

P11-2023-52

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

ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ
ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ,
ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ
ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ
ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

Направлено в журнал «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные
и нейтронные исследования»

* E-mail: ibrohim@jinr.ru

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

P11-2023-52

Численные результаты тепловых процессов, возникающих в материалах при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов

В последние годы созданы лазеры, генерирующие ультракороткие световые импульсы. В настоящее время возрастает необходимость в создании и совершенствовании достоверных физических моделей, способных описывать различные процессы в веществе. При этом компьютерное моделирование занимает сейчас одно из главных мест в исследовании таких задач.

В данной работе предложена модификация модели термического пика, базирующаяся на системе двух связанных гиперболических уравнений теплопроводности для электронного газа и кристаллической решетки, для моделирования тепловых процессов, возникающих в материалах при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов. Действие лазера в электронном газе учтено через функцию источника.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий им. М. Г. Мещерякова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2023

Amirkhanov I. V., Sarkhadov I., Tukhliev Z. K.

P11-2023-52

Numerical Results of Thermal Processes Occurring in Materials under the Action of Femtosecond Laser Pulses

In recent years, lasers have been created that generate ultrashort light pulses. Currently, there is an increasing need to create and improve reliable physical models capable of describing various processes in matter. At the same time, computer modeling now occupies one of the main places in the study of such problems.

The paper proposes a modification of the thermal spike model based on a system of two coupled hyperbolic heat conduction equations for an electron gas and a crystal lattice for modeling thermal processes occurring in materials under the action of femtosecond laser pulses. The action of the laser in the electron gas is taken into account through the source function.

The investigation has been performed at the Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2023

ВВЕДЕНИЕ

Исследование взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом является важным в связи со многими фундаментальными проблемами, такими как физика неравновесных процессов, генерация ударных волн, лазерное ускорение ионов, модификации свойств облучаемого материала и т. д. [1–9].

Обобщая закон Фурье, учитывающий время релаксации теплового потока, получаем гиперболическое уравнение теплопроводности [10–18].

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 предыдущих работах [19–22] подробно обсуждается модификация модели термического пика (МТП), базирующаяся на системе двух взаи-

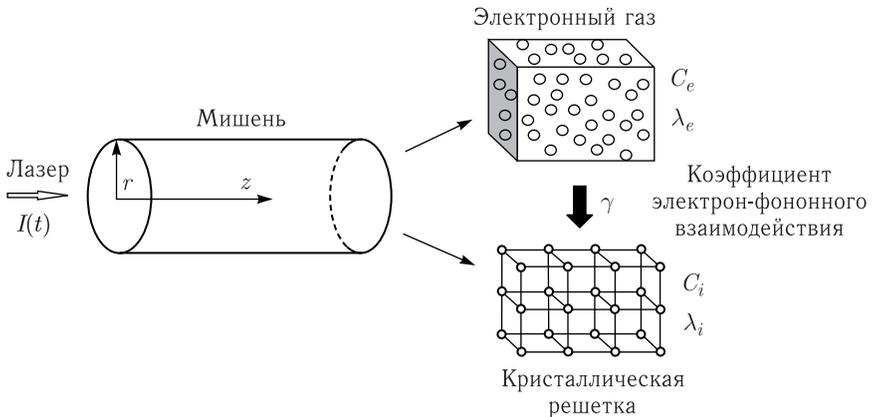


Рис. 1. Схема гиперболической модели термического пика при облучении мишени лазером. $I(t) = I_0 f(t)$, I_0 — интенсивность лазера на поверхности образца, $f(t)$ — временная форма интенсивности лазера (источника). Лазер нагревает электронный газ

мсовязанных гиперболических уравнений теплопроводности для электронного газа и кристаллической решетки (рис. 1). В предыдущей работе численное моделирование проводилось только в пределах времени действия источника.

В настоящей работе проведены численные исследования при больших временах после выключения источника при разных параметрах релаксации потоков тепла в электронном газе и кристаллической решетке. Приведены исходные уравнения в безразмерных переменных и безразмерных величинах.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Модифицированные уравнения МТП в безразмерных переменных и безразмерных величинах имеют вид

$$\frac{\partial \bar{T}_e}{\partial \bar{t}} + \bar{\tau}_e \frac{\partial^2 \bar{T}_e}{\partial \bar{t}^2} = k_e \frac{\partial^2 \bar{T}_e}{\partial \bar{x}^2} - \gamma_e (\bar{T}_e - \bar{T}_i) - \gamma_e \bar{\tau}_e \frac{\partial}{\partial \bar{t}} (\bar{T}_e - \bar{T}_i) + \bar{A}_e(\bar{x}, \bar{t}) + \bar{\tau}_e \frac{\partial \bar{A}_e(\bar{x}, \bar{t})}{\partial \bar{t}}, \quad (1)$$

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

$$\bar{T}_\alpha(\bar{x}, 0) = 1, \quad \frac{\partial \bar{T}_\alpha(\bar{x}, \bar{t})}{\partial \bar{t}} \Big|_{\bar{t}=0} = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \bar{T}_\alpha(\bar{x}, \bar{t})}{\partial \bar{x}} \Big|_{\bar{x}=0} = 0, \quad \bar{T}_\alpha(\bar{x}_{\max}, \bar{t}) = 1, \quad \alpha = e, i,$$

где

$$\bar{A}_e(\bar{x}, \bar{t}) = A_0 \bar{f}_1(\bar{x}) \bar{f}_2(\bar{t}), \quad A_0 = \frac{\Phi[1 - R(\bar{T}_s)]}{2L_p C_e T_0},$$

$$\bar{f}_1(\bar{x}) = e^{-\beta \bar{x}}, \quad \beta = \frac{\Delta x}{L_p},$$

$$\bar{f}_2(\bar{t}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \bar{\sigma}_t}} \left(\exp \left[-\frac{(\bar{t} - \bar{t}_0)^2}{2\bar{\sigma}_t^2} \right] + \exp \left[-\frac{(\bar{t} - \bar{t}_0 - \bar{t}_d)^2}{2\bar{\sigma}_t^2} \right] \right),$$

$$\Phi = 2I_0 \Delta t \bar{\sigma}_t, \quad \bar{T}_\alpha = \frac{T_\alpha}{T_0}, \quad \bar{x} = \frac{x}{\Delta x}, \quad \bar{t} = \frac{t}{\Delta t}, \quad \bar{\sigma}_t = \frac{\sigma_t}{\Delta t},$$

$$\bar{t}_0 = \frac{t_0}{\Delta t}, \quad \bar{\gamma}_\alpha = \frac{\gamma \Delta t}{C_\alpha}, \quad k_\alpha = \frac{\lambda_\alpha \Delta t}{C_\alpha \Delta x^2}, \quad \alpha = e, i.$$

2. ОБСУЖДЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Численный эксперимент проведен с применением метода конечных разностей явной схемы [23] для материала никеля, облучаемого лазерным импульсом со следующими параметрами [9]:

$$\lambda_i = 91 \frac{\text{Вт}}{\text{К} \cdot \text{м}}, \quad \rho_i = 4560 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad c_i = 500 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}},$$

$$x_{\max} = 3 \cdot 10^{-7} \text{ м}, \quad T_0 = 300 \text{ К},$$

$$R(T_s) = 0, \quad C_i = \rho_i c_i = 2,28 \cdot 10^6 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{м}^3},$$

$$\lambda_e = 200 \frac{\text{Вт}}{\text{К} \cdot \text{м}}, \quad C_e = 27330 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{м}^3}, \quad L_p = 3 \cdot 10^{-8} \text{ м},$$

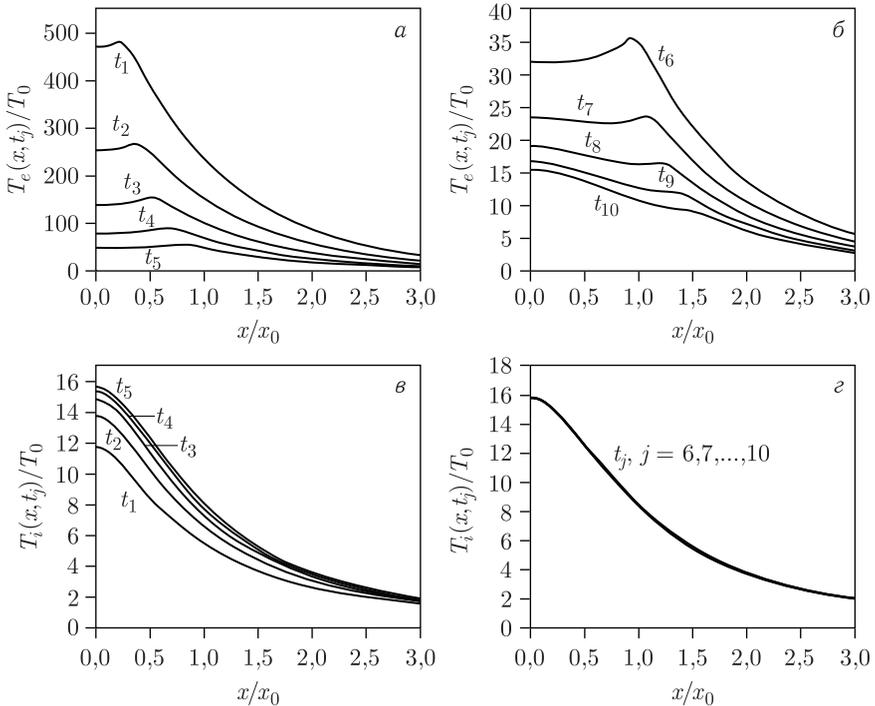


Рис. 2. Профили температур электронного газа $T_e(x, t_j)$ (а, б) и кристаллической решетки $T_i(x, t_j)$ ($T_0 = 300 \text{ К}$) (в, г) в разные моменты времени $t_j = (1 + 0,5 j) t_0$ ($j = 1, 2, \dots, 10$, $t_0 = 10^{-14} \text{ с}$, $x_0 = 30 \text{ нм}$), полученные в рамках гиперболической МТП

$$\gamma = 2,733 \cdot 10^{18} \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{М}^3}, \quad \Phi = 400 \frac{\text{Дж}}{\text{М}^2}, \quad \sigma_t = 5 \cdot 10^{-16} \text{ с}, \quad t_0 = 3 \cdot 10^{-15} \text{ с},$$

$$\Delta x = 3 \cdot 10^{-8} \text{ м}, \quad \Delta t = 10^{-14} \text{ с}, \quad \tau_e = 10^{-14} \text{ с}, \quad \tau_i = 10^{-12} \text{ с}.$$

При этих параметрах безразмерные константы k_e , k_i , γ_e , γ_i , A_0 , β , $\bar{\tau}_e$, τ_i принимают следующие значения: $k_e \simeq 8,13107 \cdot 10^{-2}$, $k_i \simeq 4,4347 \cdot 10^{-4}$, $\gamma_e = 1$, $\gamma_i \simeq 1,199 \cdot 10^{-2}$, $A_0 \simeq 16262,1458$, $\beta = 1$, $\bar{\tau}_e = 1$, $\bar{\tau}_i = 100$.

Из рис. 2 видно, что в профиле температуры электронного газа возникает фронт и по истечении времени этот фронт двигается по оси x . При больших временах данный фронт сглаживается. Пока аналогичного появления фронта в профиле температуры кристаллической решетки T_i не наблюдается. Также видно, что температура кристаллической решетки при временах $t_j = (1 + 0,5j)t_0$, $j = 6, 7, \dots, 10$, слабо меняется. Это связано с тем, что вначале, когда электронный газ был достаточно нагрет, в электронный газ поступило тепло за счет члена $\gamma_i(\bar{T}_e - \bar{T}_i)$, а потом, когда обе температуры стали близки друг к другу, кристаллическая решетка стала меньше нагреваться.

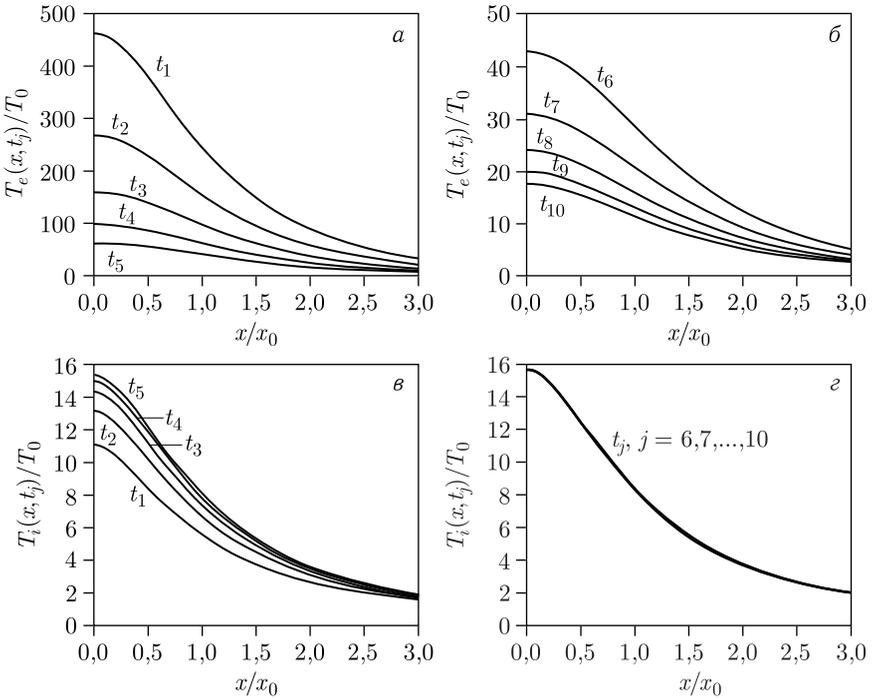


Рис. 3. Профили температур электронного газа $T_e(x, t_j)$ (а, б) и кристаллической решетки $T_i(x, t_j)$ ($T_0 = 300 \text{ К}$) (в, г) в разные моменты времени $t_j = (1 + 0,5j)t_0$ ($j = 1, 2, \dots, 10$, $t_0 = 10^{-14} \text{ с}$, $x_0 = 30 \text{ нм}$), полученные в рамках параболической МТП

На рис. 3 приведены аналогичные результаты, полученные в рамках параболической МТП. Видно, что в рамках этой модели появление фронта в профиле температуры электронного газа не наблюдается.

Чтобы выявить тенденцию изменения температур электронного газа и кристаллической решетки, в рамках обеих моделей провели численное моделирование в интервале времени $t = 10-100$.

На рис. 4 показаны аналогичные изменения температур в этом промежутке времени. Видно, что обе температуры слабо меняются. Но наблюдается один любопытный факт: в обеих моделях температура кристаллической решетки превышает температуру электронного газа, т. е. если раньше электронный газ нагревал кристаллическую решетку, то теперь, наоборот, электронный газ нагревается за счет кристаллической решетки.

На рис. 5 приведены профили температур электронного газа и кристаллической решетки при временах $t_1 = 10t_0$, $t_2 = 100t_0$, $t_3 = 1000t_0$ для обеих моделей.

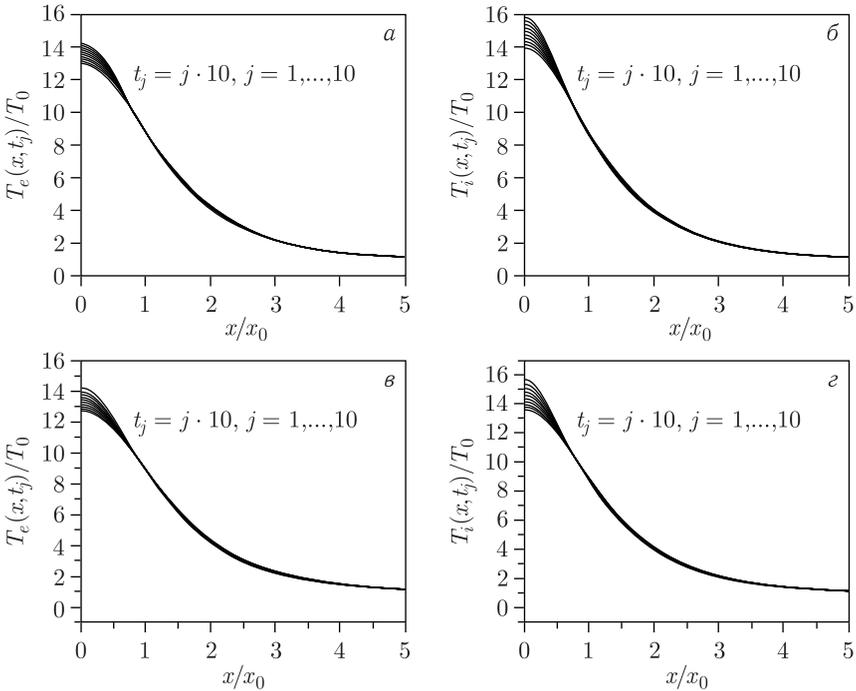


Рис. 4. Профили температур электронного газа $T_e(x, t_j)$ и кристаллической решетки $T_i(x, t_j)$ при временах $t_j = 10t_0$ ($j = 1, 2, \dots, 10$, $T_0 = 300$ К, $t_0 = 10^{-14}$ с, $x_0 = 30$ нм), полученные в рамках гиперболической (а, б) и параболической (в, з) МТП

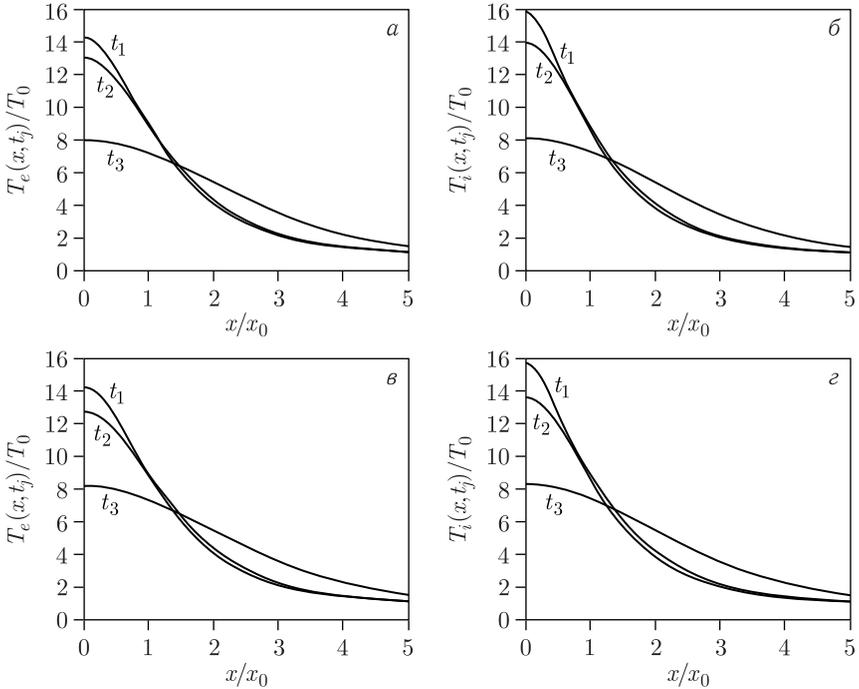


Рис. 5. Профили температур электронного газа $T_e(x, t_j)$ и кристаллической решетки $T_i(x, t_j)$ при временах $t_1 = 10t_0$, $t_2 = 100t_0$, $t_3 = 1000t_0$ ($T_0 = 300$ К, $t_0 = 10^{-14}$ с, $x_0 = 30$ нм), полученные в рамках гиперболической (а, б) и параболической (в, г) МТП

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В динамике профилей температур электронного газа и кристаллической решетки в рамках обеих моделей 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.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Министерства образования, культуры, науки и спорта Монголии в рамках научного проекта № 20-51-44001.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. // УФН. 2002. Т.172, №3. С.301; <https://doi.org/10.3367/UFNr.0172.200203b.0301>.

2. Вейко В. П., Либенсон М. Н., Червяков Г. Г., Яковлев Е. Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика / Под ред. В. И. Конова. М.: Физматлит, 2008. С. 312.
3. Allen M. P., Tildesley D. J. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press, 1991.
4. Jin Z. H., Gumbsch P., Lu K., Ma E. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87, No. 5. P. 055703; <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.055703>.
5. Abraham F. F., Broughton J. Q. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 734; <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.734>.
6. Zhigilei V., Garrison B. J. Pressure // Mater. Res. Soc. Proc. 1998. V. 538. P. 491; <https://doi.org/10.1557/PROC-538-491>.
7. Etcheverry J. I., Mesaros M. // Phys. Rev. B. 1999. V. 60, No. 13. P. 9430–9434; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.9430>.
8. Zhigilei L. V., Garrison B. J. // J. Appl. Phys. 2000. V. 88, No. 3. P. 1281; <https://doi.org/10.1063/1.373816>.
9. Фокин В. Б. Континуально-атомистическая модель и ее применение для численного расчета воздействия одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импульса на металлы. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М., 2017.
10. Sobolev S. L. // J. Phys. III France. 1993. V. 3. P. 2261; doi: 10.1051/jp3:1993273.
11. Соболев С. Л. // УФН. 1997. Т. 167, № 10. С. 1095; <https://doi.org/10.3367/UFNr.0167.199710f.1095>.
12. Sobolev S. L. // Intern. J. Heat Mass Transfer. 2016. V. 94. P. 138; doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.11.075.
13. Sobolev S. L. // Intern. J. Heat Mass Transfer. 2018. V. 122. P. 629; doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.02.022.
14. Kudinov I. V., Sobolev S. L., Mikheeva G. M. // Central Eur. Symp. on Thermophysics 2020 (CEST 2020). AIP Conf. Proc. V. 2275. P. 020015–1–020015–6; <https://doi.org/10.1063/5.0025795>.
15. Sobolev S. L. // Intern. J. Thermophys. 1996. V. 17, No. 5. P. 1089; doi: 10.1007/BF01441997.
16. Лыков В. Теплообмен. 2-е изд. М.: Энергия, 1978. С. 480.
17. Vernott P. // Comptes Rendus. 1958. V. 246, No. 22. P. 3154–3155.
18. Карташов Э. М., Кудинов В. А. Аналитические методы теории теплопроводности и ее приложений. М.: Ленанд, 2018. С. 1072.
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 Международ. Тулиновская конф. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. Москва, 24–26 мая 2022 г. М., 2022.
20. Амирханов И. В., Сархадов И., Тухлиев З. К. Результаты численного моделирования тепловых процессов, возникающих в материалах при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов // Тр. конф. «Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем», 18–22 апр. 2022 г. М., 2022.

21. *Amirkhanov I. V., Sarker N. R., Sarkhadov I.* // Discrete Contin. Models Appl. Comput. Sci. 2021. V. 29, No. 1. P. 5; [https://doi.org/ 10.22363/2658-4670-2021-29-1-5-13](https://doi.org/10.22363/2658-4670-2021-29-1-5-13).
22. *Амирханов И. В., Сархадов И., Тухлиев З. К.* Моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах под действием лазерных импульсов в рамках гиперболической модели термического пика. Препринт ОИЯИ Р11-2022-31. Дубна, 2022.
23. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 258–276.

Получено 9 октября 2023 г.

Редактор *Е. В. Григорьева*

Подписано в печать 09.11.2023.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 0,75. Уч.-изд. л. 0,61. Тираж 105 экз. Заказ № 60773.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/