

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЛАЗМЫ, ПУЧКОВ ЧАСТИЦ И ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

УДК 519.6;535;621.373.826;

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДИАМЕТРА И ГЛУБИНЫ КРАТЕРОВ АБЛЯЦИИ ВЕЩЕСТВА ПРИ НАНОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

© 2023 г. А. С. Щекин<sup>a, b, \*</sup>, В. Н. Петровский<sup>a</sup>, А. А. Гавриков<sup>a, b</sup>, Д. В. Марин<sup>a</sup>, А. А. Иванов<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409 Россия

<sup>b</sup>ООО НТО “ИРЭ-Полус”, Фрязино, 141195 Россия

\*E-mail: alex-shekin@yandex.ru

Поступила в редакцию 12.07.2022 г.

После доработки 01.08.2022 г.

Принята к публикации 02.08.2022 г.

В работе представлено построение компьютерной модели формирования кратеров при наносекундном лазерном испарении вещества на примере монокристаллического кремния. При помощи компьютерного моделирования определена динамика формирования кратера на поверхности материала при воздействии наносекундных лазерных импульсов. Проведена оценка диаметра получаемого кратера и его глубина. Также были проведены соответствующие эксперименты по лазерной абляции монокристаллического кремния. Анализ экспериментальных данных и результатов моделирования показал, что в зависимости от длительности импульса и плотности энергии лазерного излучения изменяется механизм удаления материала. Так, наличие жидкой фазы в процессе абляции серийным образом влияет на глубину и диаметр кратера для всего диапазона плотностей энергии от 0.4 до 104.0 Дж/см<sup>2</sup>. Показано, что компьютерная модель позволяет определить объем удаляемого материала за счет испарения и оценить влияние жидкой фазы на характеристики кратеров.

*Ключевые слова:* компьютерное моделирование, лазерная абляция, лазерная обработка

**DOI:** 10.56304/S2079562922050475

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Поверхностная обработка материалов играет важную роль в современном производстве. Модификация поверхности позволяет продлевать время работы деталей трения [1], увеличить биосовместимость имплантатов [2], увеличить адгезии и изготавливать МЭМС [3], а также может использоваться как способ модификации поверхности материалов ядерной техники. Фундаментальные исследования по форме, структуре, типу поверхностей при лазерной обработке являются актуальными по всему миру, при этом популярным является метод прямого лазерного структурирования, при котором часть материала удаляется с поверхности под действием импульсного лазерного излучения [4].

При импульсной лазерной обработке плотность энергии в сечении пучка достигает настолько высоких значений, что за время воздействия импульса могут начинаться фазовые превращения на поверхности материала. Решение задачи с определением формы единичной поверхностной структурой является весьма сложной и для каждого конкретного случая решается отдельно численными методами.

Одним из широко используемых методов решения задачи лазерного нагрева является метод конечных элементов. В ряде работ [5–7] данный метод используется для определения максимальной температуры на поверхности металлов, диаметров кратера испарения и глубины испаренного слоя. Возможность предсказать результат единичного импульса при помощи компьютерного моделирования позволяет существенно сэкономить время на экспериментальную проверку и затраты материала на эксперименты для определения форм единичных элементов поверхностных структур. При этом учет фазового перехода при решении такой задачи является трудоемкой задачей и полезным является определение баланса энергии, при которой скорость фронта испарения материала находится в балансе со скоростью фронта тепловой волны внутри материала и в балансе с энергией отраженной, поглощенной в плазме, потерянной на нагрев мишени и используемой для испарения [8, 9]

Цель данной работы – построение компьютерной модели, позволяющей оценить характеристики единичных поверхностных структур в виде одиночных кратеров на поверхности моно-

**Таблица 1.** Физические характеристики монокристаллического кремния при комнатной температуре

| Характеристика | $T_m$ , К | $T_e$ , К | $R$ | $\rho$ , Кг/м <sup>3</sup> | $H_e$ , кДж/кг | $k$ , Вт/(м · К) | $C_p$ , Дж/(кг · К) | $\alpha$ |
|----------------|-----------|-----------|-----|----------------------------|----------------|------------------|---------------------|----------|
| Значение       | 1683      | 2620      | 0.5 | 2323                       | 13000          | 156              | 713                 | 0.1      |

кристаллического кремния, и экспериментальная проверка составленной модели.

## 2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА И МАТЕРИАЛЫ

Для экспериментальной проверки работы модели для формирования кратеров использовался волоконный иттербиевый лазер. Длительность лазерного импульса зависит от режима работы и составляет 4–200 нс. Максимальная энергия в импульсе зависит от выбранной длительности и составляет 1 мДж для 200 нс. Для позиционирования пучка использовалась сканирующая система с  $f$ - $\theta$  объективом с фокусным расстоянием  $F = 100$  мм. Диаметр лазерного пучка 35 мкм.

В качестве исследуемого материала был выбран коммерческий монокристаллический кремний высокой чистоты, так как его физические свойства известны и хорошо изучены. Образцы имели круглую форму с диаметром 73 мм, толщиной 500 мкм и с полированной поверхностью. Физические характеристики кремния представлены в табл. 1. Обработка проводилась в инертной среде аргона, что позволяло исключить образование оксидов в процессе обработки. Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1.

Измерения кратеров импульсов проводилось при помощи контактного профилометра и оптического микроскопа.

## 3. КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ

Нахождение температурного поля образца под действием лазерного излучения сводится к решению уравнения теплопроводности:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla(k \nabla T) = Q. \quad (1)$$

Где  $\rho$ ,  $C_p$ ,  $k$  это плотность, теплоемкость и коэффициент теплопроводности соответственно.  $T$  – температура образца в момент времени  $t$ .  $Q$  – энергия, поступающая на поверхность материала. Лазер можно задать как поверхностный источник тепла, тогда  $Q$  в уравнении можно положить равным нулю. При моделировании было учтено, что значения  $C_p$ ,  $k$  изменяются с ростом температуры материала.

Для упрощения модели в качестве области решения уравнения теплопроводности был взят цилиндр. Область определения задачи в цилиндрических координатах можно задать:

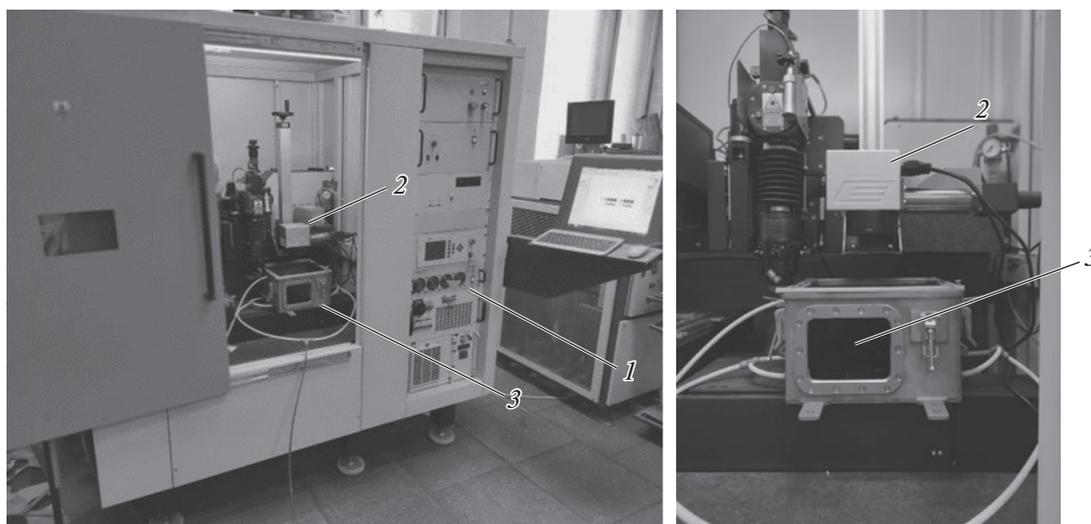
$$\begin{cases} 0 \leq z \leq h_m, \\ 0 \leq r \leq R_m, \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi, \end{cases} \quad (2)$$

где  $h_m$  – высота образца, а  $R_m$  – радиус образца.

Начальное условие можно записать в виде:

$$T(r, \varphi, z, 0) = T_0, \quad (3)$$

где  $T_0$  – комнатная температура.



**Рис. 1.** Экспериментальная установка. Цифрами обозначены: 1 – волоконный МОР-лазер, средняя мощность до 20 Вт с длительностью импульса 4–200 нс, 2 – сканирующая голова, 3 – аргоновая камера.

Для граничных условий допускается, что теплообмен с окружающей средой происходит по закону Ньютона [7]. Поэтому граничное условие для боковой (2.5) и нижней (2.6) поверхностей соответственно можно задать в виде:

$$\frac{\partial T}{\partial n}(R_m, \varphi, z, t) = h(T_0 - T), \quad (4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial n}(r, \varphi, 0, t) = h(T_0 - T), \quad (5)$$

где  $h$  – коэффициент теплоотдачи.

Граничное условие для верхней поверхности задается как суперпозиция лазерного излучения, теплообмена по закону Ньютона и теплообмена по закону Стефана–Больцмана:

$$\frac{\partial T}{\partial n}(r, \varphi, H, t) = Q(r, \varphi, t) + h(T_0 - T) + \alpha\sigma(T_0^4 - T^4), \quad (6)$$

$$Q(r, \varphi, t) = (1 - R)\text{gaus}(r)\text{imp}(t). \quad (7)$$

Где  $\alpha$  – коэффициент серости материала,  $\sigma$  – постоянная Стефана–Больцмана,  $R$  – коэффициент отражения материала,  $\text{gaus}(r)$  – Функция распределения энергии по сечению пучка,  $\text{imp}(t)$  – временной профиль импульса, задаваемый как прямоугольная функция с максимальной плотностью мощности  $I_0$ .

Функция Гаусса имеет следующий вид:

$$\text{gaus}(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0^2}} e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}}, \quad (8)$$

$r_0$  – радиус пучка

Для моделирования процесса абляции кремния под действием лазерного излучения были введены дополнительные граничные условия моделирующие тепловые потери вследствие абляции. Когда материал достигает температуры абляции, он изменяет свое состояние, преобразуется в газовую фазу и удаляется из области моделирования. Таким образом, твердый материал не может стать более горячим, чем температура испарения, и когда материал достигает этой температуры, происходит удаление массы с поверхности, которое определяется плотностью материала и теплотой сублимации.

Граничное условие, которое дополнительно накладывается на верхнюю грань:

$$q_e = h_e(T)(T - T_e), \quad (9)$$

где  $q_e$  – тепловой поток за счет испарения материала,  $T_e$  – температура испарения материала,  $h_e(T)$  – коэффициент теплопередачи, зависящий от температуры, причем  $h_e(T) = 0$  при  $T < T_e$  и увеличивается линейно при  $T > T_e$ . Наклон прямой был выбран достаточно большим, чтобы огра-

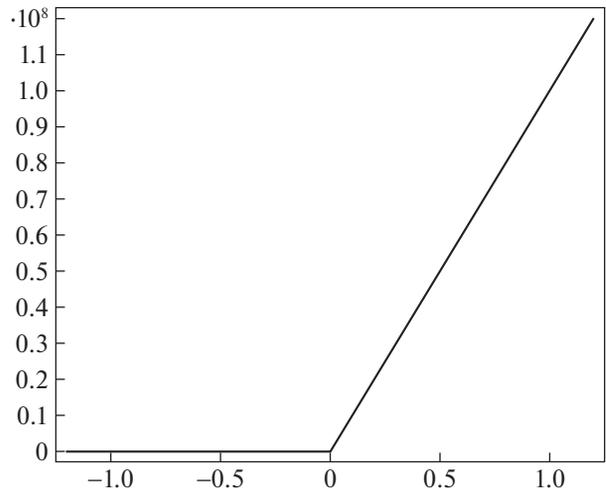


Рис. 2. Зависимость коэффициента теплопередачи от температуры.

нить возможность повышения температуры материала выше температуры абляции (рис. 2).

Также было учтено удаление материала. Скорость, с которой удаляется твердая граница материала:

$$V_e = \frac{q_e}{\rho H_e}, \quad (10)$$

где  $V_e$  – скорость, с которой движется верхняя граница материала,  $\rho$  – плотность материала,  $H_e$  – удельная теплота испарения материала.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В итоге было смоделировано температурное поле образца под действием одиночного импульса длительностью 200 нс, энергией в импульсе 1 мДж, и диаметром пучка 35 мкм. На рис. 3 изображен температурный профиль образца в моменты времени 0, 100, 200, 500 нс соответственно. Как можно видеть из рисунка объем испаренной части материала мгновенно увеличивается во время воздействия импульса, а через 500 нс поверхность материала практически полностью остывает до начальной температуры.

На рис. 4 представлен график зависимости температуры в центре воздействия импульса от времени.

Видно, что максимальная температура очень быстро (~1 нс) достигает температуры испарения кремния (2623 К), после чего рост температуры прекращается из-за сильного оттока тепла, связанного с абляцией материала.

Аналогичные вычисления были проделаны и для других длительностей импульса.

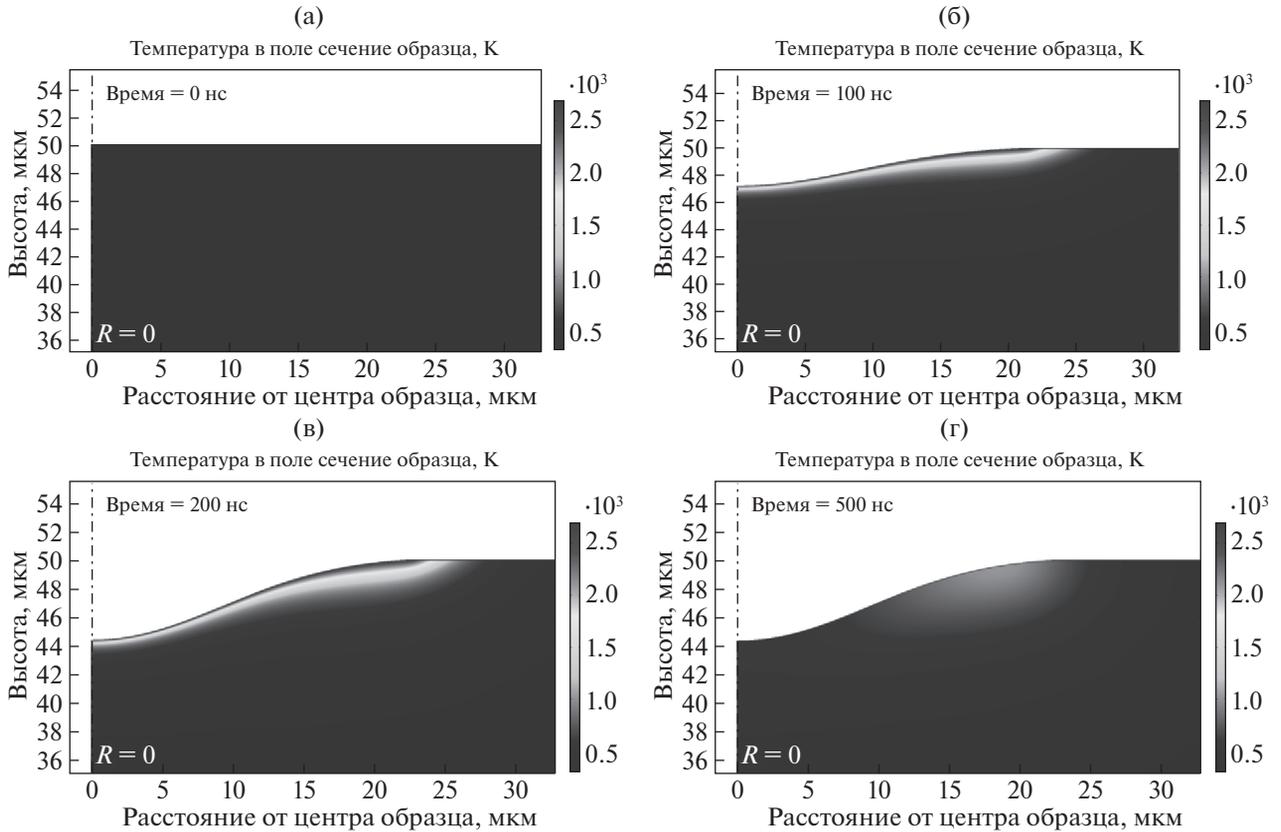


Рис. 3. Температурный профиль в момент времени  $t =$  (а) 0, (б) 100, (в) 200, (г) 500 нс.

Для проведения экспериментальной верификации для каждой длительности импульса были проведены серии экспериментов с разной энергией в импульсе 10, 20, 40, 60, 80, 100% от максимальной для каждого режима генерации импульсов. Для каждой мощности каждой длительности импульса выполнялась линия лазерных импульсов. Частота следования импульсов и скорость сканирующей системы подбирались таким образом, чтобы линия состояла из отдельных импульсов.

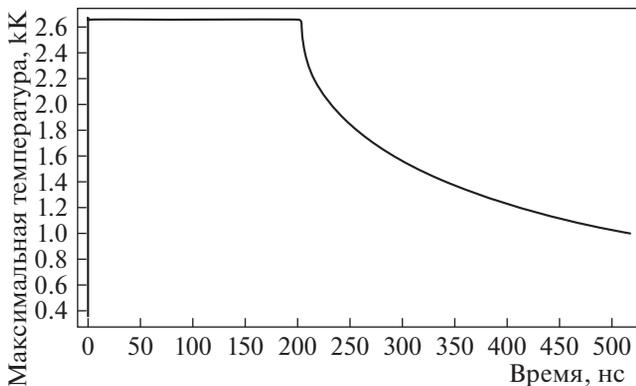


Рис. 4. Измерения характеристик кратера.

На рис. 5 представлена схема измерения внутреннего диаметра кратера  $d_{in}$ , внешнего диаметра кратера  $d_{out}$ , глубины  $H$  и высоты наплыва  $h$  на примере импульса с длительностью импульса 50 нс и энергией 0.2 мДж при помощи контактного профилометра.

На рис. 6 представлены снимки в оптический микроскоп типовых одиночных импульсов. На рис. 6 также показано, что явления затвердевания жидкой фазы вокруг ямки довольно ограничены для малой длительности импульса и плотности энергии. Противоположно этому при длительности импульсов 100 нс видно, что количество затвердевшей жидкости вокруг и внутри кратеров значительно.

На основании расчета компьютерной модели и измерения экспериментальных данных был построен сводный график зависимости внутреннего диаметра кратера от плотности энергии в импульсе (рис. 7). Также была сделана аппроксимация логарифмической функцией экспериментальных точек и точек модели, которая была выбрана согласно выражению (11).

$$d_{in} = d \sqrt{\frac{1}{2} \ln \frac{F}{F_0}}, \quad (11)$$

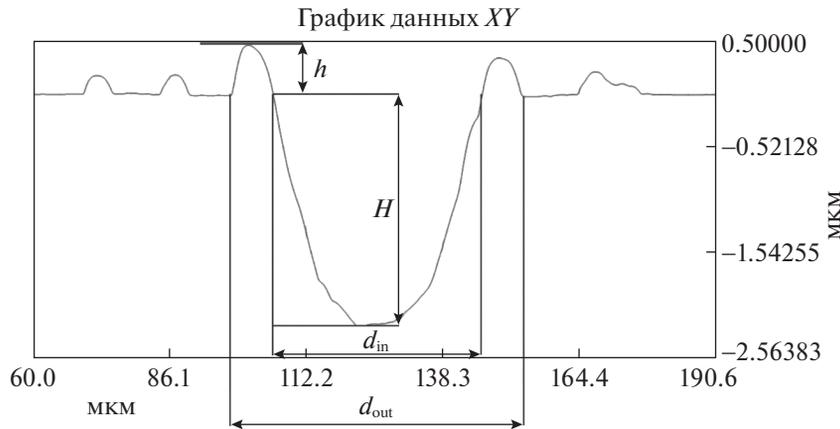


Рис. 5. График зависимости максимальной температуры образца от времени.

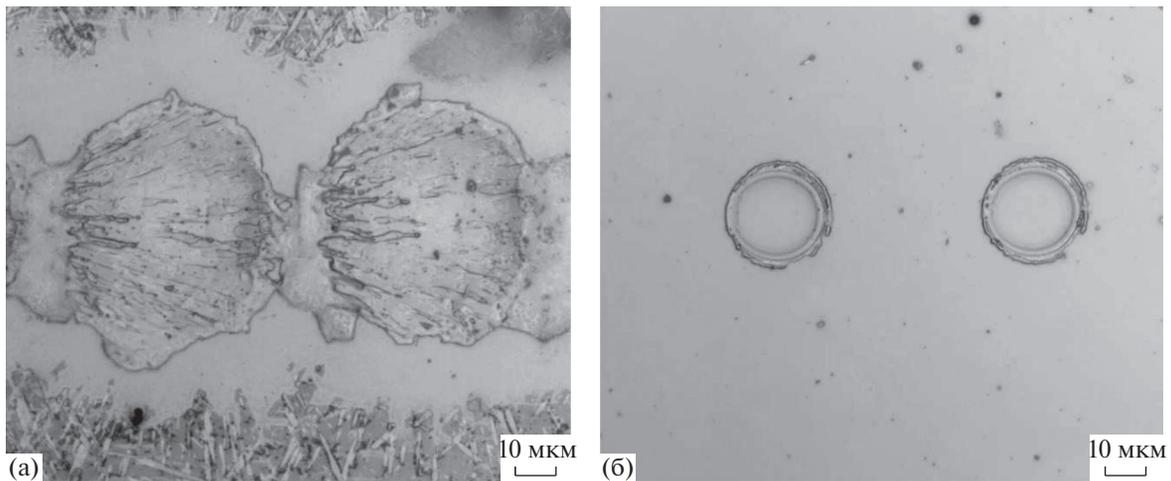


Рис. 6. Импульсы длительностью 100 нс и энергией 0.5 мДж (а) и длительностью 4 нс и энергией 0.04 мДж (б).

где  $d$  – диаметр пучка лазера,  $F$  – плотность энергии лазерного излучения,  $F_0$  – пороговая плотность энергии разрушения материала.

Из графика видно, что общая зависимость между экспериментом и компьютерной моделью совпадает. Стоит отметить, что значения диаметра из модели не совпадает с экспериментом, что может быть связано с тем, что модель не учитывает образование жидкой фазы, которая образуется в процессе нагрева в центре кратера обработки и в области вокруг кратера. Предполагается, что в результате нагрева в реальном случае не происходит резкого испарения вещества в первые наносекунды нагрева, а происходит постепенный нагрев материала до жидкой фазы передним фронтом импульса, который продолжается до достижения температуры испарения, и спадает при окончании импульса. Из-за этого при малых длительностях импульса моделирование дает результат диаметра кратера больше, чем в реальном эксперименте.

Кроме диаметра кратера абляции также проводилось измерение глубины кратера. На рисунке представлен сводный график зависимости глубины кратера от плотности энергии в импульсе (рис. 8).

Из рис. 8 видно, что по модели глубина кратера изменяется линейно, а экспериментальные значения отличаются от модели. Данное явление связано с тем, что модель не учитывает появление жидкой фазы и выброс капель жидкости в процессе обработки давлением насыщенных паров.

На рис. 9 приведены примеры типичных профилей кратеров абляции для длительностей импульсов 200, 50 и 4 нс полученных экспериментально и при помощи модели.

Из рис. 8 и 9 видно, что при длительности импульсов 200 нс дно кратера отличается от плавного и имеет большое количество неровностей. При уменьшении длительности импульса контур сглаживается и становится похож на контур по моде-

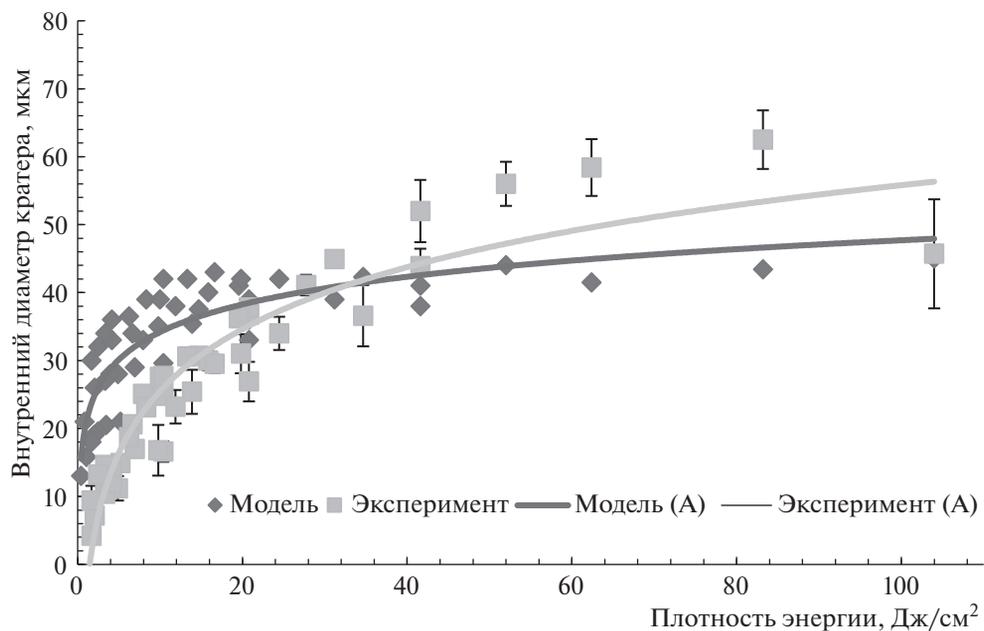


Рис. 7. График зависимости внутреннего диаметра кратера от энергии в импульсе.

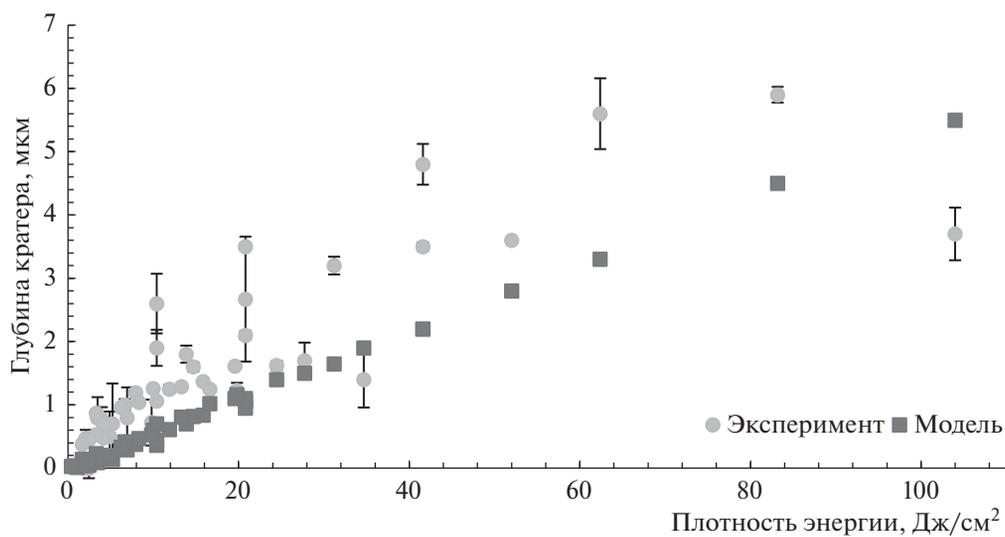


Рис. 8. График зависимости глубины кратера от энергии в импульсе.



Рис. 9. Профиль кратеров теоретический и экспериментальный для (а) 200, (б) 50, (в) 4 нс.

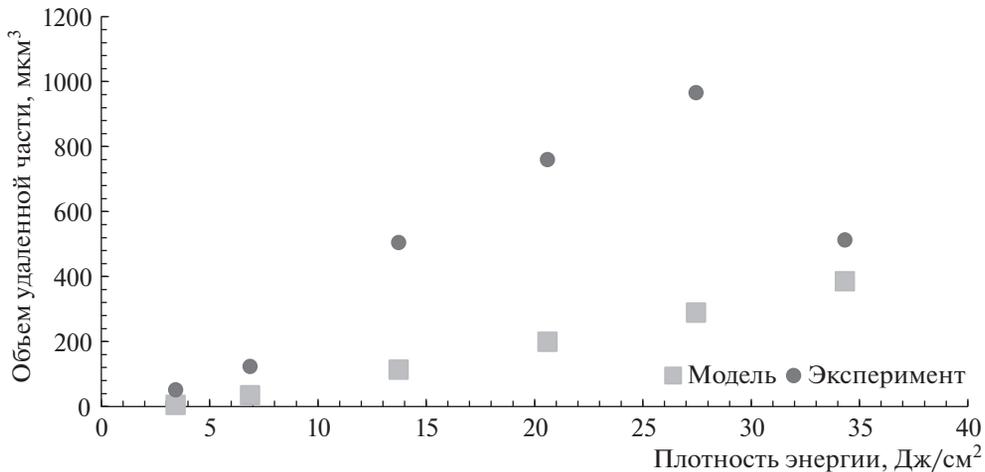


Рис. 10. График зависимости удаленного объема материала.

ли. Стоит отметить, что при всех длительностях импульсов контур профиля по модели не совпадает с профилем экспериментальным, а также наблюдается наплыв на краях кратера. Можно предположить, что при реальных наносекундных лазерных импульсах углубление происходит не только за счет испарения материала, но и за счет вымывания жидкой фазы из центра кратера к краям за счет эффекта Марангони [10] при плотностях энергии до 10 Дж/см<sup>2</sup>, а при значениях плотности энергии выше также и за счет выбрасывания жидкой фазы вокруг зоны взаимодействия.

Исходя из этого для оценки удаляемого объема вещества были измерены внешние диаметры кратера  $d_{out}$  и величина наплыва для определения вымываемой части, после чего был посчитан объем испаряемого вещества при моделировании и в типичном реальном эксперименте (рис. 10). Данные приведены для длительности импульсов 50 нс и плотностей энергий 3.43 до 34.3 Дж/см<sup>2</sup>.

Можно предположить, что с ростом плотности энергии основным механизмом удаления материала является выброс расплавленного материала, как представлено на рис. 6а.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены результаты по применению компьютерного моделирования для определения диаметра и глубины кратеров испарения материала при лазерном наносекундном воздействии. Определено, что в зависимости от длительности импульса и плотности энергии меняется вклад в удаления объема материала. При длительности импульсов порядка 4 нс и плотности энергии 4.2 Дж/см<sup>2</sup> удаление материала происходит за счет вымывания и испарения, а при значениях дли-

тельности импульсов и плотности энергии выше: за счет выбрасывания капель жидкой фазы из зоны обработки, вымывания жидкости из центра кратера к краям и непосредственное испарение за счет абляции материала.

Построение компьютерной модели позволяет оценить какая часть материала удаляется за счет испарения в случае, когда формирования жидкой фазы абляции в процессе воздействия лазерного импульса незначительно.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Borghi A. et al. // *Wear*. 2008. V. 265 (7–8). P. 1046.
2. Baino F. et al. // *Coatings*. 2019. V. 9 (6). P. 369.
3. Komvopoulos K. // *J. Adhes. Sci. Technol.* 2003. V. 17 (4). P. 477–517.
4. Etsion I. // *J. Tribol.* 2005. V. 127 (1). P. 248–253.
5. Wang Y. et al. // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2017. V. 113. P. 1246.
6. Lee J., Yoo J., Lee K. // *J. Mech. Sci. Technol.* 2014. V. 28 (5). P. 1797–1802.
7. Zhang J.J. et al. // *Adv. Eng. Mater.* 2019. V. 21 (8). P. 1900193.
8. Bulgakova N.M., Bulgakov A.V. // *Appl. Phys. A*. 2001. V. 73 (2). P. 199–208.
9. Bulgakova N.M., Bulgakov A.V., Babich L.P. // *Appl. Phys. A*. 2004. V. 79 (4–6). P. 1323–1326.
10. Schwarz-Selinger T. et al. // *Phys. Rev. B*. 2001. V. 64 (15). P. 1553231–1553237.

## Determination of the Diameter and Depth Of Substance Ablation Craters during Nanosecond Laser Pulses Using Computer Modeling

A. S. Shchekin<sup>1, 2, \*</sup>, V. N. Petrovskiy<sup>1</sup>, A. A. Gavrikov<sup>1, 2</sup>, D. V. Marin<sup>1</sup>, and A. A. Ivanov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

<sup>2</sup>IPG IRE-Polus, Fryazino, 141195 Russia

\*e-mail: alex-shekin@yandex.ru

Received July 12, 2022; revised August 1, 2022; accepted August 2, 2022

**Abstract**—This paper presents the construction of a computer model of crater formation during nanosecond laser evaporation of matter by the example of monocrystalline silicon. The computer simulation is used to determine the dynamics of crater formation on the material surface when exposed to nanosecond laser pulses. The diameter of the obtained crater and its depth were evaluated. The corresponding experiments on laser ablation of monocrystalline silicon were also carried out. The analysis of experimental data and simulation results showed that depending on the pulse duration and energy density of laser radiation the mechanism of material removal changes. Thus, the presence of the liquid phase in the ablation process seriously affects the depth and diameter of the crater for the entire range of energy densities from 0.4 to 104.0 J/cm<sup>2</sup>. It is shown that a computer model can determine the volume of removed material due to evaporation and evaluate the effect of the liquid phase on crater characteristics.

*Keywords:* computer modeling, laser ablation, laser processing