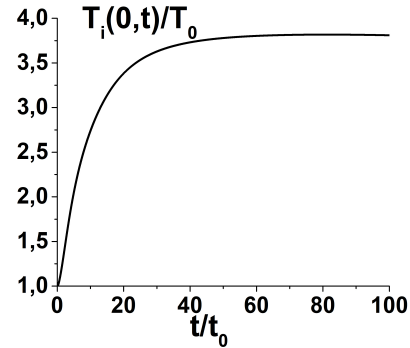
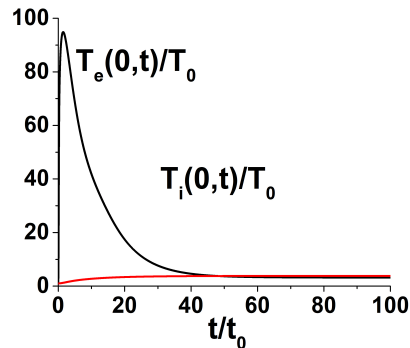
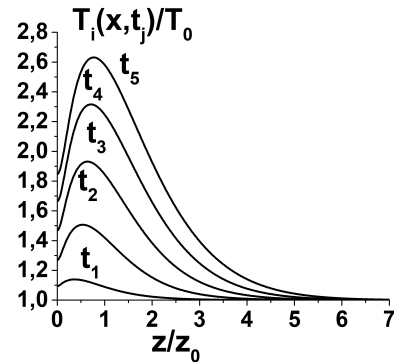
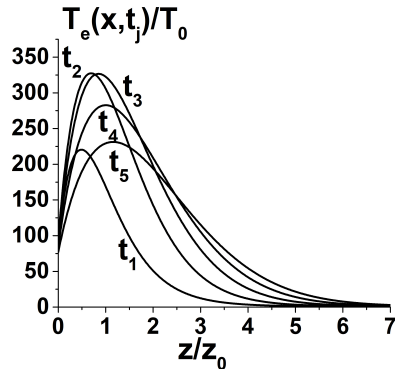


Рис.1. Профили температур электронного газа $T_e(x, t)$ и кристаллической решетки $T_i(x, t)$ ($T_0 = 300K$, $z_0 = 10^{-7}$ м) при временах ($t_0 = 10^{-12}$ с) $t_j = j \cdot t_0$; $j = 1, 2, \dots, 5$ и их динамики на поверхности образца, полученные в рамках модели термического пика, с учетом эмиссии электронов и испарения кристаллической решетки.


[Back](#)
[Close](#)

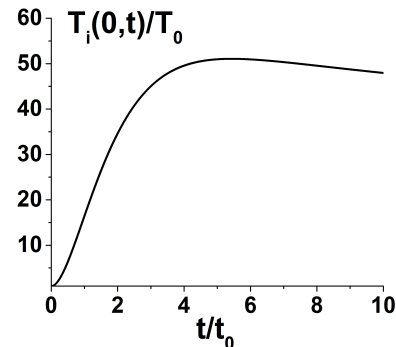
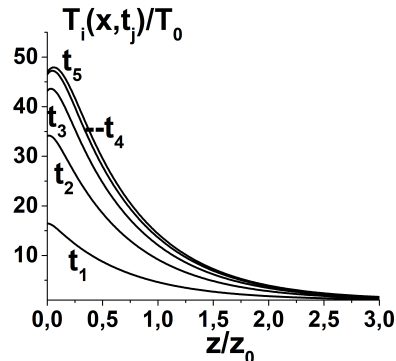
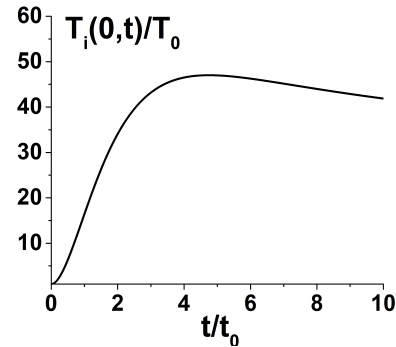
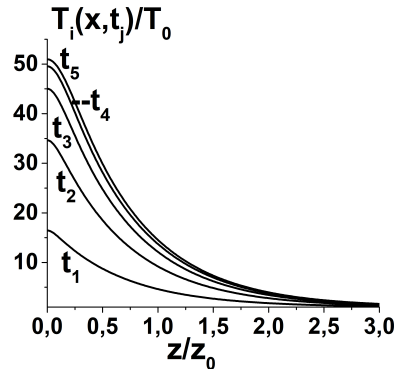


Рис.2. Профили температуры кристаллической решетки $T_i(x, t)$ ($T_0 = 300\text{K}$, $z_0 = 10^{-7}\text{ м}$) при временах ($t_0 = 10^{-12}\text{ с}$) $t_j = j \cdot t_0$; $j = 1, 2, \dots, 5$ без учета и с учетом испарения кристаллической решетки и ее динамики на поверхности образца, полученные в рамках обычной модели уравнения теплопроводности для кристаллической решетки.



Back

Close

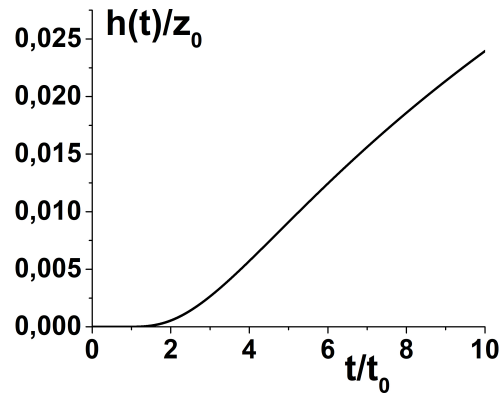
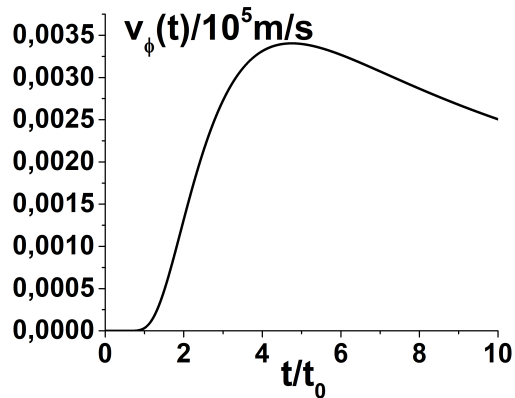


Рис.3. Динамики скорости абляции и толщины удаленного слоя, полученные в рамках обычной модели уравнения теплопроводности для кристаллической решетки.



Back

Close

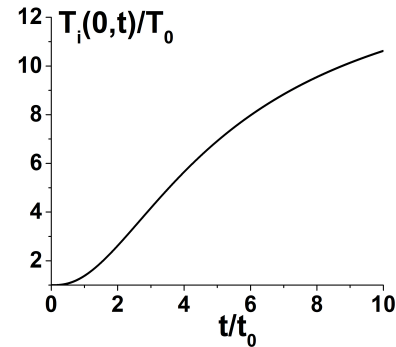
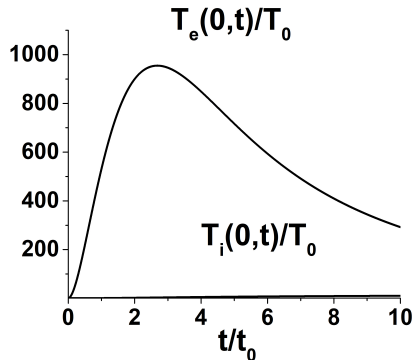
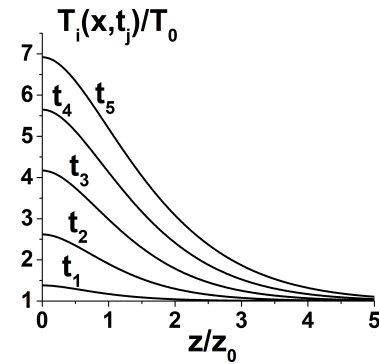
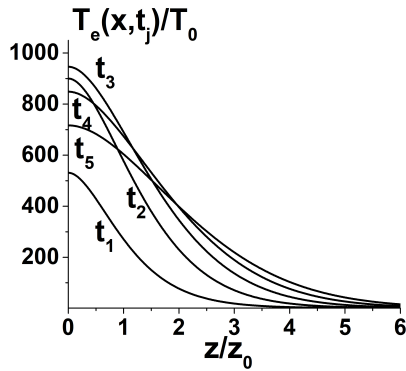


Рис.4. Профили температур электронного газа $T_e(x, t)$ и кристаллической решетки $T_i(x, t)$ ($T_0 = 300K$, $z_0 = 10^{-7}$ м) при временах ($t_0 = 10^{-12}$ с) $t_j = 0.8 \cdot j \cdot t_0$; $j = 1, 2, \dots, 5$ и их динамики на поверхности образца, без учета эмиссии электронов и с учетом испарения кристаллической решетки.



Back

Close

Заключение

Сравнительный анализ результатов абляции материалов в рамках модели термического пика и обычной модели уравнения теплопроводности показывает, что в модели термического пика абляция материала происходит значительно позже и кристаллическая решетка, нагревается слабее. Потери энергии электронного газа из-за эмиссии электронов является главной причинной этому.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов № 19-01-00645а и № 20-51-44001 монг-а.

[Back](#)[Close](#)

Список литературы

- [1] Фокин В.Б. Континуально-атоматическая модель и ее применение для численного расчета воздействия одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импульса на металлы. Диссертация кандидата физико-математических наук, Москва-2017г.
- [2] Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции. УФН, 2002г., т. 172, №3, стр. 301-333.
- [3] Вейко В.П., Либенсон М.Н., Червяков Г.Г., Яковлев Е.Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика. /Под ре. В.И. Конова. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. –312с. – ISBN 978-5-9221-0934-5.
- [4] Амирханов И.В., Саркер Н.Р., Сархадов И. Численное моделирование лазерной абляции материалов. Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science., ISSN:2658-4670,

[Back](#)[Close](#)

Изд:Российский университет дружбы народов. Vol. 28, N4, 2020y., ps. 398-405.

2.1 ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ, ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИМПУЛЬСНЫХ ПУЧКОВ ИОНОВ В РАМКАХ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Амирханов И.В., Саркар Н.Р., Сархадов И.

Лаборатория информационных технологий, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия, Ibrohim@jinr.ru

Наиболее известной моделью теплопроводности является закон Фурье, который устанавливает линейную связь между градиентом температуры и тепловым потоком. Закон Фурье является лишь приближенным описанием процесса теплопроводности, неадекватен при описании переноса тепла в высокочастотных процессах, при воздействии на вещество импульсов излучения пико и фемтосекундной длительности. Модификация закона Фурье путем ввода релаксации потока теплоты и температуры приводит к гиперболическому



Back

Close

уравнению теплопроводности типа уравнения Максвелла-Катанео-Лыкова и других уравнений. В работе проведено численное моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах при воздействии импульсных пучков ионов в рамках гиперболического уравнения теплопроводности. Проведен сравнительный анализ полученных результатов в рамках параболических и гиперболических уравнений теплопроводности. Исследовано влияние времени релаксации теплового потока на результаты.

Ключевые слова: Численное моделирование, импульсные пучки ионов, параболическое и гиперболическое уравнения.

1. Введение

В последние годы возрос интерес к изучению различного рода локально-неравновесных систем и процессов переноса (энергии, массы, импульса или их аналогов) в них [1-3]. Экспериментально эффекты локальной неравновесности чаще всего наблюдаются при низких температурах, при облучении вещества сверхкороткими импульсами энергии, в ударных волнах и дисперсных системах, так как именно в этих случаях время релаксации системы к локальному равновесию сравнимо с характерными временем самого процесса. Изучение



Back

Close

таких систем может быть основано на различных версиях локально-неравновесной термодинамики, кинетических, молекулярно-динамических, феноменологических и некоторых других методах [3].

2. Постановка задачи

Исследование тепловых процессов, возникающих в материалах при воздействии импульсных пучков ионов проводим на основе следующего гиперболического уравнения теплопроводности [1, 2]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau_{r1} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \tau_{r2} \frac{\partial^3 T}{\partial x^2 \partial t} \right) + \frac{1}{c\rho} \left[A(x, t) + \tau_{r1} \frac{\partial A(x, t)}{\partial t} \right], \quad a = \frac{\lambda}{c\rho}, \quad (12)$$

с начальными и граничными условиями

$$T(x, 0) = T_0; \quad \frac{\partial T(x, 0)}{\partial t} = 0; \quad \frac{\partial T(0, t)}{\partial x} = 0; \quad T(l, t) = T_0. \quad (13)$$

Функция источника имеет следующий вид [21]:

$$A(x, t) = \frac{\mu(x) j_0}{Ze} b f(t), \quad b \int_0^l \mu(x) dx = E_0,$$



Back

Close

$$\mu(x) = \frac{1}{1 + \exp(\alpha_1(x - R_0))}; \quad f(t) = \frac{1 - \exp(-\alpha_2 t)}{1 + \exp(\alpha_2(t - t_0))}.$$

Здесь параметры τ_{r_1} , τ_{r_2} —соответственно времена релаксации потока теплоты и температуры. В дальнейшем параметр τ_{r_2} полагаем равным нулю. При $\tau_{r_1} = 0$ уравнение (1) превращается в параболическое. Параметр τ_{r_1} связан со скоростью распространения теплоты v_T соотношением:

$$v_T = \sqrt{a/\tau_{r_1}} \quad (14)$$

3. Заключение

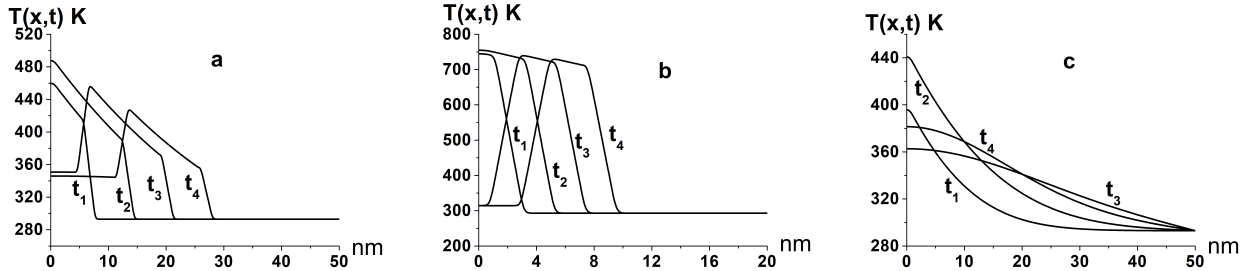
Численное исследование уравнения (1) с начальными и граничными условиями (2) проводилось для пучка и образца железа с параметрами:

$$\lambda = 78,2 \frac{\text{Вт}}{\text{К} \cdot \text{м}}, \quad c = 458 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{кг}}, \quad \rho = 7870 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad T_0 = 293\text{K}, \quad j_0 = 10^7 \frac{\text{А}}{\text{м}^2},$$

$E_0 = 300 \text{ кэВ}$, $Ze = 4$, $R_0 = 10^{-9} \text{ м}$, $t_0 = 10^{-11} \text{ с}$, $l = 5 \cdot 10^{-8} \text{ м}$,
 $\alpha_1 = \alpha_2 = 100$, конечно-разностным методом, явной схемы. Результаты численного исследования приведены на рисунке, которые



согласуются с выводами вытекающих из формулы (14).



Распределение температуры в образце железа в моментах времени $t_j = j \cdot t_{\text{масшт.}}$ ($t_{\text{масшт.}} = 4,6 \cdot 10^{-12}$ с, $j = 1, 2, 3, 4$), при учете релаксации потока тепла $\tau_{r_1} = 10^{-11}$ с (рис. а), $\tau_{r_1} = 10^{-10}$ с (рис. б) и при не учете его $\tau_{r_1} = 0$ с (рис. с).

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 17-01-00661а и № 19-01-00645а.



Back

Close

Список литературы

- [1] Э.М. Карташов, В.А. Кудинов. Аналитические методы теории теплопроводности и ее приложений. Изд. 4-ое, перераб. и сущ. доп. М.: ЛЕНАНД 2018 1072с.
- [2] В.А. Кудинов, И.В. Кудинов. Методы решения параболических и гиперболических уравнений теплопроводности. Под редакцией Э.М. Карташова. М.: Книжный дом "Либроком". UASS, 2011, 280с.
- [3] С.Л. Соболев. Локально-неравновесные модели процессов переноса. УФН, Том 167, №10(1997)
- [4] И.В. Амирханов, Е.В. Земляная, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, И. Сархадов. О влиянии формы источника в модели фазовых переходов в металлах, облучаемых импульсными пучками ионов. Сообщение ОИЯИ Р11-2002-78, Дубна, 2002, 18 с.

[Back](#)[Close](#)

2.2 РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ, ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

И.В. Амирханов, И. Сархадов, З.К. Тухлиев

Лаборатория информационных технологий,

Объединенный Институт Ядерных Исследований,

141980, ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия

ibrohim@jinr.ru



Back

Close

Аннотация

В предыдущей работе была предложена модификация модели термического пика (МТП), базирующаяся на системе двух связанных гиперболических уравнений теплопроводности. В настоящей работе приведены численные результаты моделирования.

Действие лазера в электронном газе, было учтено через функцию источника, которую выбрали в виде двойного фемтосекундного лазерного импульса. В гиперболическом уравнении в отличие от параболического, присутствуют дополнительные параметры, которые характеризуют времена релаксации потока тепла в электронном газе и кристаллической решетки. Кроме этого, в источнике гиперболического уравнения присутствуют дополнительные слагаемые-производные от плотности мощности источника параболического уравнения и от разности температур электронного газа и кристаллической решетки. Это означает, что на температуру образца оказывает влияние не только плотность мощности источника, но и скорости его изменения.

В настоящей работе проведены численное исследование решений параболического и гиперболического уравнений модели термиче-

[Back](#)[Close](#)

ского пика при одинаковых физических параметрах и сравнительный анализ полученных результатов. Установлено, что, температура электронного газа вблизи поверхности образца в начале превышает температуру кристаллической решетки, но наступает момент времени, когда, температура кристаллической решетки будет превышать температуру электронного газа, а потом эта разность стремиться к нулю, т.е. обе температуры стремятся к начальной температуре образца.

Введение

Исследование взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом является важным в связи с многими фундаментальными проблемами (физика неравновесных процессов, генерация ударных волн, лазерное ускорение ионов, модификации свойств облучаемого материала и т.д.) [1-3].

В настоящее время, возрастает необходимость в создании и совершенствовании достоверных физических моделей, способных описывать различные процессы в веществе. Существуют два подхода



Back

Close

исследования и создания физических моделей—атомический и континуальный.

Атомистический подход (метод молекулярной динамики) и континуальный подход (решение уравнений механики сплошных сред).

В каждом подходе имеются свои проблемы. При исследовании процессов переноса в рамках параболического уравнения возникает проблема - бесконечно большая скорость распространения теплового возмущения (следствие закона Фурье). Обобщая закон Фурье, учитывающий время релаксации теплового потока получаем гиперболическое уравнение теплопроводности.

В работе проведено численное исследование тепловых процессов, возникающих при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов в рамках модифицированного МТП и проведен сравнительный анализ полученных результатов.

[Back](#)[Close](#)

Постановка задачи

Модифицированный МТП имеет следующий вид:

$$C_e \left(\frac{\partial T_e}{\partial t} + \tau_e \frac{\partial^2 T_e}{\partial t^2} \right) = \lambda_e \frac{\partial^2 T_e}{\partial x^2} - \gamma (T_e - T_i) - \gamma \tau_e \frac{\partial}{\partial t} (T_e - T_i) + \quad (15)$$

$$+ A_e(x, t) + \tau_e \frac{\partial A_e(x, t)}{\partial t},$$

$$C_i \left(\frac{\partial T_i}{\partial t} + \tau_i \frac{\partial^2 T_i}{\partial t^2} \right) = \lambda_i \frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} + \gamma (T_e - T_i) + \gamma \tau_i \frac{\partial}{\partial t} (T_e - T_i) + \quad (16)$$

$$+ A_i(x, t) + \tau_i \frac{\partial A_i(x, t)}{\partial t}.$$

Здесь T_e , T_i —температурные поля электронного газа и кристаллической решетки облучаемого образца, C_e , C_i , λ_e , λ_i —соответственно удельные теплоемкости и коэффициенты теплопроводности электронного газа и кристаллической решетки, γ —коэффициент электрон-фононного взаимодействия электронной подсистемы с решеткой; $A(x, t)$ —функция источника, которая определяет плотность мощности тепловыделения в точке с координатой x в момент времени t , τ_e ,



Back

Close

τ_i —характерные времена релаксации потоков энергии в электронном газе и кристаллической решетки.

Слагаемые $\tau_e \partial A(x, t) / \partial t$, $\gamma \tau_{e,i} \partial (T_e - T_i) / \partial t$ означают, что на температурные поля оказывают влияние не только источник, но и скорость изменения источника и скорость обмена энергией электрон-фононного взаимодействия электронной подсистемы с решеткой.

При $\tau_e \rightarrow 0$, $\tau_i \rightarrow 0$, система уравнений (1)-(2) переходят в систему уравнений параболического типа (т.е. МТП).

Уравнение (21)-(22) решим со следующими начальными и граничными условиями:

$$T_{e,i}(x, 0) = T_0; \left. \frac{\partial T_{e,i}(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0; \left. \frac{\partial T_{e,i}(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0; T_{e,i}(x_{max}, t) = T_0.$$

Функция источника выбираем в факторизованном виде:

$$A_{e,i}(x, t) = P_{e,i} I_0 [1 - R(T_s)] f_1(x) f_2(t), \quad T_s = T_i(0, t), \quad P_e + P_i = 1.$$

Здесь $f_1(x)$, $f_2(t)$ —соответственно пространственная и временная формы источника, I_0 —интенсивность источника, $R(T_s)$ —коэффициент отражения лазерного импульса от поверхности материала.



Back

Close

В данной работе функции $f_1(x)$ и $f_2(t)$ выбраны как в работе [1]:

$$f_1(x) = \frac{\exp(-x/L_p)}{L_p},$$

$$f_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\exp\left[-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma_t^2}\right] + \exp\left[-\frac{(t-t_0-\tau_d)^2}{2\sigma_t^2}\right] \right).$$

Здесь L_p —глубина проникновения лазера в вещество, t_0 —момент времени, когда первый импульс источника принимает максимальное значение, τ_d —сдвиг по времени второго импульса источника по отношению первого импульса. Доза излучения $\Phi = I_0 \int_0^\infty f_2(t) dt = 2I_0\sigma_t$.

Численный эксперимент и обсуждение его результатов

Численное моделирование искомой системы проведено конечно-разностным методом явной схемы. Численный эксперимент проведен для материала никеля, облучаемого лазером двойного импульса со следующими параметрами:



Back

Close

$$\lambda_i = 91 \frac{\text{ВТ}}{\text{КМ}}, \quad \rho_i = 4560 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad c_i = 500 \frac{\text{Дж}}{\text{кгК}}, \quad x_{max} = 3 \cdot 10^{-7} \text{ м},$$

$$T_0 = 300 \text{ К}, \quad R(T_s) = 0, \quad C_i = \rho_i c_i = 2,28 \cdot 10^6 \frac{\text{Дж}}{\text{КМ}^3}, \quad \lambda_e = 200 \frac{\text{ВТ}}{\text{КМ}},$$

$$C_e = 27330 \frac{\text{Дж}}{\text{КМ}^3}, \quad \gamma = 2.733 \cdot 10^{18} \frac{\text{Дж}}{\text{КМ}^3}, \quad \Phi = 4 \cdot 10^4 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2},$$

$$\sigma_t = 5 \cdot 10^{-16} \text{ с}, \quad I_0 = \frac{\Phi}{2\sigma_t} = 4 \cdot 10^{19} \frac{\text{ВТ}}{\text{м}^2}, \quad L_p = 3 \cdot 10^{-8} \text{ м},$$

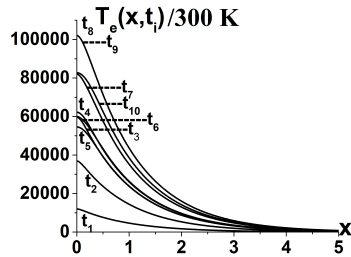
$$t_0 = 3 \cdot 10^{-15} \text{ с}, \quad \tau_d = 4 \cdot 10^{-15} \text{ с}, \quad \tau_e = 10^{-15} \text{ с}, \quad \tau_i = 10^{-13} \text{ с}, \quad P_e = 1, \quad P_i = 0.$$

Рисунки 1-3 отражают результаты численного моделирования.

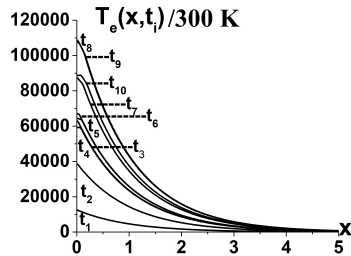


Back

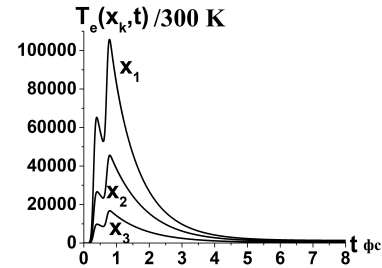
Close



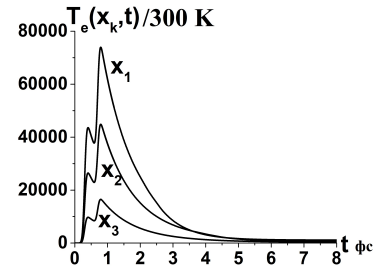
a)



c)



b)



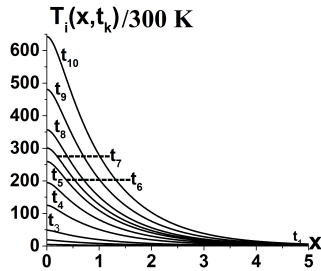
d)

Рис.1. Профили температуры электронного газа в разных моментах времени $T_e(x, t_j)$, $j = 1, 2, \dots, 10$, $t_1 = 2.5$ фс, $t_2 = 3$ фс, $t_3 = 3.5$ фс, $t_4 = 4.5$ фс, $t_5 = 5.5$ фс, $t_6 = 6.5$ фс, $t_7 = 7$ фс, $t_8 = 7.5$ фс, $t_9 = 8.5$ фс, $t_{10} = 10$ фс, и динамика искомых температур на разных глубинах образца ($T_e(x_k, t)$, $k=1, 2, 3$. $x_1 = 1.5$ nm, $x_2 = 3$ nm, $x_3 = 6$ nm), полученные в рамках МТП (a,b) и гиперболической МТП (c,d)

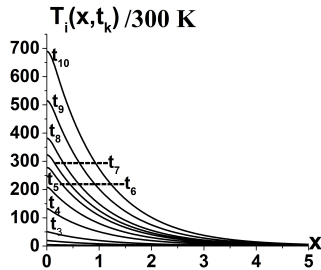


Back

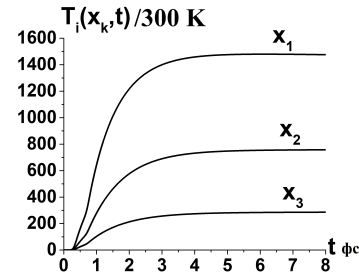
Close



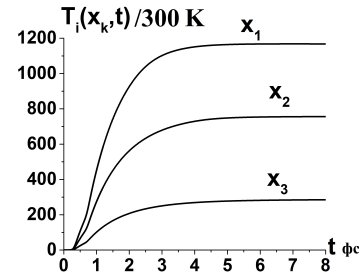
a)



c)



b)



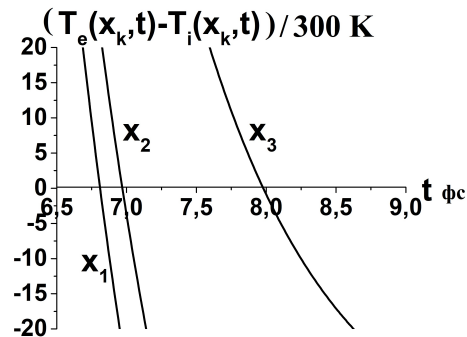
d)

Рис.2. Профили температуры кристаллической решетки в разных моментах времени $T_i(x, t_j)$, $j = 1, 2, \dots, 10$, $t_1 = 2.5$ фс, $t_2 = 3$ фс, $t_3 = 3.5$ фс, $t_4 = 4.5$ фс, $t_5 = 5.5$ фс, $t_6 = 6.5$ фс, $t_7 = 7$ фс, $t_8 = 7.5$ фс, $t_9 = 8.5$ фс, $t_{10} = 10$ фс, и динамика иско-
мых температур на разных глубинах образца ($T_{e,i}(x_k, t)$, $k=1,2,3$. $x_1 = 1.5$ nm, $x_2 = 3$ nm, $x_3 = 6$ nm), полученные в рамках МТП (a,b) и гиперболической МТП (c,d)

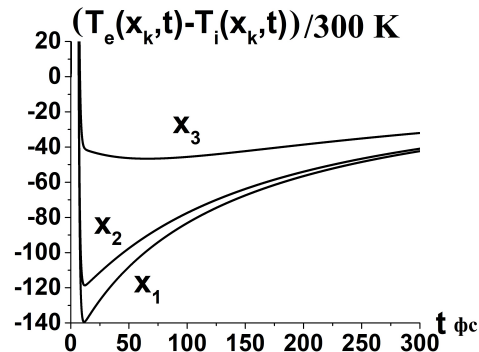


Back

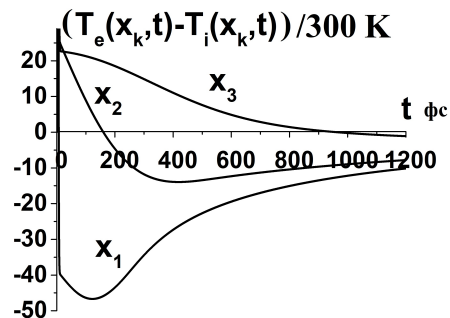
Close



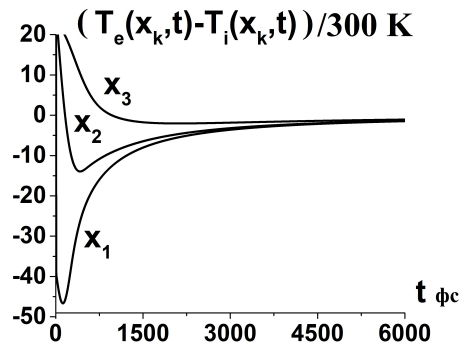
a)



b)



c)



d)

Рис.3. Динамика разности температур электронного газа и кристаллической решетки на разных глубинах образца ($T_e(x_k, t) - T_i(x_k, t)$, $k=1,2,3$. $x_1 = 0.3 \text{ nm}$, $x_2 = 0.6 \text{ nm}$, $x_3 = 1.5 \text{ nm}$), полученной в рамках МТП (а,б) и гиперболической МТП (с,д).



Заключение

В обеих моделях температура электронного газа вблизи поверхности образца в начале превышает температуру кристаллической решетки, но наступает момент времени, когда, температура кристаллической решетки будет превышать температуру электронного газа, а потом эта разность стремиться к нулю, т.е. обе температуры стремятся к начальной температуре образца. Поведения профилей температуры электронного газа и кристаллической решетки и их динамики на разных глубинах в обеих моделях сильно отличаются.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и МОКНСМ в рамках научного проекта № 20-51-44001.

[Back](#)[Close](#)

Список литературы

- [1] Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции. /УФН, 2002г., т. 172, №3, стр. 301-333.
- [2] Вейко В.П., Либенсон М.Н., Червяков Г.Г., Яковлев Е.Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика. /Под ре. В.И. Конова. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. –312с.
- [3] И. Сархадов, И.В. Амирханов, Н.Р. Саркер Численное моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов в рамках гиперболической модели термического пика./Труды XI Всероссийской конференций ИТТММ-2021, Москва, РУДН, 19-23 апреля.

[Back](#)[Close](#)

2.3 МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ, ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

И.В. Амирханов, И. Сархадов, З.К. Тухлиев

Лаборатория информационных технологий,

Объединенный Институт Ядерных Исследований,

141980, ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия

`ibrohim@jinr.ru`



Back

Close

Аннотация

В предыдущей работе была предложена модификация модели термического пика (МТП), базирующаяся на системе двух связанных гиперболических уравнений теплопроводностей для электронного газа и кристаллической решетки для моделирования тепловых процессов, возникающих в материалах под действием фемтосекундных лазерных импульсов.

Действие лазера в электронном газе, было учтено через функцию источника, которую выбрали в виде двойного фемтосекундного лазерного импульса. В гиперболическом уравнении в отличие от параболического, присутствуют дополнительные параметры, которые характеризуют времена релаксации потока тепла в электронном газе и кристаллической решетки. Кроме этого, в источнике гиперболического уравнения присутствуют дополнительные слагаемые-производные от плотности мощности источника параболического уравнения и от разности температур электронного газа и кристаллической решетки. Это означает, что на температуру образца оказывает влияние не только плотность мощности источника, но и скорости его изменения.

[Back](#)[Close](#)

В предыдущей работе численное моделирование проводилось только в пределах времени действия источника.

В настоящей работе проведены численные исследования при больших временах после выключения источника для разных параметров релаксации потоков тепла в электронном газе и кристаллической решетки.

Введение

Исследование взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом является важным в связи с многими фундаментальными проблемами (физика неравновесных процессов, генерация ударных волн, лазерное ускорение ионов, модификации свойств облучаемого материала и т.д.) [1-3].

В настоящее время, возрастает необходимость в создании и совершенствовании достоверных физических моделей, способных описывать различные процессы в веществе. Существуют два подхода исследования и создания физических моделей—атомистический и континуальный.

Атомистический подход (метод молекулярной динамики) и континуальный подход (решение уравнений механики сплошных сред).



Back

Close

В каждом подходе имеются свои проблемы. При исследовании процессов переноса в рамках параболического уравнения возникает проблема - бесконечно большая скорость распространения теплового возмущения (следствие закона Фурье). Обобщая закон Фурье, учитывающий время релаксации теплового потока получаем гиперболическое уравнение теплопроводности.

В работе проведено численное исследование тепловых процессов, возникающих при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов в рамках модифицированного МТП и проведен сравнительный анализ полученных результатов.



Back

Close

Постановка задачи

При моделировании тепловых процессов, возникающих в материалах под воздействием фемтосекундных лазерных импульсов модифицируем МТП:

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = -\frac{\partial q_e}{\partial x} - \gamma(T_e - T_i) + A_e(x, t); \quad q_e + \tau_e \frac{\partial q_e}{\partial t} = -\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \quad (17)$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = -\frac{\partial q_i}{\partial x} + \gamma(T_e - T_i) + A_i(x, t); \quad q_i + \tau_i \frac{\partial q_i}{\partial t} = -\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x} \quad (18)$$

$$C_e \left(\frac{\partial T_e}{\partial t} + \tau_e \frac{\partial^2 T_e}{\partial t^2} \right) = \lambda_e \frac{\partial^2 T_e}{\partial x^2} - \gamma(T_e - T_i) - \gamma \tau_e \frac{\partial}{\partial t} (T_e - T_i) + \quad (19)$$

$$+ A_e(x, t) + \tau_e \frac{\partial A_e(x, t)}{\partial t},$$

$$C_i \left(\frac{\partial T_i}{\partial t} + \tau_i \frac{\partial^2 T_i}{\partial t^2} \right) = \lambda_i \frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} + \gamma(T_e - T_i) + \gamma \tau_i \frac{\partial}{\partial t} (T_e - T_i) + \quad (20)$$

$$+ A_i(x, t) + \tau_i \frac{\partial A_i(x, t)}{\partial t}.$$



Back

Close

Здесь T_e , T_i —температурные поля электронного газа и кристаллической решетки облучаемого образца, C_e , C_i , λ_e , λ_i —соответственно удельные теплоемкости и коэффициенты теплопроводности электронного газа и кристаллической решетки, γ —коэффициент электрон-фононного взаимодействия электронной подсистемы с решеткой; $A(x, t)$ —функция источника, которая определяет плотность мощности тепловыделения в точке с координатой x в момент времени t , τ_e , τ_i —характерные времена релаксации потоков энергии в электронном газе и кристаллической решетки.

Слагаемые $\tau_e \partial A(x, t) / \partial t$, $\gamma \tau_{e,i} \partial (T_e - T_i) / \partial t$ означают, что на температурные поля оказывают влияние не только источник, но и скорость изменения источника и скорость обмена энергией электрон-фононного взаимодействия электронной подсистемы с решеткой.

При $\tau_e \rightarrow 0$, $\tau_i \rightarrow 0$, система уравнений (1)-(2) переходят в систему уравнений параболического типа (т.е. МТП).

Уравнение (21)-(22) решим со следующими начальными и граничными условиями:

$$T_{e,i}(x, 0) = T_0; \left. \frac{\partial T_{e,i}(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0; \left. \frac{\partial T_{e,i}(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0; T_{e,i}(x_{max}, t) = T_0.$$

Функция источника выбираем в факторизованном виде:

$$A_{e,i}(x, t) = P_{e,i} I_0 [1 - R(T_s)] f_1(x) f_2(t), \quad T_s = T_i(0, t), \quad P_e + P_i = 1.$$

Здесь $f_1(x)$, $f_2(t)$ —соответственно пространственная и временная формы источника, I_0 —интенсивность источника, $R(T_s)$ —коэффициент отражения лазерного импульса от поверхности материала.

В данной работе функции $f_1(x)$ и $f_2(t)$ выбраны как в работе [1]:

$$f_1(x) = \frac{\exp(-x/L_p)}{L_p},$$

$$f_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\exp \left[-\frac{(t - t_0)^2}{2\sigma_t^2} \right] + \exp \left[-\frac{(t - t_0 - \tau_d)^2}{2\sigma_t^2} \right] \right).$$

Здесь L_p —глубина проникновения лазера в вещество, t_0 —момент времени, когда первый импульс источника принимает максимальное



Back

Close

значение, τ_D —сдвиг по времени второго импульса источника по отношению первого импульса. Доза излучения $\Phi = I_0 \int_0^\infty f_2(t)dt = 2I_0\sigma_t$.

Численный эксперимент и обсуждение его результатов

Численное моделирование искомой системы проведено конечно-разностным методом явной схемы. Численный эксперимент проведен для материала никеля, облучаемого лазером двойного импульса со следующими параметрами:

$$\lambda_i = 91 \frac{\text{Вт}}{\text{Км}}, \quad \rho_i = 4560 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad c_i = 500 \frac{\text{Дж}}{\text{кгК}}, \quad x_{\max} = 3 \cdot 10^{-7} \text{ м},$$

$$T_0 = 300 \text{ К}, \quad R(T_s) = 0, \quad C_i = \rho_i c_i = 2,28 \cdot 10^6 \frac{\text{Дж}}{\text{Км}^3}, \quad \lambda_e = 200 \frac{\text{Вт}}{\text{Км}},$$

$$C_e = 27330 \frac{\text{Дж}}{\text{Км}^3}, \quad \gamma = 2.733 \cdot 10^{18} \frac{\text{Дж}}{\text{Км}^3}, \quad \Phi = 4 \cdot 10^4 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2},$$

$$\sigma_t = 5 \cdot 10^{-16} \text{ с}, \quad I_0 = \frac{\Phi}{2\sigma_t} = 4 \cdot 10^{19} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2}, \quad L_p = 3 \cdot 10^{-8} \text{ м},$$



Back

Close

$$t_0 = 3 \cdot 10^{-15} \text{ с}, \tau_d = 4 \cdot 10^{-15} \text{ с}, \tau_e = 10^{-15} \text{ с}, \tau_i = 10^{-13} \text{ с}, P_e = 1, P_i = 0.$$

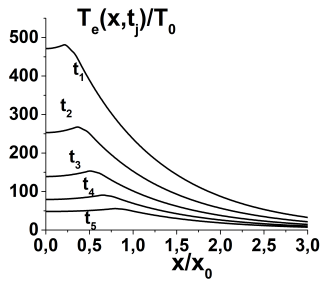
Рисунки 1-4 отражают результаты численного моделирования.

Заключение

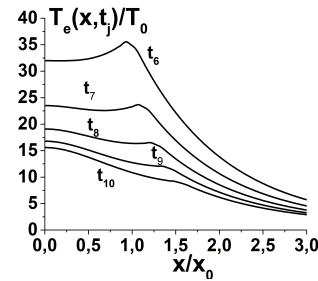
В динамике профилей температур электронного газа и кристаллической решетки в обеих моделях при больших временах $T_i > T_e$ ($T_i - T_e \rightarrow 0$). В гиперболической МТП в профилях электронного газа возникают фронты, которые перемещаются по оси x и при больших временах сглаживаются. В параболической МТП этот эффект отсутствует.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и МОКНСМ в рамках научного проекта № 20-51-44001.

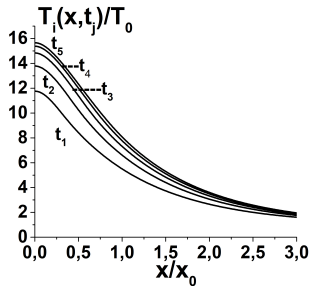
[Back](#)[Close](#)



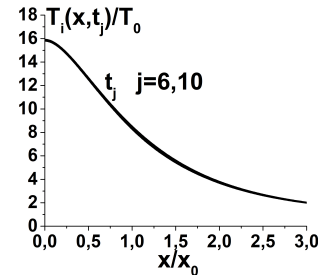
a)



b)



c)



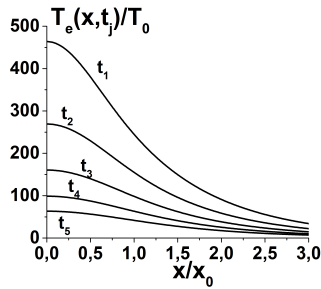
d)

Рис.1. Профили температур электронного газа $T_e(x, t_j)$ (a,b) и кристаллической решетки $T_i(x, t_j)$ (c,d) ($T_0 = 300\text{ K}$) в разных моментах времени ($t_0 = 10^{-14}\text{ с}$, $x_0 = 30\text{ нм}$) $t_j = (1 + 0.5 \cdot j) \cdot t_0$, $j = 1, 2, \dots, 10$, полученные в рамках гиперболической МТП.

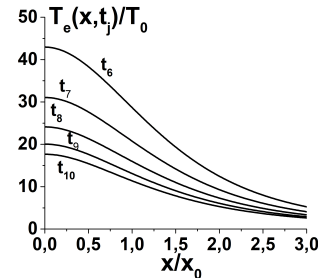


Back

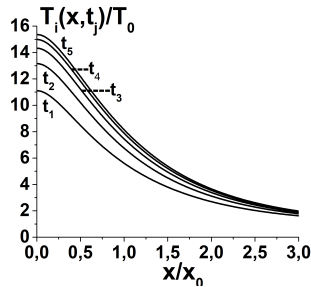
Close



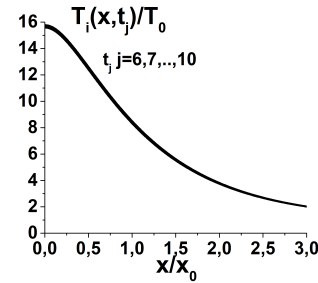
a)



b)



c)



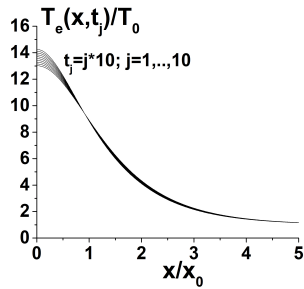
d)

Рис.2. Профили температур электронного газа $T_e(x, t_j)$ (a,b) и кристаллической решетки $T_i(x, t_j)$ (c,d) ($T_0 = 300\text{ K}$) в разных моментах времени ($t_0 = 10^{-14}\text{ с}$, $x_0 = 30\text{ нм}$) $t_j = (1 + 0.5 \cdot j) \cdot t_0$, $j = 1, 2, \dots, 10$, полученные в рамках параболической МТП.

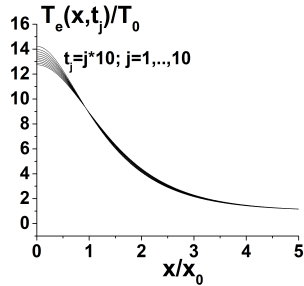


Back

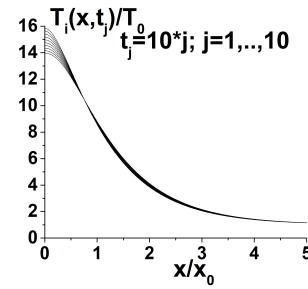
Close



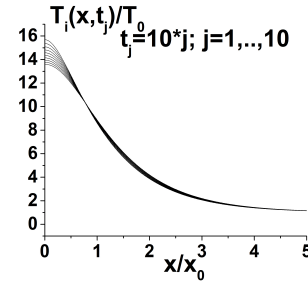
a)



c)



b)



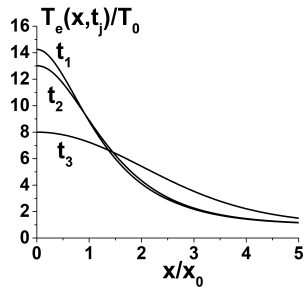
d)

Рис.3. Динамика профилей температур электронного газа $T_e(x, t_j)$ и кристаллической решетки $T_i(x, t_j)$ при временах $t_j = j \cdot 10t_0$, $j = 1, 2, \dots, 10$ ($T_0 = 300$ K, $t_0 = 10^{-14}$ с, $x_0 = 30$ нм), полученные в рамках гиперболической (рис.3а,б) и параболической (рис.3с,д) МТП.

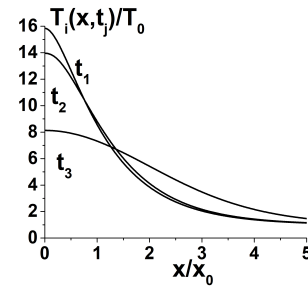


Back

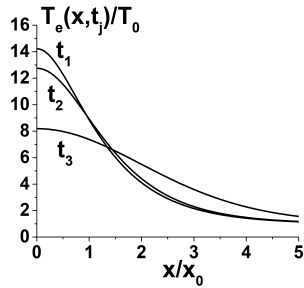
Close



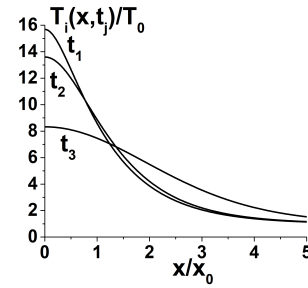
a)



b)



c)



d)

Рис.4. Динамика профилей температур электронного газа $T_e(x, t_j)$ и кристаллической решетки $T_i(x, t_j)$ при временах $t_1 = 10t_0$, $t_2 = 100t_0$, $t_3 = 1000t_0$ для обеих моделей ($T_0 = 300$ K, $t_0 = 10^{-14}$ с, $x_0 = 30$ нм), полученные в рамках гиперболической (рис.4а,б) и параболической (рис.4с,д) МТП.



Back

Close

Список литературы

- [1] Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции. /УФН, 2002г., т. 172, №3, стр. 301-333.
- [2] Вейко В.П., Либенсон М.Н., Червяков Г.Г., Яковлев Е.Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика. /Под ре. В.И. Конова. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. –312с.
- [3] И. Сархадов, И.В. Амирханов, Н.Р. Саркер Численное моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов в рамках гиперболической модели термического пика./Труды XI Всероссийской конференций ИТТММ-2021, Москва, РУДН, 19-23 апреля.

[Back](#)[Close](#)

3.1 МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ МАТЕРИАЛОВ В РАМКАХ МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА В ОБРАЗЦАХ КОНЕЧНОЙ ТОЛЩИНЫ

¹И.В. Амирханов, ¹И. Сархадов, ¹З.К. Тухлиев, ²Х. Гафуров

¹ *Лаборатория информационных технологий,*

Объединенный Институт Ядерных Исследований,

141980, ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия

ibrohim@jinr.ru

² *Худжандский государственный университет имени академика
Бободжана Гафурова*

,



Back

Close

Аннотация.

В предыдущих работах были проведены численное моделирование лазерной абляции материалов, возникающей под действием ультракоротких лазерных импульсов в полуограниченных образцах и образцах конечной толщины. Тепловой механизм лазерной абляции описывались в рамках одномерного нестационарного уравнения теплопроводности в системе координат, связанной с движущимся фронтом испарения. Действие лазера было учтено через функции источника в уравнении теплопроводности, задавая координатную и временную зависимости источника лазера. Были получены зависимости максимума температуры на поверхности образца и толщины слоя абляции от дозы излучения падающего лазерного импульса.

В настоящей работе аналогичное моделирование проводится в образцах конечной толщины в рамках двухтемпературной модели термического пика, которая состоит из двух взаимосвязанных уравнений теплопроводностей для электронного газа и кристаллической решетки.

[Back](#)[Close](#)

Постановка задачи

Моделирование лазерной абляции материалов проводится на основе модели термического пика [2] для образцов конечной толщины, которая состоит из уравнений (21)-(22) с начальными и граничными условиями (23):

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = C_e v_{eff} \frac{1}{D} \frac{\partial T_e}{\partial z} + \frac{1}{D^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - \gamma(T_e - T_i) + A(z, t), \quad (21)$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = C_i v_{eff} \frac{1}{D} \frac{\partial T_i}{\partial z} + \frac{1}{D^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) + \gamma(T_e - T_i), \quad (22)$$

В данной системе уравнений путем перехода $z = (x - h_1(t))/D$ задача от движущих границ переведена к задаче с фиксированными границами.

$$A(z, t) = I_0 A_s \alpha e^{-\alpha z D} e^{-\alpha_g h_1(t)} e^{-t/t_1} t/t_1,$$

$$D = d - h_1(t) - h_2(t), \quad h_\alpha(t) = \int_0^t v_{\alpha Ph}(t) dt, \quad \alpha = 1, 2.$$

$$v_{eff} = \frac{v_{1\varphi}(1 - z) - zv_{2\varphi}}{D}, \quad v_{1\varphi} = v_\varphi(T_i(0, t)), \quad v_{2\varphi} = v_\varphi(T_i(1, t)),$$



Back

Close

$$A_s = 1 - R(T_{is}), v_\varphi = v_0 \exp(-T_a/T_{is}); v_\varphi = \frac{dh}{dt}; T_{\alpha s} = T_\alpha(0, t); \alpha = e, i.$$

$$T_\alpha(z, 0) = T_0; \lambda_\alpha \frac{\partial T_\alpha(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} = DQ_\alpha; h(0) = 0, \quad (23)$$

Здесь T_e, T_i —температурные поля электронного газа и кристаллической решетки облучаемого образца, $C_e, C_i, \lambda_e, \lambda_i$ —соответственно удельные теплоемкости и коэффициенты теплопроводности электронного газа и кристаллической решетки, γ —коэффициент электрон-фононного взаимодействия электронной подсистемы с решеткой; $A(z, t)$ —функция источника, которая определяет плотность мощности тепловыделения в точке с координатой z в момент времени t , ρ, v_φ —плотность и скорость абляции материала, T_a —энергия активации, T_u —работа выхода, T_0 —начальная температура образца, b_R —постоянная Ричардсона, K_B —постоянная Больцмана, q_e —заряд электрона, $h(t)$ —толщина удаленного слоя в момент времени t , L_{ev} —удельная теплота сублимации, Φ, I_0, β —соответственно поток энергии, интенсивность и коэффициент поглощения лазера, A_s —поглощательная

способность. Функция $f_2(t)$ удовлетворяет условию нормировки:

$$\Phi = \int_0^{\infty} f_2(t) dt = I_0 t_1.$$

3.2 ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ, ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ, ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

Амирханов И.В., Сархадов И., Тухлиев З.К.

Лаборатория информационных технологий, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия, ibrohim@jinr.ru

Аннотация

В предыдущей работе была предложена модификация модели термического пика (МТП), базирующаяся на системе двух связанных гиперболических уравнений теплопроводностей для электронного газа и кристаллической решетки для моделирования тепловых процессов, возникающих в материалах под действием фемтосекундных лазерных импульсов.



Back

Close

Действие лазера в электронном газе, было учтено через функцию источника, которую выбрали в виде двойного фемтосекундного лазерного импульса.

В настоящей работе временную форму функции источника выбираем в виде одного импульса гауссовой форме проведены численные исследования при больших временах после выключения источника для разных параметров релаксации потоков тепла в электронном газе и кристаллической решетки.

Ключевые слова: Параболическое и гиперболическое уравнения модели термического пика, фемтосекундный лазерный импульс, численное моделирование.

1. Введение

Исследование взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом является важным в связи с многими фундаментальными проблемами (физика неравновесных процессов, генерация ударных волн, лазерное ускорение ионов, модификации свойств облучаемого материала и т.д.) [1] - [4].

В настоящее время, возрастает необходимость в создании и совершенствовании достоверных физических моделей, способных опи-

[Back](#)[Close](#)

сывать различные процессы в веществе. При этом компьютерное моделирование занимает сейчас одно из главных мест в исследовании таких задач.

Обобщая закон Фурье, учитывающий время релаксации теплового потока получаем гиперболическое уравнение теплопроводности [10] – [15].

Время релаксации является характеристикой неравновесности процесса теплопроводности. При воздействии фемтосекундных импульсов происходит неравновесный нагрев материала. Поэтому исследование подобных процессов может оказаться более адекватным в рамках гиперболического уравнения теплопроводности.

В предыдущей работе [23] подробно обсуждена модификация модели термического пика (МТП), базирующая на системе двух взаимосвязанных гиперболических уравнений теплопроводностей для электронного газа и кристаллической решетки. В данной работе приведены исходные уравнения в безразмерных переменных и безразмерных величинах.

2. Постановка задачи

Модифицированные уравнения МТП в безразмерных переменных и



безразмерных величин имеет вид:

78/93

$$\frac{\partial \bar{T}_e}{\partial \bar{t}} + \bar{\tau}_e \frac{\partial^2 \bar{T}_e}{\partial \bar{t}^2} = k_e \frac{\partial^2 \bar{T}_e}{\partial \bar{x}^2} - \gamma_e (\bar{T}_e - \bar{T}_i) - \gamma_e \bar{\tau}_e \frac{\partial}{\partial \bar{t}} (\bar{T}_e - \bar{T}_i) + \bar{A}_e(\bar{x}, \bar{t}) + \bar{\tau}_e \frac{\partial \bar{A}_e(\bar{x}, \bar{t})}{\partial \bar{t}} \quad (24)$$

$$\frac{\partial \bar{T}_i}{\partial \bar{t}} + \bar{\tau}_i \frac{\partial^2 \bar{T}_i}{\partial \bar{t}^2} = k_i \frac{\partial^2 \bar{T}_i}{\partial \bar{x}^2} + \gamma_i (\bar{T}_e - \bar{T}_i) + \gamma_i \bar{\tau}_i \frac{\partial}{\partial \bar{t}} (\bar{T}_e - \bar{T}_i) \quad (25)$$

$$\bar{T}_\alpha(\bar{x}, 0) = 1; \left. \frac{\partial \bar{T}_\alpha(\bar{x}, \bar{t})}{\partial \bar{t}} \right|_{\bar{t}=0} = 0; \left. \frac{\partial \bar{T}_\alpha(\bar{x}, \bar{t})}{\partial \bar{x}} \right|_{\bar{x}=0} = 0; \bar{T}_\alpha(\bar{x}_{max}, \bar{t}) = 1; \alpha = e, i, \quad (26)$$

$$\bar{A}_e(\bar{x}, \bar{t}) = A_0 \bar{f}_1(\bar{x}) \bar{f}_2(\bar{t}), \quad A_0 = \frac{I_0 [1 - R(\bar{T}_s)] \Delta t}{L_p C_e T_0}; \quad \bar{f}_1(\bar{x}) = \exp(-\beta \bar{x}),$$

$$\beta = \Delta x / L_p, \quad \bar{f}_2(\bar{t}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \bar{\sigma}_t}} \exp \left[-\frac{(\bar{t} - \bar{t}_0)^2}{2 \bar{\sigma}_t^2} \right], \quad \Phi = I_0 \Delta t \bar{\sigma}_t.$$

$$\bar{T}_\alpha = \frac{T_\alpha}{T_0}; \quad \bar{x} = \frac{x}{\Delta x}; \quad \bar{t} = \frac{t}{\Delta t}; \quad \bar{\sigma}_t = \frac{\sigma_t}{\Delta t}; \quad \bar{t}_0 = \frac{t_0}{\Delta t}; \quad \bar{\gamma}_\alpha = \frac{\gamma \Delta t}{C_\alpha};$$



Back

Close

$$k_{\alpha} = \frac{\lambda_{\alpha} \Delta t}{C_{\alpha} \Delta x^2}; \quad \bar{\tau}_{\alpha} = \frac{\tau_{\alpha}}{\Delta t}$$

4. Обсуждение численных результатов

Численный эксперимент проведен, с применением метода конечных разностей явной схемы [22], для материала никеля, облучаемого лазером двойного импульса со следующими параметрами [9]:

$$\lambda_i = 91 \frac{\text{Вт}}{\text{Км}}, \quad \rho_i = 4560 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad c_i = 500 \frac{\text{Дж}}{\text{кгК}}, \quad x_{\max} = 3 \cdot 10^{-7} \text{ м}, \quad T_0 = 300 \text{ К},$$

$$R(T_s) = 0, \quad C_i = \rho_i c_i = 2,28 \cdot 10^6 \frac{\text{Дж}}{\text{Км}^3}, \quad \lambda_e = 200 \frac{\text{Вт}}{\text{Км}}, \quad C_e = 27330 \frac{\text{Дж}}{\text{Км}^3},$$

$$L_p = 3 \cdot 10^{-8} \text{ м}, \quad \gamma = 2.733 \cdot 10^{18} \frac{\text{Дж}}{\text{Км}^3}, \quad \Phi = 400 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}, \quad \sigma_t = 5 \cdot 10^{-16} \text{ с},$$

$$t_0 = 3 \cdot 10^{-15} \text{ с}, \quad \Delta x = 3 \cdot 10^{-8} \text{ м},$$

$$\Delta t = 10^{-14} \text{ с}, \quad \tau_d = 4 \cdot 10^{-15} \text{ с}, \quad \tau_e = 10^{-14} \text{ с}, \quad \tau_i = 10^{-12} \text{ с}.$$

При этих параметрах безразмерные константы $k_e, k_i, \gamma_e, \gamma_i, A_0, \beta, \bar{\tau}_e, \bar{\tau}_i$ принимают значения: $k_e \simeq 8.13107 \cdot 10^{-2}$; $k_i \simeq 4.4347 \cdot 10^{-4}$; $\gamma_e = 1$; $\gamma_i \simeq 1.199 \cdot 10^{-2}$; $A_0 \simeq 16262.1458$; $\beta = 1$; $\bar{\tau}_e = 1$; $\bar{\tau}_i = 100$.


[Back](#)
[Close](#)

На рис.1 приведены профили температуры электронного газа $T_e(x, t)$ в разных моментах времени, полученные в рамках гиперболической МТП (рис.1a,b) и параболической МТП (рис.1c,d).

Моменты t_1, t_2 времени относятся к времени действия источника, а в остальных моментах времени источник почти выключен. Поэтому электронный газ в обеих моделях в моментах времени t_1, t_2 греется, в остальных моментах времени охлаждается. Но в гиперболической модели МТП у электронного газа температура выше, чем в параболической МТП. Кроме этого из рис.1a,b видно, что при гиперболической МТП в профилях температуры электронного газа возникает фронт и по истечению времени этот фронт двигается по оси x . При больших временах данный фронт сглаживается.

На рис.2 приведены аналогичные графики для температуры кристаллической решетки. При всех временах температура кристаллической решетки вблизи поверхности $x = 0$ в рамках гиперболической МТП всегда больше чем в рамках параболической МТП, а далеких расстояниях наоборот.

Из рис. 2b,d видно, что температура кристаллической решетки


[Back](#)
[Close](#)

при временах $t = t_9$, $t = t_{10}$ слабо меняется. Это связано с тем, что в начало, когда электронный газ был достаточно нагрет в электронный газ поступило тепло за счет члена $\gamma_i(\bar{T}_e - \bar{T}_i)$ и когда обе температуры стали близки друг другу кристаллическая решетка стала меньше нагреваться. Коэффициент диффузии тепла кристаллической решетки намного меньше аналогичного электронного газа и изменение температуры кристаллической за счет диффузии слабо. Как видно, в рамках гиперболической МТП появления фронта в профили температуры кристаллической решетки пока не наблюдается.

Чтобы выявить тенденцию изменений температур электронного газа и кристаллической решетки, в обеих моделях провели численное моделирование в интервал времени $t = 10 \div 100$.

Рисунок 3 отражает аналогичные изменения температур в этом интервале времени. Как видно обе температуры слабо меняются в этом промежутке времени. Но наблюдается один любопытный


[Back](#)
[Close](#)

факт: в обеих моделях температура кристаллической решетки превышает температуру электронного газа, т.е. если раньше электронный газ нагревал кристаллическую решетку, теперь наоборот электронный газ нагревается за счет кристаллической решетки.

На рис. 4 приведены профили температур электронного газа и кристаллической решетки при временах $t_1 = 10$, $t_2 = 100$, $t_3 = 1000$ для обеих моделей. Интересно проследить в каких временах в разных точках от поверхности $x = 0$ происходит изменения знака разностей температур электронного газа и кристаллической решетки $T_e(x, t) - T_i(x, t)$ в рамках обеих моделей. На рис.5 приведены динамики искомых разностей в четырех точках $x_i = x_0 \cdot 0.2 \cdot (i - 1)$, $i = 1, 2, 3, 4$.

На этом рисунке времена t_1, t_2, t_3, t_4 обозначают моменты, когда происходит замена знака разности температуры электронного газа и кристаллической решетки $T_e(x, t) - T_i(x, t)$ в точках с координатами $x_i = 0.2x_0(i - 1)$, $i = 1, 2, 3, 4$. Эти моменты для гиперболической и параболической МТП следующие: Для гиперболической



Back

Close

МТП: $t_1 = 5.5986$, $t_2 = 5.8183$, $t_3 = 6.3613$, $t_4 = 7.3936$ (рис. 5a).
Для параболической МТП: $t_1 = 6.53$, $t_2 = 6.7491$, $t_3 = 7.3189$,
 $t_4 = 8.4238$ (рис. 5b).

Заключение

В динамике профилей температур электронного газа и кристаллической решетки в обеих моделях при больших временах $T_i > T_e$ ($T_i - T_e \rightarrow 0$). В гиперболической МТП в профилях электронного газа возникают фронты, которые перемещаются по оси x и при больших временах сглаживаются. В параболической МТП этот эффект отсутствует.



Back

Close

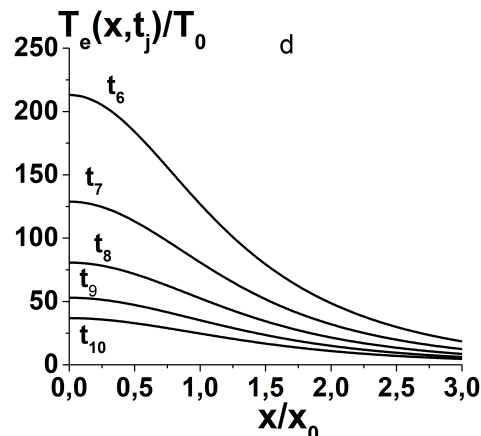
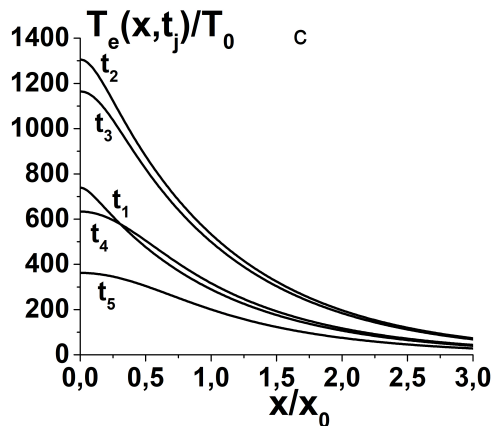
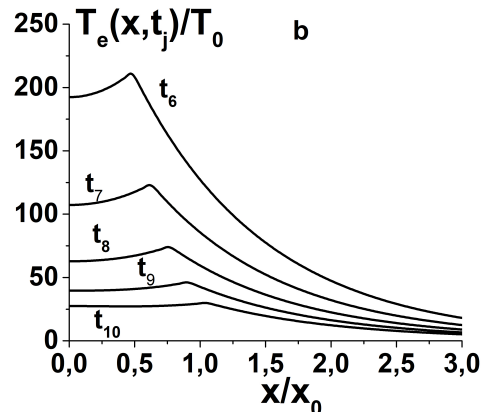
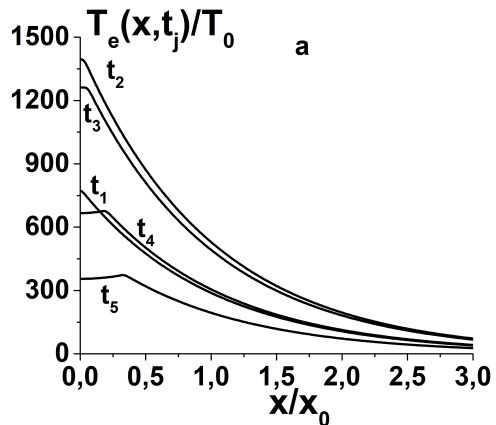


Рис.1. Профили температуры электронного газа $T_e(x, t)$ ($T_0 = 300 \text{ K}$) в разных моментах времени ($t_0 = 10^{-14} \text{ с}$, $x_0 = 30 \text{ нм}$) $t_1 = 0.3t_0$, $t_2 = 0.4t_0$, $t_j = 0.5 \cdot (j - 2) \cdot t_0$, $j = 3, 2, \dots, 10$, полученные в рамках уравнения Шрёдингера (рис.1a,b) и в рамках

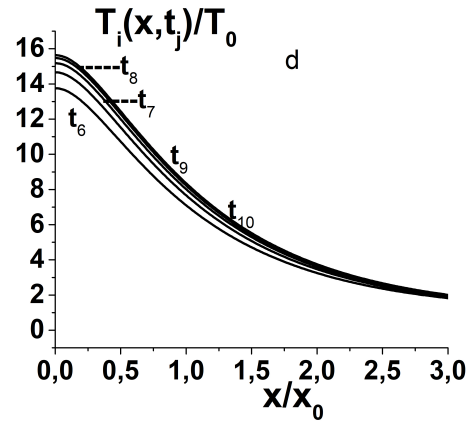
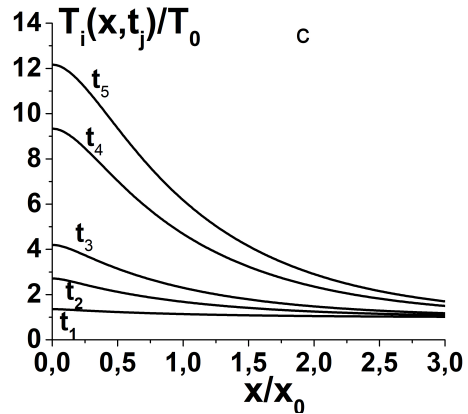
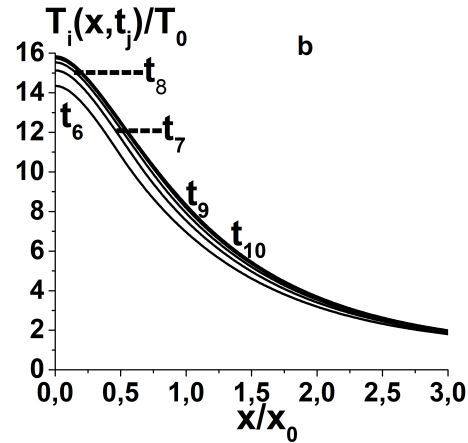
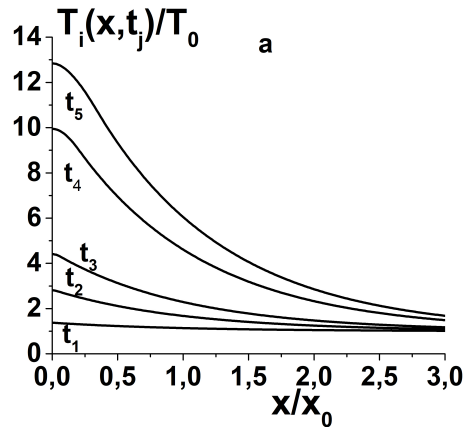


Рис.2. Профили температуры кристаллической решетки $T_i(x, t)$ ($T_0 = 300 \text{ K}$) в разных моментах времени ($t_0 = 10^{-14} \text{ с}$, $x_0 = 30 \text{ нм}$) $t_1 = 0.3t_0$, $t_2 = 0.4t_0$, $t_j = 0.5 \cdot (j - 2) \cdot t_0$, $j = 3, 2, \dots, 10$, полученные в рамках уравнения МТДП (рис 2a, b) и в рам



Back

Close

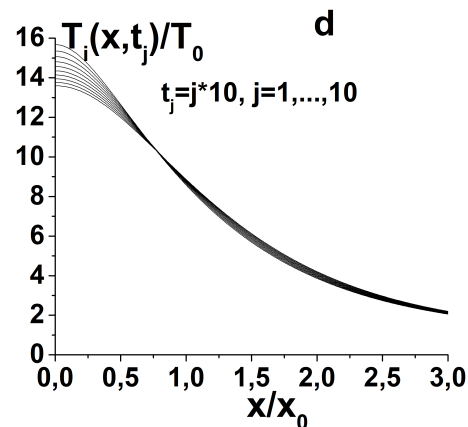
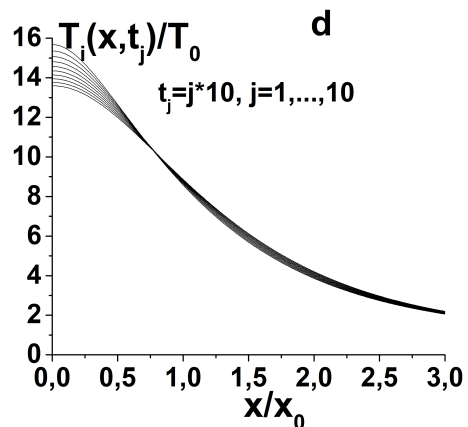
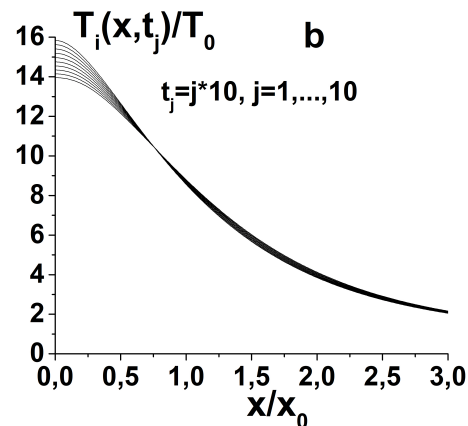
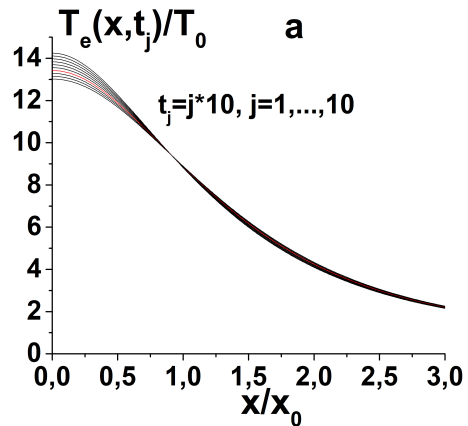


Рис.3. Динамика профилей температур электронного газа $T_e(x, t_j)$ и кристаллической решетки $T_i(x, t_j)$ при временах $t_j = j \cdot 10t_0$, $j = 1, 2, \dots, 10$ ($T_0 = 300$ K, $t_0 = 10^{-14}$ с, $x_0 = 30$ нм), полученные в рамках гиперболической (рис.3а, б) и параболической

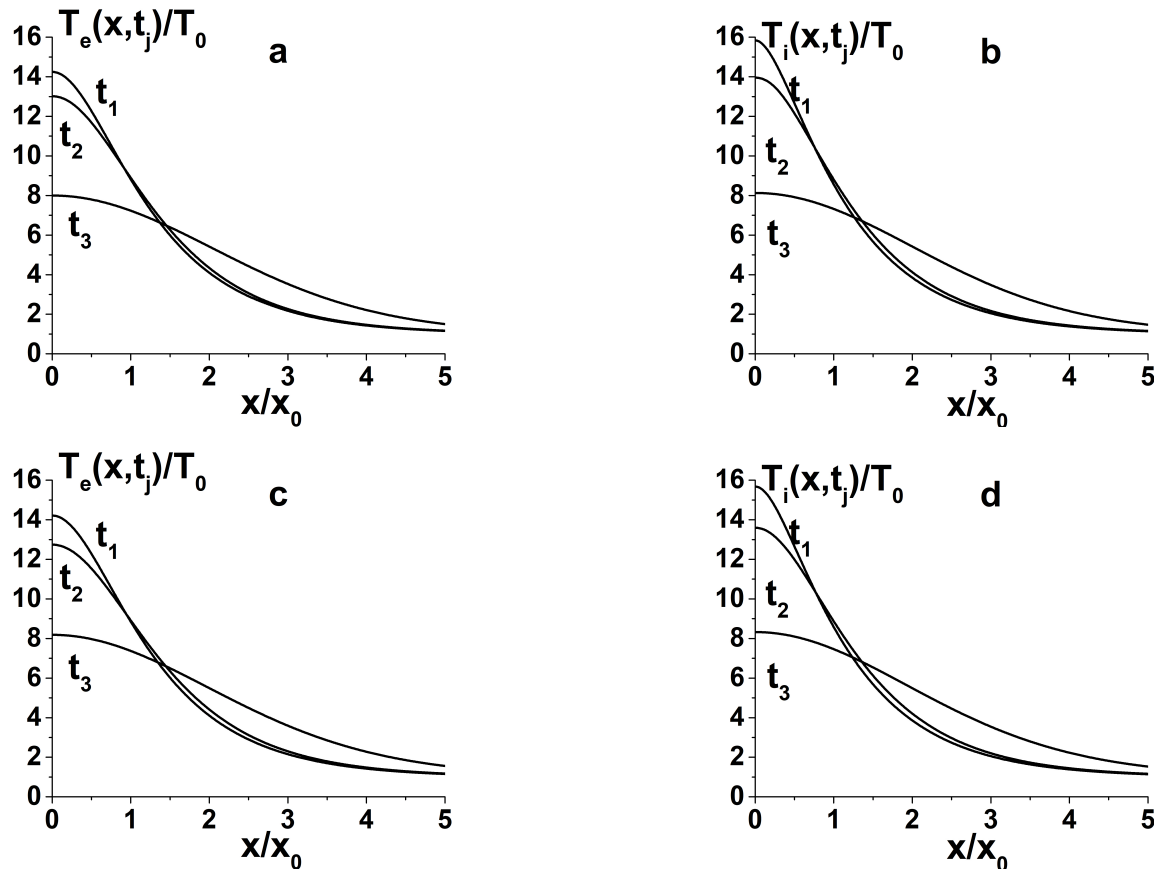


Рис.4. Динамика профилей температур электронного газа $T_e(x, t_j)$ и кристаллической решетки $T_i(x, t_j)$ при временах $t_1 = 10t_0$, $t_2 = 100t_0$, $t_3 = 1000t_0$ ($T_0 = 300$ K, $t_0 = 10^{-14}$ с, $x_0 = 30$ нм), полученные в рамках гиперболической (рис.4a, b) и переноса

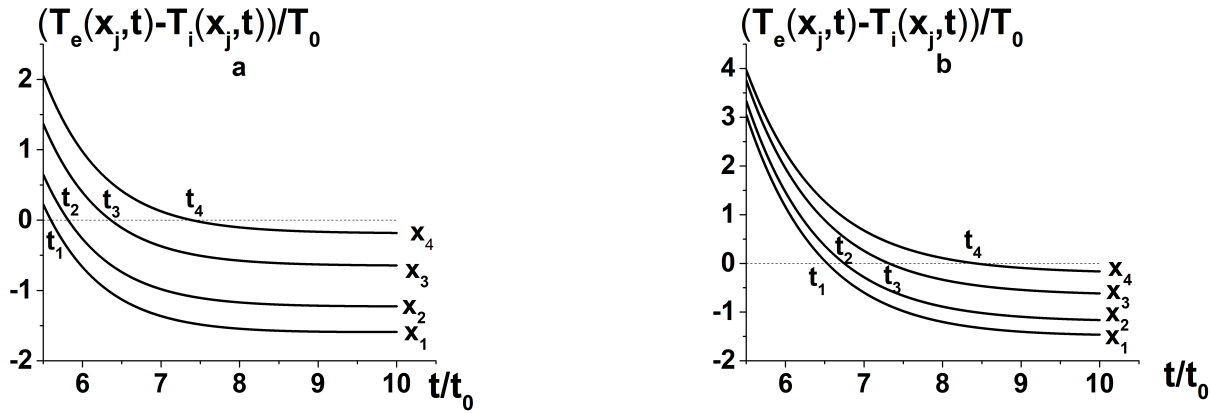


Рис.5. Динамика разности температур электронного газа и кристаллической решетки $T_e(x, t) - T_i(x, t)$ в точках с координатами $x_i = x_0 \cdot 0.2 \cdot (i - 1)$, $i = 1, 2, 3, 4$ ($T_0 = 300 \text{ K}$, $t_0 = 10^{-14} \text{ с}$, $x_0 = 30 \text{ нм}$), полученные в рамках гиперболической МТП(рис.5а) и параболической МТП(рис.5b).



Back

Close

Список литературы

- [1] Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции. УФН, 2002г., т. 172, №3, стр. 301-333.
- [2] Вейко В.П., Либенсон М.Н., Червяков Г.Г., Яковлев Е.Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика. /Под ре. В.И. Конова. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. –312с. – ISBN 978-5-9221-0934-5.
- [3] Allen M. P., Tildesley D. J. Computer Simulation of Liquids. Walton Street, Oxford OX2 6DP: Clarendon Press, 1991. ISBN: 0198553757
- [4] Jin Z. H., Gumbsch P., Lu K., Ma E. Melting Mechanisms at the Limit of Superheating // Physical Review Letters. 2001. Vol. 87, no. 5. P. 055703.
- [5] Abraham F. F., Broughton J. Q. Pulsed melting of silicon (111) and (100) surfaces simulated by molecular dynamics // Physical Review Letters. 1986.



Back

Close

- [6] Zhigilei V., Garrison B. J. Pressure Waves in Microscopic Simulations of Laser Ablation // Materials Research Society (MRS) Proceedings. Vol. 538. Cambridge University Press, 1998. P. 491–496.
- [7] Etcheverry J. I., Mesaros M. Molecular dynamics simulation of the production of acoustic waves by pulsed laser irradiation // Physical Review B. 1999. Vol. 60, no. 13. P. 9430–9434.
- [8] Zhigilei L. V., Garrison B. J. Microscopic mechanisms of laser ablation of organic solids in the thermal and stress confinement irradiation regimes // Journal of Applied Physics. 2000. Vol. 88, no. 3. P. 1281–1298.
- [9] В.Б. Фокин. Континуально-атоматическая модель и ее применение для численного расчета воздействия одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импульса на металлы. Диссертация кандидата физико-математических наук, Москва-2017г.
- [10] S.L. Sobolev. Two-temperature discrete model for nonlocal heat conduction. J. Phys. III France **3** (1993)2261-2269
- [11] С.Л. Соболев. Локально-неравновесные модели процессов переноса. УФН, 1997г., т.167, №10, стр. 1095-1106.



Back

Close

- [12] S.L. Sobolev. Nonlocal two temperature model: Application to heat transport in materials irradiated by ultrashort laser pulses. International Journal of Heat Mass Transfer 94(2016) 138-144(journal homepage: www.elsevier.com/locate/ijhmt)
- [13] S.L. Sobolev. On hyperbolic heat-mass transfer equation. International Journal of Heat Mass Transfer 122(2018) 629-630(journal homepage: www.elsevier.com/locate/ijhmt)
- [14] Igor V. Kudinov, Sergey L. Sobolev, Galina M. Mikheeva. Study of the Two-Temperature Heat Transfer Model in Metal Nonofilms Exposed to Ultrashort Leasr Pulses. Central European Symposium on Thermophysics 2020(CEST2020) AIP Conf. Proc. 2275, 020015-1-020015-6; <https://doi.org/10.1063/5.0025795> Published by AIP Publishing. 978-0-7354-4005-0/S30.00
- [15] S.L. Sobolev. The Local-Nonequilibrium Temperature Field Around the Melting and Crystallization Front Indused by Picosecond Pulsed Laser Irradiation. International Journal of Thermophysics, Vol. 17, No. 5, 1996



Back

Close

- [16] В. Лыков, Тепломассообмен: 2-ое изд., М. Энергия, 1978г., 480с.
- [17] P. Vernott. Computures Rendus. 1958. Vol.246, N22, p.3154, 3155.
- [18] Э.М. Карташов, В.А. Кудинов. Аналитические методы теории теплопроводности и ее приложений. М., ЛЕНАНД, 2018г.–1072с.
- [19] Амирханов И.В., Сархадов И., Тухлиев З.К. Моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах под действием лазерных импульсов в рамках гиперболической модели термического пика 51-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с Кристаллами. Москва, МГУ им М.В. Ломоносова, 24-26 мая 2022.
- [20] Амирханов И.В., Сархадов И., Тухлиев З.К. Результаты численного моделирования тепловых процессов, возникающих в материалах при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов. "Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем". Конференция состоится в Москве, Россия, 18-22 апреля 2022 г.



Back

Close

- [21] Ilkizar V. Amirkhanov, Nil R. Sarker, Ibrohim Sarkhadov. Numerical simulation of thermal processes occurring in materials under the action of femtosecond laser pulses. Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science., ISSN:2658-4670, Изд:Российский университет дружбы народов. Vol. 29, N1, 2021y., ps. 5-13.
- [22] А.А.Самарский. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983, с.258-276.
- [23] И.В. Амирханов, И. Сархадов, З.К.Тухлиев. Моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах под действием лазерных импульсов в рамках гиперболической модели термического пика. // Препринт ОИЯИ P11-2022-31



Back

Close