

ANALIZA WRAŻLIWOŚCI CIENKIEJ WARSTWY METALOWEJ PODDANEJ DZIAŁANIU LASERA

EWA MAJCHRZAK, JOLANTA DZIATKIEWICZ, GRAŻYNA KAŁUŻA

*Katedra Wytrzymałości Materiałów i Metod Komputerowych Mechaniki, Politechnika Śląska
e-mail: ewa.majchrzak@polsl.pl, jolanta.dziatkiewicz@polsl.pl, grazyna.kaluza@polsl.pl*

Streszczenie. Rozpatrywano cienką warstwę metalową poddaną działaniu lasera o ultrakrótkim impulsie. Przewodzenie ciepła w warstwie opisano za pomocą modelu dwutemperaturowego składającego się z układu dwóch sprzężonych równań parabolicznych określających temperaturę gazu elektronowego i sieci krystalicznej. Przeprowadzono analizę wrażliwości pól temperatury ze względu na grubość warstwy. W tym celu wykorzystano podejście bezpośrednie analizy wrażliwości kształtu z zastosowaniem pochodnej materialnej. Pokazano wyniki obliczeń oraz sformułowano wnioski.

1. WSTĘP

Przewodzenie ciepła w cienkiej warstwie metalowej (o grubości wyrażonej w nanometrach) poddanej działaniu lasera o ultrakrótkim impulsie należy opisywać innymi niż Fourierowskie modelami [1]. Okazuje się bowiem, że powszechnie stosowane w opisach makroskopowych prawo Fouriera nie obowiązuje w skali mikro i nano. W literaturze proponowane są różne modele przewodzenia ciepła w skali mikro [1, 2, 3], między innymi równanie Cattaneo, równanie z dwoma czasami opóźnień i modele dwutemperaturowe. Te ostatnie składają się z układu dwóch sprzężonych parabolicznych lub hiperbolicznych równań różniczkowych określających zmiany temperatury gazu elektronowego i sieci krystalicznej.

Celem pracy było przeprowadzenie analizy wrażliwości pól temperatury ze względu na grubość warstwy metalowej. Rozkłady temperatury elektronów i sieci opisano za pomocą dwutemperaturowego modelu parabolicznego. Oddziaływanie lasera uwzględniono w składniku źródłowym występującym w równaniu opisującym pole temperatury gazu elektronowego. Zastosowano podejście bezpośrednie analizy wrażliwości kształtu z wykorzystaniem koncepcji pochodnej materialnej [4, 5]. W tym przypadku sformułowanie problemu dodatkowego sprowadza się do zróżniczkowania równań i warunków brzegowo-początkowych opisujących analizowany proces. Zadanie bezpośrednie oraz dodatkowe rozwiązano za pomocą jawnego schematu metody różnic skończonych, który zastosowano w opracowanym autorskim programie komputerowym.

W końcowej części pracy przedstawiono wyniki obliczeń, czyli rozkłady temperatury oraz rozkłady funkcji wrażliwości i na tej podstawie dokonano oceny zmian temperatury elektronów i sieci spowodowanych zmianą parametru kształtu.

2. OPIS MATEMATYCZNY

Rozpatrywano cienką warstwę metalową (zadanie 1D) o grubości L poddaną działaniu lasera (rys. 1). Przepływ ciepła opisano dwutemperaturowym modelem parabolicznym [1, 2, 6]

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda_e(T_e, T_l) \frac{\partial T_e(x,t)}{\partial x} \right] - G [T_e(x,t) - T_l(x,t)] + Q(x,t) \quad (1)$$

$$C_l \frac{\partial T_l(x,t)}{\partial t} = \lambda_0 \frac{\partial^2 T_l(x,t)}{\partial x^2} + G [T_e(x,t) - T_l(x,t)] \quad (2)$$

gdzie $T_e(x, t)$, $T_l(x, t)$ oznaczają odpowiednio temperaturę gazu elektronowego i sieci krystalicznej, $C_e(T_e) = \gamma T_e$ ($\gamma = \text{const}$) jest liniowo zależną od temperatury pojemnością cieplną elektronów, $\lambda_e(T_e, T_l) = \lambda_0 T_e / T_l$ ($\lambda_0 = \text{const}$) to współczynnik przewodzenia ciepła elektronów, C_l , λ_0 to odpowiednio pojemność cieplna i współczynnik przewodzenia ciepła sieci krystalicznej, G jest współczynnikiem sprzężenia elektron-fonon.

W równaniu (1) $Q(x, t)$ to funkcja źródła związana z działaniem lasera [2, 6]

$$Q(x, t) = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \frac{1-R}{t_p \delta} I_0 \exp \left[-\frac{x}{\delta} - \beta \frac{(t-2t_p)^2}{t_p^2} \right] \quad (3)$$

gdzie I_0 [J/m^2] jest intensywnością lasera, t_p [s] czasem trwania impulsu, δ [m] oznacza optyczną głębokość penetracji, R jest współczynnikiem odbicia oraz $\beta = 4 \ln 2$. Lokalna i chwilowa wartość $Q(x, t)$ wynika z odległości x od nagrzewanej powierzchni.

Biorąc pod uwagę bardzo krótki czas działania lasera, można zaniedbać straty ciepła na powierzchniach $x = 0$ oraz $x = L$, czyli

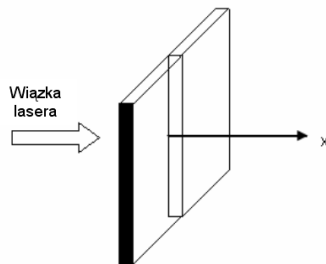
$$q_e(0,t) = q_e(L,t) = q_l(0,t) = q_l(L,t) = 0 \quad (4)$$

gdzie $q_e(x, t)$, $q_l(x, t)$ są strumieniami ciepła elektronów i sieci.

Zakłada się, że w chwili $t = 0$ temperatura elektronów jest równa temperaturze sieci oraz jest stała

$$t = 0 : T_e(x,t) = T_l(x,t) = T_p \quad (5)$$

Równoczesne rozwiązanie równań (1), (2) z warunkami brzegowymi (4) oraz początkowymi (5) pozwala na wyznaczenie rozkładów temperatury gazu elektronowego i sieci krystalicznej w rozpatrywanej warstwie.



Rys 1. Cienka warstwa metalowa poddana działaniu lasera

3. ANALIZA WRAŻLIWOŚCI KSZTAŁTU

Założono, że grubość warstwy L jest parametrem kształtu. Wykorzystując koncepcję pochodnej materialnej [4, 5], otrzymuje się

$$\frac{DT}{DL} = \frac{\partial T}{\partial L} + \frac{\partial T}{\partial x} v \quad (6)$$

gdzie $v = v(x, L)$ jest prędkością związaną z parametrem kształtu L .

Można udowodnić, że pochodna materialna funkcji $\partial T/\partial x$ wynosi [7]

$$\frac{D}{DL} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{DT}{DL} \right) - \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \quad (7)$$

Pochodna materialna funkcji $\partial^2 T/\partial x^2$ jest równa

$$\frac{D}{DL} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{DT}{DL} \right) - 2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (8)$$

natomiast pochodna materialna prędkości nagrzewania (stygnięcia)

$$\frac{D}{DL} \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{DT}{DL} \right) \quad (9)$$

Łatwo również sprawdzić, że zależności dotyczące wyznaczania pochodnej materialnej iloczynu i ilorazu dwóch funkcji są takie same jak dla zwykłych pochodnych.

Stosując metodę bezpośrednią, przeprowadzono analizę wrażliwości pól temperatury gazu elektronowego i sieci krystalicznej ze względu na parametr geometryczny L [4, 5, 7]. W pierwszej kolejności różniczkuje się równania (1), (2), czyli

$$\begin{aligned} & \frac{DC_e(T_e)}{DL} \frac{\partial T_e}{\partial t} + C_e(T_e) \frac{D}{DL} \left(\frac{\partial T_e}{\partial t} \right) = \\ & \frac{D}{DL} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda_e(T_e, T_l) \frac{\partial T_e}{\partial x} \right] \right] - G \left(\frac{DT_e}{DL} - \frac{DT_l}{DL} \right) + \frac{DQ}{DL} \end{aligned} \quad (10)$$

oraz

$$C_l \frac{D}{DL} \left(\frac{\partial T_l}{\partial t} \right) = \lambda_0 \frac{D}{DL} \left(\frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2} \right) + G \left(\frac{DT_e}{DL} - \frac{DT_l}{DL} \right) \quad (11)$$

Wykorzystując zasady wyznaczania pochodnych materialnych, pierwszy składnik po prawej stronie równania (10) przyjmuje postać

$$\begin{aligned} & \frac{D}{DL} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda_e(T_e, T_l) \frac{\partial T_e}{\partial x} \right] \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D\lambda_e(T_e, T_l)}{DL} \frac{\partial T_e}{\partial x} \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda_e(T_e, T_l) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{DT_e}{DL} \right) \right] - 2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda_e(T_e, T_l) \frac{\partial T_e}{\partial x} \right] \frac{\partial v}{\partial x} - \lambda_e(T_e, T_l) \frac{\partial T_e}{\partial x} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (12)$$

Z równania (1) wyznaczono

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda_e(T_e, T_l) \frac{\partial T_e}{\partial x} \right] = C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} + G(T_e - T_l) - Q \quad (13)$$

i powyższą zależność wstawiono do (12).

Po wykonaniu tych działań, równanie (10) można zapisać następująco

$$\begin{aligned} C_e(T_e) \frac{\partial U_e}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda_e(T_e, T_l) \frac{\partial U_e}{\partial x} \right] - G(U_e - U_l) + \\ & \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D\lambda_e(T_e, T_l)}{DL} \frac{\partial T_e}{\partial x} \right] - 2 \left[C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} + G(T_e - T_l) - Q \right] \frac{\partial v}{\partial x} - \\ & \lambda_e(T_e, T_l) \frac{\partial T_e}{\partial x} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{DQ}{DL} - \frac{DC_e(T_e)}{DL} \frac{\partial T_e}{\partial t} \end{aligned} \quad (14)$$

gdzie $U_e = DT_e/DL$, $U_l = DT_l/DL$.

W podobny sposób przekształcono równanie (11) i otrzymano

$$\begin{aligned} C_l \frac{\partial U_l}{\partial t} = & \frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} + G(U_e - U_l) - \\ & 2 \left(C_l \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial t} - G(T_e - T_l) \right) \frac{\partial v}{\partial x} - \lambda_0 \frac{\partial T_l}{\partial x} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (15)$$

Należy również zróżniczkować warunki brzegowe (4) oraz początkowe (5).

Sformułowane wyżej zadanie dodatkowe związane z analizą wrażliwości kształtu jest silnie sprzężone z problemem podstawowym opisanym w poprzednim rozdziale, ponieważ jego rozwiązanie jest możliwe pod warunkiem, że znane są temperatury gazu elektronowego i sieci krystalicznej oraz pochodne tych temperatur zarówno względem czasu jak i współrzędnej geometrycznej.

4. METODA ROZWIĄZANIA I WYNIKI OBLICZEŃ

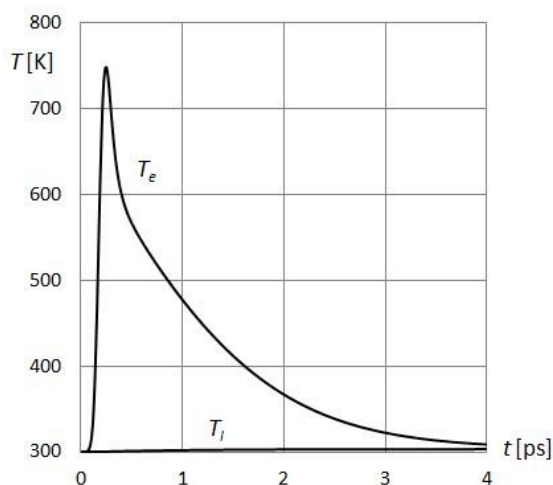
Zadanie podstawowe związane z wyznaczeniem rozkładu temperatury gazu elektronowego i sieci krystalicznej oraz zadanie dodatkowe dotyczące analizy wrażliwości pól temperatury ze względu na grubość warstwy rozwiązano za pomocą jawnego schematu różnic skończonych [6]. W obliczeniach przyjęto krok siatki $h = 1\text{nm}$, krok czasu $\Delta t = 0.00001\text{ps}$ oraz $v = x/L$.

Rozpatrywano warstwy wykonane ze złota oraz miedzi o grubości $L = 100\text{nm}$ i temperaturze początkowej $T_p = 300\text{K}$. Na powierzchnię $x = 0$ działał laser o intensywności $I_0 = 13.4\text{J/m}^2$ i impulsie $t_p = 100\text{fs}$ (por. wzór (3)). Założono współczynnik odbicia $R = 0.93$ oraz optyczną głębokość penetracji $\delta = 15.3\text{nm}$. Dla złota przyjęto współczynnik sprzężenia elektronów z fononami równy $G = 2.6 \cdot 10^{16} \text{W}/(\text{m}^3\text{K})$ oraz pojemność cieplną fononów $C_l = 2.5 \text{MJ}/(\text{m}^3 \text{K})$, natomiast dla miedzi $G = 10^{17} \text{W}/(\text{m}^3\text{K})$ oraz $C_l = 3.39 \text{MJ}/(\text{m}^3 \text{K})$. Dla obu materiałów założono liniową zależność pojemności cieplnej elektronów od ich temperatury $C_e = \gamma T_e$, gdzie dla złota $\gamma = 62.9 \text{J}/(\text{m}^3 \text{K}^2)$, a dla miedzi $\gamma = 71 \text{J}/(\text{m}^3 \text{K}^2)$. Współczynniki przewodzenia ciepła fononów wynoszą: $\lambda_l = \lambda_0$ i elektronów $\lambda_e = \lambda_0 T_e / T_l$, gdzie dla złota $\lambda_0 = 315 \text{W}/(\text{mK})$, a dla miedzi $\lambda_0 = 409 \text{W}/(\text{mK})$.

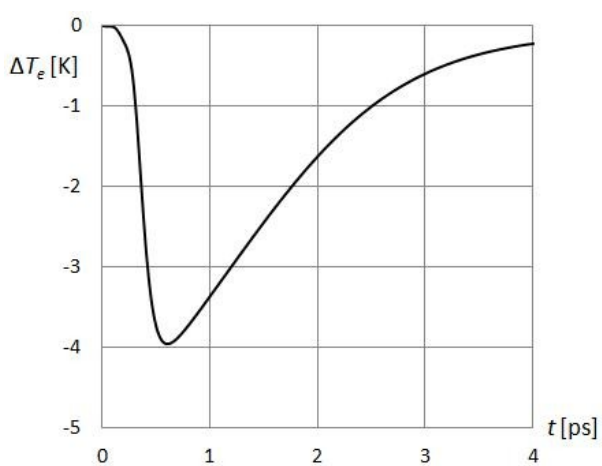
Na rys. 2 pokazano rozkład temperatury elektronów i sieci na nagrzewanej powierzchni wykonanej ze złota. Rysunki 3 i 4 pokazują zmiany temperatury elektronów i sieci na

nagrzewanej powierzchni wykonanej ze złota, a rysunki 5 i 6 dla warstwy wykonanej z miedzi spowodowane zmianą grubości warstwy o $\pm 1\text{nm}$ otrzymane na podstawie wzoru

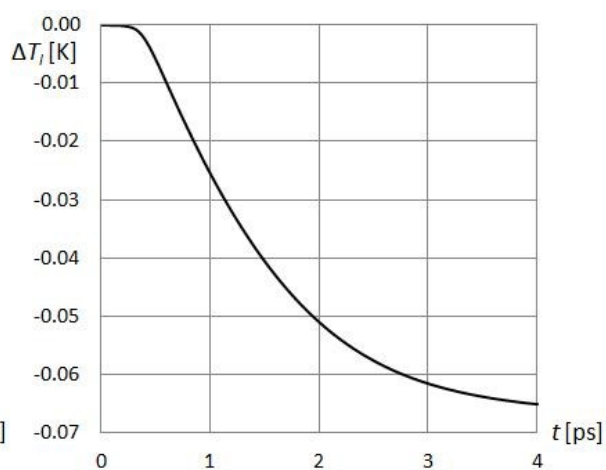
$$\Delta T(x, t, 2\Delta L) = 2U(x, t, L)\Delta L \quad (16)$$



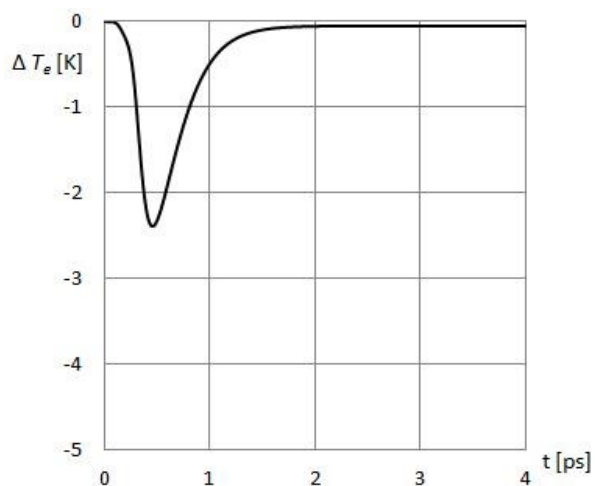
Rys. 2. Temperatura elektronów i sieci na nagrzewanej powierzchni



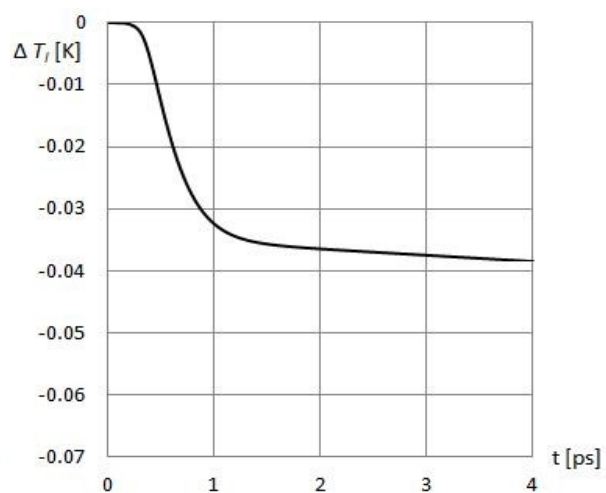
Rys. 3. Przebieg funkcji ΔT_e (złoto)



Rys. 4. Przebieg funkcji ΔT_i (złoto)



Rys. 5. Przebieg funkcji ΔT_e (miedź)



Rys. 6. Przebieg funkcji ΔT_i (miedź)

5. PODSUMOWANIE

Przeprowadzono analizę wrażliwości temperatury gazu elektronowego i sieci ze względu na grubość warstwy metalowej poddanej działaniu lasera o ultrakrótkim impulsie. Analiza wrażliwości kształtu wskazuje, że zmiana grubości warstwy wpływa głównie na zmianę temperatury elektronów (rys. 3, 5), w znacznie mniejszym stopniu na zmianę temperatury sieci (rys. 4, 6). Opracowany algorytm i program komputerowy wyznaczania temperatury elektronów i sieci wraz z analizą wrażliwości względem grubości warstwy może zostać wykorzystany w identyfikacji grubości warstwy na podstawie znajomości temperatury elektronów na nagrzewanej za pomocą lasera powierzchni (metoda gradientowa). Oszacowanie grubości warstwy ma duże znaczenie praktyczne - w przypadku warstw ochronnych można stwierdzić, czy grubość warstwy uległa zmniejszeniu i na tej podstawie ocenić, czy warstwa spełnia jeszcze ochronną funkcję.

LITERATURA

1. Zhang Z.M.: Nano/microscale heat transfer. McGraw-Hill, 2007.
2. Majchrzak E., Mochnacki B., Greer A.L., Suchy J.S.: Numerical modeling of short pulse laser interactions with multi-layered thin metal films. CMES: Computer Modeling in Engineering and Sciences, 2009, Vol. 41, No 2, p. 131-146.
3. Chen J.K., Beraun J.E.: Numerical study of ultrashort laser pulse interactions with metal films. Numerical Heat Transfer, Part A, 40, 2001, p. 1-20 (<http://www.aspbs.com/enn>).
4. Dems K.: Sensitivity analysis in thermal problems-II: structure shape variation. "Journal of Thermal Stresses" 1987, 10, p. 1-16.
5. Kleiber M.: Parameter sensitivity. Chichester: J. Wiley & Sons Ltd., 1997.
6. Majchrzak E., Poteralska J.: Numerical analysis of short-pulse laser interactions with thin metal film. "Archives of Foundry Engineering" 2010, Vol. 10, Iss. 4, p. 123-128.
7. Majchrzak E., Jasiński M., Kałuża G.: Sensitivity analysis of solidification with respect to the mould thickness. "Archives of Foundry" 2003, Vol. 3, No 9, p. 305-310.

SENSITIVITY ANALYSIS OF THIN METAL FILM SUBJECTED TO THE LASER PULSE ACTION

Summary. The thin metal film subjected to the ultrashort laser pulse has been considered. The heat conduction in thin film has been described by two-temperature model consisting of the system of two coupled parabolic equations determining the electron and lattice temperatures. The sensitivity analysis of temperature fields with respect to the film thickness has been done. To this end the direct approach of shape sensitivity analysis using the concept of material derivative has been applied. The results of computations have been shown and the conclusions have been formulated.

Pracę wykonano w ramach BK-234 / RMT-4 / 2011 oraz w ramach projektu badawczego nr N N501 2167 37.