

شبیه سازی برهمکنش لیزر پالسی نئودیمیم یاگ با فلز روی در محیط آب مقطر و تاثیر سپر پلاسمایی در این فرایند

محمد رسول خداوردی*، الناز ایرانی

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

چکیده: کندوسوز لیزری در محیط مایع یکی از روش های ایمن و پاک برای تولید انواع نانوذرات بسیار خالص در محلول های متنوع است. در واقع برای کنترل نانوساختارهای منتج باید برهمکنش لیزر با نمونه فلزی مدیریت شود، بدین منظور بایستی فهم درست و کاملی از فرایند برهمکنش داشته باشیم. لذا در این مقاله به بررسی عمق کندگی و توزیع دمایی ایجاد شده در عمق و سطح هدف و تاثیر سپر پلاسمایی در فرایند پرداخته شده است. بدین منظور در محاسبات از لیزر نئودیمیم یاگ با طول موج ۱۰۶۴ نانومتر و پهنای پالس ۹ نانوثانیه استفاده شده است. همچنین شبیه سازی فرایند به کمک نرم افزار کامسول با روش المان محدود و با در نظر گرفتن سپر پلاسمایی و تاثیر آب مقطر به ارتفاع ۱ سانتی متر به عنوان محیط پیرامونی انجام شده است.

کلید واژگان: کندوسوز لیزری؛ فلز روی؛ نرم افزار کامسول؛ سپر پلاسمایی

Simulation of Nd-YAG pulse laser interaction with zinc metal in distilled water environment and the effect of plasma shielding in this process

Mohammad Rasoul Khodaverdi, Elnaz Irani

Dept. of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran.

Abstract- Laser ablation in liquid medium is a safe and clean method for producing very pure nanoparticles in various solutions. Indeed, for controlling the synthesized nanostructures, the interaction of the laser with the metal sample must be managed; hence we must have a correct and complete understanding of the interaction process. So in this paper, the depth of ablation, temperature distribution created in the depth and surface of the target and the effect of plasma shield on this process are investigated. In our calculation, a Nd:YAG laser with a wavelength of 1064 nm and a pulse width of 9 nanoseconds has been used. Also, the simulated calculation of this process has been performed using the Comsol software and finite element method. In the process simulation, the plasma shield and the effect of distilled water to a height of 1 cm as the surrounding environment are also considered.

Keywords: laser ablation, zinc metal, comsol software, plasma shielding

* m.khodaverdi@modares.ac.ir

۱- مقدمه

از خصوصیات مهم روش کندوسوز لیزری پالسی در مقایسه با دیگر روش‌ها می‌توان به تولید نانو ذرات بسیار خالص و فارغ از محصولات جانبی که بسیار سریع و به صورت مستقیم حاصل می‌شوند، اشاره کرد. فرایند کندوسوز لیزری به خواص فیزیکی ماده کندوسوز شده، پارامترهای لیزر از جمله انرژی پالس، پهنای پالس، طول موج لیزر، سطح لکه لیزر و نرخ تکرار پالس و همچنین شرایط محیطی شامل نوع محلول، نوع حلال یا گاز و دما و فشار سیستم بستگی دارد [۱ و ۲]. در این پژوهش تلاش می‌شود تا با ارائه یک مدل دقیق تر و با در نظر گرفتن تاثیر سپر پلاسمایی و محیط آب مقطر اطلاعات مفیدی در رابطه با عمق کندگی و توزیع دمایی ایجاد شده در عمق و سطح هدف توسط لیزر نئودیمیم یاک با طول موج ۱۰۶۴ نانومتر و پهنای پالس ۹ نانو ثانیه بدست آورد.

۲- مدل مسئله

برای مدل سازی در این مقاله از مدل انتقال حرارت دو سیالی استفاده شده است. معادلات انتقال حرارت در یک مختصات یک بعدی بر پایه روش المان محدود برای هدف فلز روی و محیط آب مقطر به عنوان محیط پیرامونی حل شده است. از آنجا که مقدار عمق نفوذ لیزر در هدف بسیار کوچکتر از قطر پرتوی لیزر است، انتقال حرارت در هدف، می‌تواند به صورت یک بعدی از رابطه زیر محاسبه شود [۳].

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} - u_s \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \nabla \cdot (K \nabla T) + q \quad (1)$$

در رابطه‌ی بالا T دمای هدف، x عمق هدف نسبت به سطح، t زمان و q عبارت مربوط به منبع گرما (لیزر) هستند. همچنین c_p ، ρ و K به ترتیب با عنوان ظرفیت گرمایی، رسانندگی حرارتی، چگالی و سرعت تبخیر سطح هدف شناخته می‌شوند. عمل حذف مواد معمولاً به وسیله تبخیر و انفجار فازی رخ می‌دهد و می‌توان سرعت کندگی به وسیله تبخیر را به کمک معادله‌ی هرتز نادسن محاسبه کرد [۴ و ۵]. هنگامی که مولکول‌های بخار سطح هدف را ترک می‌کنند، توزیع سرعت در یک لایه نازک از توزیع غیر تعادلی به توزیع تعادلی تبدیل می‌شود. از آنجا که ضخامت لایه نادسن تنها چند نانومتر است، در مدل حرارتی می‌تواند به عنوان ناپیوستگی رفتار کند. دما، چگالی و سایر پارامترهای ماده به طرف دیگر لایه نادسن پخش خواهد کرد و منجر به ایجاد تغییر در مقادیر آنها در مرز خواهد شد [۶ و ۷]. جذب ستون پلاسمایی در فرایند کندوسوز لیزری توسط سه فرایند جذب برم اشترلانگ معکوس، جذب فوتوایونیزاسیون و جذب مای صورت می‌گیرد که در این بین جذب برم اشترلانگ معکوس برای طول موج ۱۰۶۴ نانومتر بیشترین تاثیر را در تضعیف شدت پرتوی رسیده به سطح هدف دارد. رابطه‌ی ضریب جذب برم اشترلانگ معکوس با عبارت زیر تعریف می‌شود [۳ و ۷].

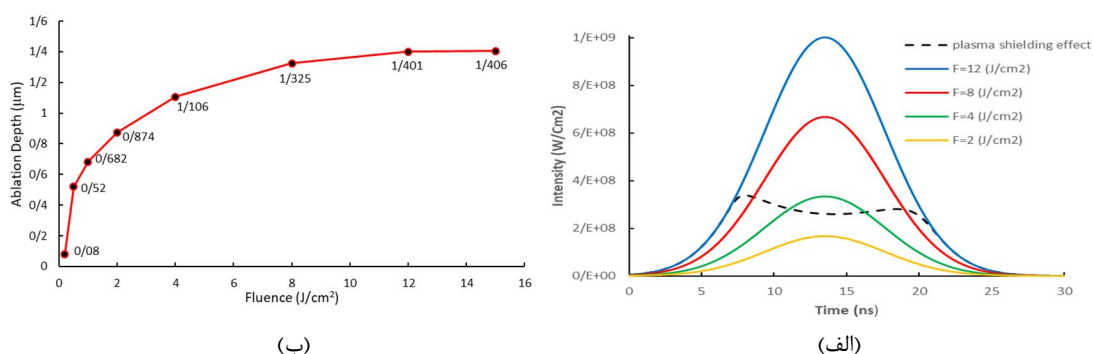
$$\alpha_{IB e-i} = \left(\frac{2\pi}{3m_e^2 k_B} \right)^{1/2} \left(\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^3 \frac{4n_e Z_i^2 n_i \lambda^3}{3hc^4 T^{1/2}} (1 - \exp(-\frac{hc/\lambda}{k_B T})) \quad (2)$$

در رابطه‌ی بالا c سرعت نور، λ طول موج پرتوی فرودی، h ثابت پلانک، k_B ثابت بولتزمن، n_e چگالی تعداد الکترون‌های آزاد، n_i چگالی تعداد یون، Z_i مرتبه ی یونش، ϵ_0 ضریب گذردهی خلاء، m_e جرم الکترون، e_0 بار الکترون و T دمای پلازما هستند. برای مدل‌سازی در این پژوهش تنها مرتبه اول یونش در نظر گرفته شده است و برای بدست آوردن چگالی الکترون‌های آزاد موجود در بخارات (n_e) از معادلات ساها-ایگرت استفاده شده است [۸]. برای تعیین ضریب جذب و ضریب بازتاب هدف برای طول موج ۱۰۶۴ نانومتر از ضریب شکست کامل فلز روی با مقدار $4.5994 + i 3.8730$ استفاده شده است [۹]. در مدل سازی نمونه مش‌بندی با دقت ۰/۰۲۲ میکرومتر صورت گرفته است که این مقدار با توجه به عمق نفوذ لیزر در فلز روی تعیین شده است.

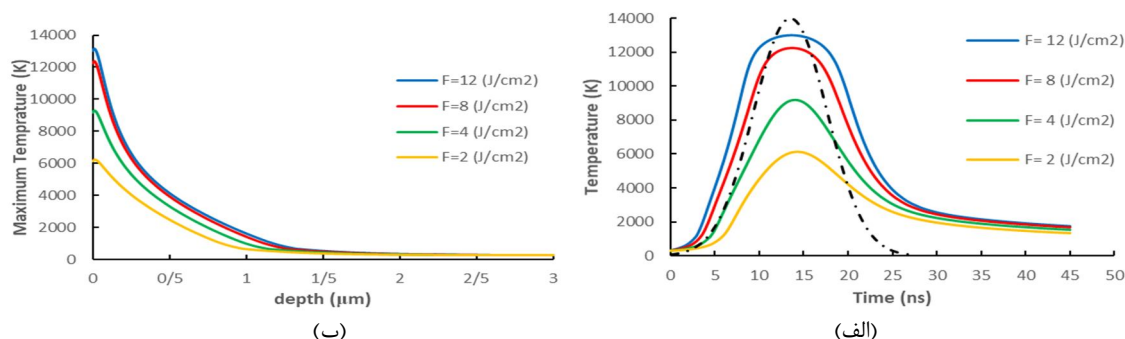
۳- نتایج شبیه سازی

شکل ۱ قسمت (الف) تاثیر سپر پلاسمایی بر توزیع شدت فرودی پرتوی لیزر، در شاریدگی‌های مختلف را نشان می‌دهد. در این شکل سپر پلاسمایی ایجاد شده بر سطح فلز روی، مانع رسیدن بیش از نیمی از انرژی فرودی لیزر شده است و تاثیر قابل توجه خود را در

دماهای بالا نشان می‌دهد. بطوری که در شدت‌های فرودی پایین‌تر از $3 \times 10^8 \text{ W/cm}^2$ تاثیر چندانی بر شدت رسیده به هدف ندارد. شکل (ب) عمق کندگی فلز روی را تحت تاثیر سپر پلاسمایی در شاریدگی‌های مختلف نشان می‌دهد. در این شکل شاریدگی‌های ۰/۲، ۰/۵، ۱، ۲، ۴، ۸، ۱۲، ۱۵ ژول بر سانتی متر مربع مورد بررسی قرار گرفته است. بر این اساس تاثیر حضور سپر پلاسمایی در این فرایند باعث شده است تا با افزایش انرژی تا 12 J/cm^2 میزان عمق کندگی به یک مقدار ثابت میل کند و افزایش بیشتر دیگر تاثیر چندانی در افزایش عمق کندگی به ازای تک پالس نداشته باشد. در شکل ۲ قسمت (الف) نمودار تغییرات دمایی سطح هدف فلز روی، در زمان و شاریدگی‌های مختلف نشان داده شده است. طبق این شکل در زمان تقریباً ۱۴ نانوثانیه دمای سطح هدف به بیشترین مقدار خود رسیده است و زمان آستانه کندگی برای شاریدگی‌های ۰/۲، ۴، ۸ و ۱۲ ژول بر سانتی متر مربع را به ترتیب برابر با ۰/۴، ۰/۵، ۳/۵ و ۳/۰ نانوثانیه نشان می‌دهد. همچنین بیشینه دمای سطح هدف در این شاریدگی‌ها به ترتیب برابر با ۶۱۳۳، ۹۱۹۲، ۱۲۲۴۶ و ۱۲۹۹۸ کلوین نمایش داده شده است. همچنین قسمت (ب) نمودار توزیع بیشینه دمایی در عمق هدف فلز روی را برای شاریدگی‌های مختلف نشان می‌دهد.



شکل ۱- (الف) نمودار توزیع شدت لیزر در شاریدگی‌های مختلف، (ب) نمودار تاثیر سپر پلاسمایی در میزان عمق کندگی فلز روی.



شکل ۲- (الف) نمودار تحول زمانی دمای سطح هدف، (ب) نمودار توزیع دمایی در زمان ۱۴ نانوثانیه در عمق فلز روی.

۴- جمع بندی

نتایج بدست آمده از تاثیر سپر پلاسمایی در میزان عمق کندگی به خوبی با نتایج تجربی سازگار است و بهینه انرژی اعمالی برای افزایش کندگی را پیشبینی می‌کند.

مراجع

1. Amendola, Vincenzo, et al. **Physical Chemistry Chemical Physics** 15.9 (2013): 3027-3046.
2. Xiao, J., et al. **Progress in Materials Science** 87 (2017): 140-220.
3. Marla, Deepak, et al. **Applied Physics A** 116.1 (2014): 273-285.
4. Stafe, Mihai, et al. **Applied surface science** 253.15 (2007): 6353-6358.
5. Marla, Deepak, et al. **Journal of Applied Physics** 109.2 (2011): 2.
6. Yan, Zhaoxuan, et al. **Optics Communications** 453 (2019): 124384.
7. Rozman, Robert, et al. **Applied Surface Science** 254.11 (2008): 3295-3305.
8. Bogaerts, Annemie, et al. **Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy** 58.11 (2003): 1867-1893.
9. Querry, Marvin R. Optical constants of minerals and other materials from the millimeter to the ultraviolet. Chemical Research, Development & Engineering Center, US Army Armament Munitions Chemical Command, 1987.