

УДК 532.501.32

Л.В. Шмелева, к.ф.-м.н., А.Д. Супрун к.ф.-м.н., С.Н. Ежов д.ф.-м.н.
Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізический факультет

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАЗРУШЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ДАВЛЕНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

У роботі розглянута задача руйнуючого впливу випромінювання на поверхню твердої речовини. Сформульовані граничні умови для цієї задачі. Ці умови разом із системою рівнянь механіки суцільного середовища дозволяють описувати процеси, що відбуваються на поверхні під час дії лазерного випромінювання (розігрів, загартування поверхні тиском, тощо). Були вивчені особливості динаміки поверхневого руйнування матеріалу й особливості просторово-часової динаміки газової фази. Ця фаза виникає в результаті локальних фазових змін при швидкому нагріванні поверхні матеріалу лазерним імпульсом, і це приводить до формування (вигорання) корозійного кратеру. Отримано диференціальне рівняння, що описує динаміку горіння плазмового факелу. Проаналізована його "поведінка" для різних рівнів взаємодії випромінювання з газом в одновимірному просторі.

In paper the problem of the irradiation destruction influence on a solid surface is considered. The boundary conditions for this problem are formulated. These boundary conditions with a system of the continuum mechanics is describing to the processes (warming and the surface hardening by pressure) which is to result from the laser irradiation. The specificity of dynamics of the surface deterioration of the material and the specificity of time-space dynamics of a gas phase have been studied. This phase results from local phase modifications at rapid heating up of the material surface by laser pulse, and it result in formation (to a burning) of the corrosion crater. The differential equation which features dynamics of burning of the plasma plum is gained. Its "behaviour" for different levels of the irradiation interaction with gas in the one-dimensional space is analysed

В последние годы возрастает интерес к использованию очень коротких и мощных лазерных импульсов при исследовании свойств материалов [1-5]. Под действием таких импульсов поверхность вещества может разрушаться. На формирование плазменного факела, который при этом возникает, существенным образом влияет структура (гладкость, или шершавость поверхности [2], пористость [3]), и свойства поверхностного слоя мишени (поглощательная способность вещества, физико-химическая структура).

В связи с этим, создание общего теоретического подхода к процессам, которые сопровождают облучение поверхности вещества лазером в импульсном режиме, дает возможность прогнозировать последствия этого воздействия на поверхности веществ различного типа. Опираясь на $P-T$ диаграммы состояния вещества можно утверждать [5], что основные величины, которые определяют поведение вещества в экстремальном состоянии – это давление и температура [6]. При моделировании процесса разрушения часто используют гидродинамическую модель сплошной среды [4, 7], которая использована и здесь.

Общая постановка задачи

Если граничащие фазы, которые возникают при разрушении, рассматривать как сплошные среды, то исходной системой уравнений для них будет [8]:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = R, & (1) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = \mathbf{f}, & (2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial U}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) U + \operatorname{div} \mathbf{Q} = P \mathbf{v}. & (3) \end{cases}$$

В этой системе обозначено: U , ρ , \mathbf{v} – соответственно внутренняя энергия единицы массы сплошной среды, её плотность и вектор конвективной скорости, \mathbf{Q} – обобщенный поток энергии в среде, P – тензор механических напряжений, R_m – функция источников-стоков массы, \mathbf{f} – массовая плотность силы, $v_{ij} = \partial v^i / \partial x_j$ – тензор скорости деформации, $\{i, j\} = \{1, 2, 3\}$.

Система (1) – (3) неоднородна в газовой фазе из-за наличия объемных источников и стоков, которые возникают при фазовом переходе твердое тело – газ, т.е. в процессе разрушения [9]. Когда разрушение имеет место, то одновременно существуют газовая и твердотельная фазы. В этом случае, используя выражения для тензора напряжений в объеме газа $P_{ij} = -P\delta_{ij}$ [10], из (1) – (3) сразу можно получить систему уравнений газовой динамики [11].

Для твердого состояния вещества, учитывая то, что плотность в нем является постоянной величиной, а функция $R_m = 0$, система (1) – (3) при использовании законов Гука, может быть записанная так [8]:

$$\mathbf{v}_0 = 0. \quad (4)$$

$$\rho_0 \ddot{\mathbf{u}}_0 = \rho_0 \mathbf{f}_0 + (\nu + \mu) \nabla \operatorname{div} \mathbf{u}_0 + \mu \Delta \mathbf{u}_0, \quad (5)$$

$$\rho_0 \frac{dU_0}{dt} + \operatorname{div} \left(\mathbf{Q}_0 \right) - P_{ij}^{(0)} v_{ij}^{(0)} = 0. \quad (6)$$

Здесь индексом «0» обозначены твердотельные параметры, \mathbf{u}_0 – вектор упругих смещений в среде, \mathbf{f}_0 – массовая плотность объемной силы, ν и μ – упругие константы (коэффициенты Ламэ), ρ_0 – плотность в конденсированной среде, U_0 – внутренняя энергия единицы массы твердого вещества, $P_{ij}^{(0)}$ – тензор упругости, \mathbf{Q}_0 – энергетический поток, который прошел в объем твердой среды.

Используя определение внутренней энергии для температур, меньших температуры фазового перехода $U_0 = -\varphi_0 + C_v^{(0)} T_0$, определение общего потока: $\mathbf{Q}_0 = \mathbf{q}_0 - \lambda_0 \cdot \operatorname{grad} T_0$, а также пренебрегая слагаемыми $P_{ij}^{(0)} v_{ij}^{(0)}$ в уравнении для энергии (6), это уравнение можно свести к уравнению теплопроводности:

$$\rho_0 C_v^{(0)} \frac{\partial T_0}{\partial t} = \operatorname{div} (\lambda_0 \operatorname{grad} T_0) - \operatorname{div} \mathbf{q}_0, \quad (7)$$

где $\mathbf{q}_0(t, \mathbf{r})$ – внешний по отношению к веществу поток энергии, который действует в объеме твердой фазы; λ_0 – коэффициент теплопроводности твердого вещества; $T_0(t, \mathbf{r})$ – объемная температура твердой фазы; $C_v^{(0)}$ – массовая удельная теплоемкость. В (7) учтено, что удельная теплота фазового перехода $\varphi_0 = \text{const}$, а также то, что $dT_0/dt = \partial T_0/\partial t$, поскольку в твердой фазе конвективная скорость отсутствует.

Обобщенные граничные условия для задачи облучения твердого вещества мощным импульсом излучения

Система (1)–(3) является исходной системой дифференциальных уравнений, которые одновременно описывают обе фазы – твердую и газовую. Эта система определяет поведение вещества в экстремальном состоянии, и объединяет в себе две отдельные задачи: разрушающую и неразрушающую. Для обеспечения однозначности ее решений были сформулированы граничные условия на границе раздела двух сред.

Первое граничное условие – условие баланса потока массы через границу можно получить на основе уравнения непрерывности [11]:

$$\rho_s (\mathbf{v}_s \cdot \mathbf{n}) - \rho_{0s} (\mathbf{v}_{0s} \cdot \mathbf{n}) = 0. \quad (8)$$

Здесь ρ_s, \mathbf{v}_s – поверхностные значения плотности и конвективной скорости в газовой фазе, а $\rho_{0s}, \mathbf{v}_{0s}$ – плотность и скорость «натекания» твердой среды на поверхность раздела фаз. Если поверхность твердого вещества не разрушается под действием излучения, то газовые характеристики в уравнении (8) отсутствуют:

$$(\mathbf{v}_{0s} \cdot \mathbf{n}) = 0. \quad (9)$$

Следующее условие баланса потока импульса можно получить аналогично [8] на основе второго уравнения системы (1)–(3):

$$\rho_s v_s^i (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s) - P_{ij}^s n_j - \rho_{0s} v_{0s}^i (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_{0s}) + P_{ij}^{(0)s} n_j = 0. \quad (10)$$

Здесь $P_{ij}^s, P_{ij}^{(0)s}$ – поверхностные значения тензора напряжений в газовой и твердой фазах, v_s^i, v_{0s}^i – соответственно i -е компоненты векторов скорости газовой и конденсированной сред на границе их раздела. Тензор напряжений для газовой фазы в бесконечной близости к поверхности, где она практически плоская (иногда говорят «на поверхности»), можно представить, как $P_{ij}^s = -P_s \delta_{ij} - \frac{1}{c} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_s) n_i$, где первое слагаемое описывает упругую часть тензора напряжений для газов [10], а второе соответствует дополнительному световому давлению на поверхность вещества. Здесь δ_{ij} – символ Кронекера. При этом, с учетом равенства (8), условие (10) приобретает вид:

$$P_s n_i + \frac{1}{c} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_s) n_i + \rho_s (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s) \left(v_s^i - v_{0s}^i \right) + P_{ij}^{(0)s} n_j = 0, \quad (11)$$

где c – скорость света, \mathbf{q}_s – внешний поток излучения. Если при облучении происходит разрушение поверхности не происходит, то условие (11) упрощается за счет того, что все слагаемые, связанные с разрушением, отсутствуют. При этом оно характеризует упругий отклик конденсированной среды на механическое ударное действие потока \mathbf{q} :

$$\frac{1}{c}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_s) n_i + P_{ij}^{(0)s} n_j = 0. \quad (12)$$

Это граничное условие для уравнения (5), связанного с упругими процессами в твердой среде, в частности, с распространением звуковых и ударных волн, а также с упругим разрушением материала, если оно возникает при энергиях, меньших чем рассматриваемые здесь.

Условие баланса потока энергии формулируется из системы уравнений (1)–(3) на основе третьего уравнения системы – уравнения для энергии:

$$\begin{aligned} & (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s) \left(\rho_s U_s + \rho_s \sum_i \frac{(v_s^i - v_{0s}^i)^2}{2} - \rho_s U_{0s} + \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_{0s}} \right) P_s \right) + \\ & + \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_{0s}} \right) \frac{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s)}{c} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_s) + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{Q}_s) - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{Q}_{0s}) = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Параметры $\mathbf{Q}_s = \mathbf{q}_s + \mathbf{q}_s^T$, $\mathbf{Q}_{0s} = \mathbf{q}_{0s} + \mathbf{q}_{0s}^T$ – это обобщенные потоки энергии. Они содержат в себе, как внешний (световой) поток, так и тепловые потоки. При этом \mathbf{q}_s – часть светового потока, которая дошла до поверхности; \mathbf{q}_{0s} – поверхностный поток, который прошел в конденсированное вещество; величины $\mathbf{q}_{0s}^T \equiv -\lambda_{0s} (\text{grad } T_0)_s$ и $\mathbf{q}_s^T \equiv -\lambda_s (\text{grad } T)_s$ – определяют поверхностную часть теплового потока, соответственно, в твердой и газовой средах.

Для случая, когда разрушение поверхности не происходит, т.е. отсутствуют все газовые характеристики, будут сохраняться только последние два слагаемых уравнения (13). При этом, со стороны окружающей среды (отсутствующей газовой фазы), поток \mathbf{q}_s^T или очень мал за счет малости градиента температур и коэффициента теплопроводности [12], или точно равен нулю, если твердая фаза граничит с вакуумом. В зоне контакта двух фаз происходит образование поверхностного слоя, который сопровождается адсорбцией, поглощением энергии за счет возбуждения поверхностных процессов, натяжением, поверхностными электрическими потенциалами и другими специфическими поверхностными свойствами. Поверхностные слои являются неоднородными в масштабах десятков - сотен ангстрем и отличаются от объемных слоев физическими свойствами (плотность, вязкость, поляризуемость и др.), молекулярным строением и химическим составом (в многокомпонентных системах). В поверхностных слоях возможно смещение химического равновесия, изменение констант скоростей химических реакций, изменение валентности (например, Sm, Cr). Именно поэтому возникает необходимость учета потерь излучения при прохождении поверхностного слоя вещества. Все эти потери происходят за счет потока \mathbf{q}_s , и при переходе $\mathbf{q}_s \rightarrow \mathbf{q}_{0s}$ их можно характеризовать коэффициентом общих диссипативных потерь L_d ($0 \leq L_d \leq 1$). При этом, поток \mathbf{q}_{0s} , который проникает в твердую среду, можно связать с потоком \mathbf{q}_s , который достигает поверхности, соотношением:

$$\mathbf{q}_{0s} = (1 - L_d) \mathbf{q}_s. \quad (14)$$

Тепловой поток будет также испытывать изменения на поверхности вещества, например, за счет поверхностных атомных колебаний, радиационного излучения разогретой поверхности. Эти изменения удобно учесть в виде некоторого коэффициента потерь L , который также изменяется в пределах: $0 \leq L \leq 1$.

Таким образом, общее уравнение (13) баланса потока энергии на границе для процессов, которые сопровождаются разрушением имеет вид:

$$\begin{aligned} & (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s) \left(\rho_s U_s + \rho_s \frac{(v_s^i - v_{0s}^i)^2}{2} + \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_{0s}} \right) P_s - \rho_s U_{0s} \right) + \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_{0s}} \right) \frac{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s)}{c} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_s) + \\ & L_d (\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_s) - L \lambda_s (\mathbf{n} \cdot \text{grad } T)_s = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Следовательно, задача которая описывает процесс разрушения поверхности это задача (1)–(3) с граничными условиями (8), (11), (13).

Для неразрушающей задачи, с учетом того, что $\mathbf{q}_s^T \rightarrow 0$, (15) будет иметь вид:

$$L_d (\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_s) + \lambda_{0s} (\mathbf{n} \cdot \text{grad } T_0)_s = 0.$$

Это уравнение является граничным условием для уравнения (7).

Изменение поверхностного давления на поверхности вещества во время разрушающего действия излучения

Система (1)–(3) существенно-неоднородная и решение ее в трехмерном пространстве без каких-либо предположений в аналитическом виде получить невозможно. В данной работе предлагается модель разрушения поверхности на основе бародинамического представления. Т.е., все величины системы (1) – (3) будем считать функциями давления P , а именно $\rho \equiv \rho(P)$ и $\mathbf{v} \equiv \mathbf{v}(P)$. Следствием такого представления будут следующие соотношения:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = \mathbf{v}' \cdot \operatorname{grad} P; \quad \rho_t = \rho' P_t; \quad \mathbf{v}_t = \mathbf{v}' P_t; \quad (\mathbf{v} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v}' \cdot (\mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} P)$$

Здесь нижний индекс « t » при символе функции означает частную производную по времени, а штрих над символом функции означает производную по давлению P . Используя приведенные соотношения в системе уравнений (1) – (3), получим три уравнения одинаковой структуры. Из условия их совместимости можно получить функциональные соотношения для ρ , R_m , а с учетом граничного условия (11) и модуля вектора скорости:

$$\rho = aP^\eta, \quad R_m = -\frac{a \operatorname{div} \mathbf{Q}}{\rho^{2\sigma}}, \quad v = \frac{P^\sigma}{\sigma \sqrt{\kappa a}}, \quad (16)$$

где $\eta \equiv 1/\kappa$, $a \equiv \frac{\kappa - 1}{2\kappa}$, $\beta \equiv \frac{\kappa + 1}{2\kappa}$, a – постоянная интегрирования, κ – показатель политропы.

Использование этих соотношений позволяет свести систему (1) – (3) к одному динамическому уравнению для давления:

$$P_t - \frac{\alpha}{\gamma} \sqrt{\frac{\kappa}{a}} P^\sigma (\mathbf{n} \cdot \operatorname{grad} P) = -\kappa \operatorname{div} \mathbf{Q}. \quad (17)$$

С учетом граничного условия (15) и процедуры проектирования уравнения (17) на поверхность окончательно можно получить уравнение для давления на поверхности.

$$\begin{aligned} (P_s)_t = & -\frac{2a^{3/2} \kappa^2 \alpha \varphi_0}{\gamma^3 bL} P_s^{2\eta+\sigma} - \frac{2\sqrt{\alpha \kappa^3 \alpha^2}}{\gamma^5 bL} P_s^{2\beta+\sigma} + \frac{1}{N} e_q \vartheta(\tau - t) \frac{a \alpha \kappa^{3/2} q_{in} L d}{\gamma^2 bL} P_s^\eta + \\ & + \kappa a^{3/2} q_{in} P_s^{\eta+\beta} h(\omega) e_q \vartheta(\tau - t). \end{aligned} \quad (18)$$

В этом уравнении $b \equiv \frac{2R_g m_a^2}{3\pi \sqrt{\pi \gamma \mu_a d_a^2} k_B}$, m_a – масса атома испаряющегося вещества, k_B – постоянная Больцмана,

R_g – газовая постоянная; μ_a – молекулярная масса газа; d_a – эффективный диаметр молекулы. Множитель $e_q \equiv q_s / q_{in} \equiv f(x, y) \exp(-kS(x, y))$ определяет отношение величины потока, который достигает поверхности твердого вещества q_s , к исходному потоку q_{in} , причем $f(x, y)$ – функция, которая определяет поперечное сечение потока, S – функция формы кратера, $\alpha \equiv \kappa + 1$, $\gamma \equiv \kappa - 1$, $N \equiv \sqrt{1 + S_x^2 + S_y^2}$, где x, y – координаты. Множитель $h(\omega)$ определяет постоянную (независимую от давления и плотности) часть коэффициента поглощения, но этот множитель зависит от частоты излучения ω .

Исходя из того, что энергетическое воздействие, которое рассматривается в работе, является импульсным, в потоке \mathbf{q} введен зависимый только от времени множитель $\vartheta(\tau - t)$, где τ – эффективная длительность импульса, а $\vartheta(\tau - t)$ – ступенчатая функция Хэвисайда. Она равна единице, если $t \leq \tau$ и равна нулю, если $t > \tau$. Соотношение между потоками q_s и q_{in} было получено в работе [13] для случая, когда разрушение поверхности происходит без расплава.

Часто в работах, где исследуются облучение поверхности мощными импульсами, при которых происходит разрушение этой поверхности, считается, что ширина стимулирующего импульса значительно больше глубины кратера, который образуется под действием этого импульса, а сам импульс не имеет поперечной структуры. Такие предположения позволяют пренебрегать поперечной координатной зависимостью в уравнении (18). В этом случае $f(x, y) = 1$, $N = 1$, параметр e_q тоже теряет зависимость от поперечных координат.

Для одномерного случая зависимость изменения безразмерного давления Π от безразмерного времени θ , во время действия лазерного импульса (область 1) и по окончании действия импульса (область 2) показана на рисунке 1.

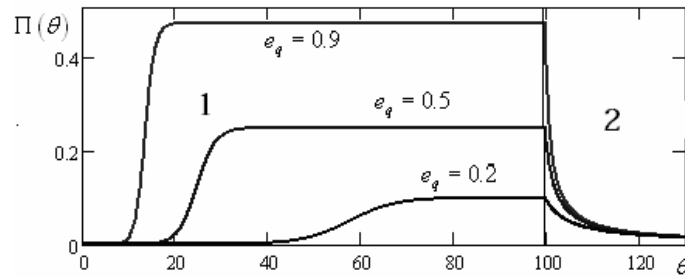


Рис. 1. Зависимости давления газа Π от времени θ на поверхности твердого вещества для различных значений параметра e_q для случая, когда разрушающая часть импульса $\theta = 100$ ($t = \theta \cdot 10^{-15}$ с.)

Безразмерное давление, представленное на графике, связано с размерным соотношением: $P = \Pi P_0$. Его можно оценить по данным работы [13]. По нашим оценкам для сапфира при интенсивностях потоков $q_{in} \approx 10^{14}$ Вт/см² можно получить $P_0 \approx 10$ ТПа, что соответствует экспериментальным данным [1].

Таким образом, в работе рассмотрена динамика давления при разрушающей микрообработке поверхности вещества интенсивным импульсом излучения. С энергетической точки зрения импульсный режим работы лазера для микрообработки намного лучше, чем непрерывный [13]. Как известно [13], главный фактор, ограничивающий качество микрообработки – появление жидкой фазы и ее неполное удаление в процессе обработки. Это наиболее неблагоприятный фактор, который ведет к ухудшению качества сверления отверстий. По нашим исследованиям [12] микрообработка твердых материалов, при которых в области обработки не образуется жидкая фаза (расплав) возможна в том случае, когда интенсивность лазерного излучения определяется условием $q_{in} \geq \frac{R_g T_c \rho_0 c}{\mu} \cdot \frac{1}{1-R^2}$, где

R_g – универсальная газовая постоянная, T_c – критическая температура, μ – молярная масса испаренного с поверхности газа, R – коэффициент отражения света.

В работе показано, что динамика приповерхностного давления в общем случае определяется уравнением (18). В актуальном с технологической точки зрения приближении, когда показатель политропы K стремится к единице, это уравнение упрощается и позволяет проследить динамику приповерхностного давления для одномерного случая. Также показано, что на динамику давления влияет увеличение плазменного факела, и это влияние отслеживается параметром e_q . Более детальный учет факторов, сопутствующих лазерной обработке материалов, а именно температурные изменения на поверхности, взаимодействие излучения с испарившимся веществом, учет влияния динамики формирования кратера позволит теоретически прогнозировать необходимые режимы лазерной обработки для конкретных материалов. Такие исследования могут быть полезны в машиностроении при маркировке изделий, раскрое металлов, контролируемого изменения свойств и структуры поверхности вещества.

Список использованной литературы

1. S. Juodkazis, K. Nishimura, S. Tanaka, et al., Phys. Rev. Lett. 96, 166101 (2006)
2. Tadano J., Kumakura H., Ito Y., Applied Physics A. 79 (4–6), (2004), p. 1031.
3. Savel'ev-Trofimov A.B., Abstract of the Doctoral Thesis (Phys.-Math.), Moscow:(2003) (in Russian).
4. Itina T.E., Vidal F., Delaporte Ph., Sentis M., Applied Physics A, 79 (4–6), (2004), p. 1089.
5. Kelly R, Miotello A., Applied surface science, 96-98, (1996), p. 205-215.
6. Henriksson K., Master's Thesis: Helsinki, (2001).
7. Gakovi B., Trtica M., Panjan P., et al Appl. Phys. A, 79 (4–6), (2004), p. 1353.
8. Suprun A.D., Shmeleva L.V., in Scientific notes, Proceedings of the M.P. Dragomanov National Pedagogical University (Kyiv, 2002), pp. 199 – 203 (in Ukrainian).
9. L.V. Shmeleva, S.M.Yezhov, A.D. Suprun, S.Ya. Shevchenko, Ukr. J. Phys. V.51. N 8, 2006 – p.788 – 794.
10. Landau L.D., Lifshits E.M. Theoretical Physics. Teoriya Uprugosti. Moscow: Nauka, 248p. (1987) (in Russian).
11. Landau L.D., Lifshits E.M. Theoretical Physics. Gidrodinamika. Moscow: Nauka, 736p. (1986) (in Russian).
12. Low D K Y, Li L. Corfe A G., Proc Instn Mech Engrs, 214 B, (2000), p. 521.
13. L.V. Shmeleva, S.M.Yezhov, A.D. Suprun, S.Ya. Shevchenko. Ukr. J. Phys. V 51, № 8. p.788, (2006).
14. В.П. Вейко. Лазерная микрообработка. С.-Петербург (2005)
15. L.V. Shmeleva, A.D. Suprun, S.M.Yezhov. Ukr. J. Phys., V 52, № 1. p.46, (2007).