

P11-2023-51

И. В. Амирханов, И. Сархатов \*,  
З. К. Тухлиев, Х. Гафуров<sup>1</sup>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ  
МАТЕРИАЛОВ В РАМКАХ МОДЕЛИ  
ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

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

---

<sup>1</sup> Худжандский государственный университет им. академика Б. Гафурова, Худжанд, Таджикистан

\* E-mail: [ibrohim@jinr.ru](mailto:ibrohim@jinr.ru)

Моделирование лазерной абляции материалов  
в рамках модели термического пика

В предыдущих работах в рамках обычной модели уравнения теплопроводности было проведено численное моделирование лазерной абляции материалов, возникающей под действием ультракоротких лазерных импульсов в полуограниченных образцах и образцах конечной толщины.

В настоящей работе проведено аналогичное моделирование для полуограниченных образцов в рамках двухтемпературной модели термического пика, которая состоит из двух взаимосвязанных уравнений теплопроводности для электронного газа и кристаллической решетки. Действие лазера учтено через функции источника в уравнении теплопроводности электронного газа с заданными координатной и временной зависимостями источника лазера. Проведен сравнительный анализ полученных результатов в рамках двух моделей.

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

Simulation of Laser Ablation of Materials  
within the Thermal Spike Model

In previous works, numerical simulations of laser ablation of materials arising under the action of ultrashort laser pulses in semi-bounded samples and samples of finite thickness were carried out within the framework of the thermal conductivity equation.

In this paper, a similar simulation is carried out for semi-bounded samples in the framework of a two-temperature thermal spike model, which consists of two interrelated heat conduction equations for an electron gas and a crystal lattice. The laser action is taken into account through the source functions in the equation of thermal conductivity of the electron gas, setting the coordinate and time dependences of the laser source. A comparative analysis of the obtained results of the two models is made.

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

## ВВЕДЕНИЕ

В последние годы импульсная лазерная абляция [1–16] (любой процесс лазерно стимулированного удаления вещества, включая эмиссию электронов) различных материалов привлекает все больший интерес с точки зрения фундаментальных исследований процессов в веществе в экстремальных условиях сверхбыстрого подвода энергии: речь идет о построении новой физической теории, описывающей сильнонелинейные эффекты.

Для детального анализа процессов в эксперименте требуется измерять различные параметры, которые характеризуют процессы абляции с пико- и фемтосекундным временным разрешением, что само по себе является достаточно сложной задачей. Поэтому задача математического моделирования физических явлений в этой области становится чрезвычайно актуальной.

### 1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Моделирование лазерной абляции материалов проведено в рамках модели термического пика, которая состоит из уравнений (1), (2) с начальными и граничными условиями (3):

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = C_e v_\varphi \frac{\partial T_e}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - \gamma (T_e - T_i) + A(z, t), \quad (1)$$
$$0 < z < z_{\max},$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = C_i v_\varphi \frac{\partial T_i}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) + \gamma (T_e - T_i); \quad (2)$$

$$A(z, t) = f_1(z) f_2(t), \quad f_1(z) = A_s \beta e^{-\beta z},$$

$$f_2(t) = I_0 e^{-t/t_1} t/t_1, \quad A_s = 1 - R(T_{is});$$

$$\Phi = \int_0^\infty f_2(t) dt = I_0 t_1, \quad v_\varphi = v_0 \exp \left( -\frac{T_a}{T_{is}} \right),$$

$$v_\varphi = \frac{dh}{dt}, \quad T_{as} = T_a(0, t), \quad a = e, i;$$

$$T_a(z, 0) = T_0, \quad \lambda_a \frac{\partial T_a(z, t)}{\partial x} \Big|_{z=0} = Q_a, \quad h(0) = 0, \quad (3)$$

$$T_a(z_{\max}, t) = T_0, \quad Q_e = b_R K_B T_{es}^3 \exp\left(-\frac{T_u}{T_{es}}\right) / q_e, \quad Q_i = L_{ev} \rho v_\varphi (T_{is}).$$

Здесь  $T_e, T_i$  — температурные поля электронного газа и кристаллической решетки облучаемого образца,  $C_e, C_i, \lambda_e, \lambda_i$  — соответственно удельные теплоемкости и коэффициенты теплопроводности электронного газа и кристаллической решетки;  $\gamma$  — коэффициент электрон-фононного взаимодействия электронной подсистемы с решеткой;  $A(z, t)$  — функция источника, которая определяет плотность мощности тепловыделения в точке с координатой  $z$  в момент времени  $t$ ;  $\rho, v_\varphi$  — плотность и скорость абляции материала;  $T_a$  — энергия активации;  $T_u$  — работа выхода;  $T_0$  — начальная температура образца;  $b_R$  — постоянная Ричардсона;  $K_B$  — постоянная Больцмана;  $q_e$  — заряд электрона;  $h(t)$  — толщина удаленного слоя в момент времени  $t$ ;  $L_{ev}$  — удельная теплота сублимации;  $\Phi, I_0, \beta$  — соответственно поток энергии, интенсивность и коэффициент поглощения лазера;  $A_s$  — поглощательная способность.

При численном моделировании уравнения (1), (2) с начальными и граничными условиями (3) удобно перейти от размерных переменных и величин к безразмерным. Переход от размерных переменных и величин к безразмерным осуществляется следующим образом:

$$\bar{z} = \frac{z}{\Delta z}, \quad \bar{t} = \frac{t}{\Delta t}, \quad \bar{\beta} = \beta \Delta z, \quad \bar{v}_\varphi = \frac{v_\varphi \Delta t}{\Delta z}, \quad \bar{T}_a = \frac{T_a}{T_0}, \quad \bar{\gamma}_a = \frac{\gamma \Delta t}{C_a};$$

$$k_a = \frac{\lambda_a \Delta t}{C_a \Delta z^2}, \quad \bar{Q}_a = \frac{Q_a \Delta z}{\lambda_a T_0}, \quad \bar{A}(\bar{z}, \bar{t}) = \frac{A(z, t) \Delta t}{C_e T_0}, \quad a = e, i.$$

При этом исходная постановка задачи в безразмерных переменных и величинах принимает следующий вид:

$$\frac{\partial \bar{T}_e}{\partial \bar{t}} = v_\varphi \frac{\partial \bar{T}_e}{\partial \bar{z}} + k_e \frac{\partial^2 \bar{T}_e}{\partial \bar{z}^2} + \gamma_e (\bar{T}_e - \bar{T}_i) + \bar{A}(\bar{z}, \bar{t}), \quad (4)$$

$$\frac{\partial \bar{T}_i}{\partial \bar{t}} = v_\varphi \frac{\partial \bar{T}_i}{\partial \bar{z}} + k_i \frac{\partial^2 \bar{T}_i}{\partial \bar{z}^2} + \gamma_i (\bar{T}_e - \bar{T}_i), \quad (5)$$

$$\bar{T}_a(\bar{z}, 0) = 1, \quad \frac{\partial \bar{T}_a(\bar{z}, \bar{t})}{\partial \bar{z}} \Big|_{\bar{z}=0} = \bar{Q}_a, \quad (6)$$

$$\bar{T}_a(\bar{z}_{\max}, \bar{t}) = 1, \quad a = e, i.$$

Здесь безразмерные функции, присутствовавшие в постановке задачи, принимают следующий вид:

$$\bar{A}(\bar{z}, \bar{t}) = A_0 \bar{f}_1(\bar{z}) \bar{f}_2(\bar{t}), \quad A_0 = \frac{\Phi [1 - R(\bar{T}_{is})] \beta}{C_e T_0 \bar{t}_1}, \quad \bar{f}_1(\bar{z}) = e^{-\bar{\beta} \bar{z}},$$

$$\begin{aligned}\bar{f}_2(\bar{t}) &= \frac{\bar{t}}{\bar{t}_1} e^{(-\bar{t}/\bar{t}_1)}, \quad \bar{Q}_e = A_1 T_{es}^3 \exp\left(\frac{-\bar{T}_u}{\bar{T}_{es}}\right), \\ \bar{Q}_i &= A_2 \bar{v}_\varphi, \quad \bar{v}_\varphi = \bar{v}_0 \exp\left(-\frac{\bar{T}_a}{\bar{T}_{is}}\right), \\ A_1 &= \frac{b_R K_B T_0^2 \Delta z}{\lambda_e q_e}, \quad A_2 = \frac{\rho L_{ev} \Delta z^2}{\lambda_i T_0 \Delta t}, \\ \bar{T}_a &= \frac{T_a}{T_0}, \quad \bar{T}_u = \frac{T_u}{T_0}, \quad \bar{T}_{is} = \frac{T_{is}}{T_0}, \quad \bar{T}_{ie} = \frac{T_{ie}}{T_0}, \quad \bar{v}_0 = \frac{v_0 \Delta t}{\Delta z}.\end{aligned}$$

## 2. ОБСУЖДЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Численные моделирования проведены для материала алюминия с применением метода конечных разностей явной схемы. Аналогичная задача решалась нами для другого материала в рамках модели уравнения теплопроводности в работах [17–20]. Параметры материала образца и источника взяты из работы [2]:

$$\begin{aligned}C_e &= 40350 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{м}^3}, \quad C_i = 2,43 \cdot 10^6 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{м}^3}, \\ \lambda_e &= 237 \frac{\text{Вт}}{\text{К} \cdot \text{м}}, \quad \lambda_i = 100 \frac{\text{Вт}}{\text{К} \cdot \text{м}}, \\ \beta &= 1,516 \cdot 10^{-7} \text{ м}, \quad \gamma = 4,05 \cdot 10^{15} \frac{\text{Вт}}{\text{К} \cdot \text{м}^3}, \quad \rho = 2688 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \\ L_{ev} &= 1,089 \cdot 10^7 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}, \quad v_0 = 4140 \frac{\text{м}}{\text{с}}, \quad T_a = 35240 \text{ К}, \quad T_u = 39400 \text{ К}, \\ T_0 &= 300 \text{ К}, \quad b_r = 120,4 \cdot 10^4 \frac{\text{А}}{\text{К}^2 \cdot \text{м}^2}, \quad K_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}}, \\ \Phi &= 1500 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}, \quad t_1 = 1 \text{ пс}, \quad A_s = 1, \quad q_e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}.\end{aligned}$$

Масштабы обезразмеривания по координате и времени выбраны следующие:

$$\Delta z = z_0 = 10^{-7} \text{ м}, \quad \Delta t = t_0 = 10^{-12} \text{ с}.$$

Для сравнительного анализа провели моделирование лазерной абляции материалов в рамках обычной модели уравнения теплопроводности для кристаллической решетки и получили динамику профилей температуры кристаллической решетки без учета и с учетом испарения кристаллической решетки, динамику температуры кристаллической решетки на поверхности образца, скорости абляции, толщины удаленного слоя, которые приведены на рис. 1.

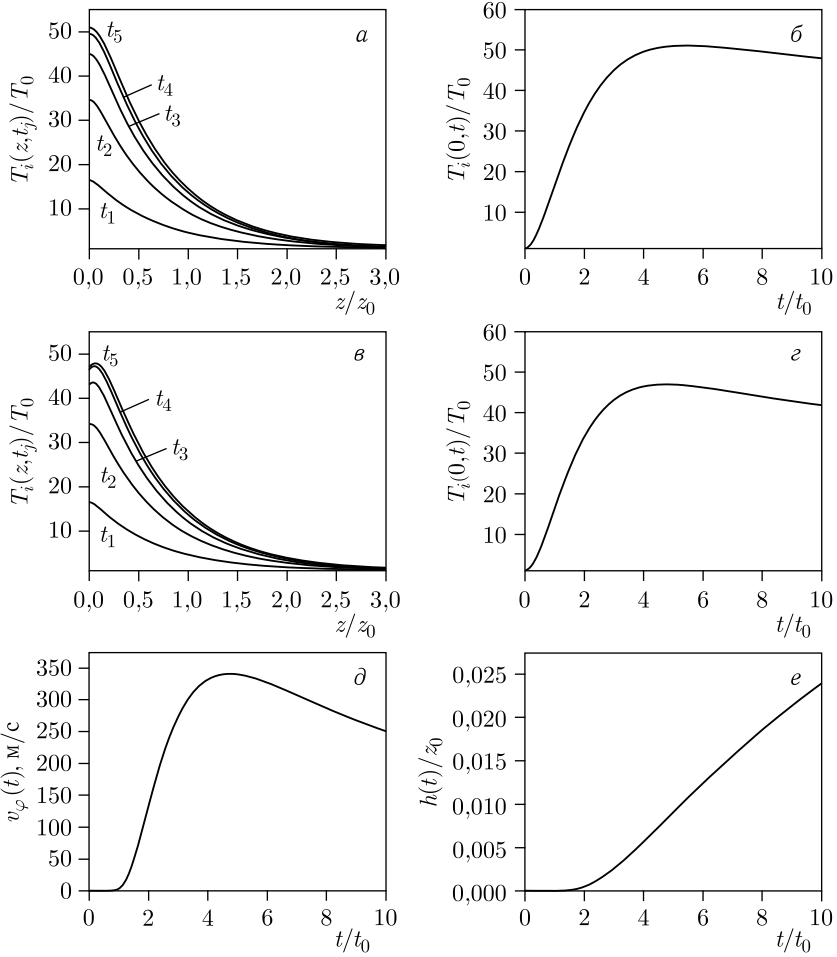


Рис. 1. Профили температуры кристаллической решетки  $T_i(z, t)$  ( $T_0 = 300$  К,  $z_0 = 10^{-7}$  м) при временах  $t_j = j t_0$  ( $j = 1, 2, \dots, 5$ ,  $t_0 = 10^{-12}$  с) без учета и с учетом испарения кристаллической решетки и ее динамика на поверхности образца, а также динамика толщины удаленного слоя, полученная в рамках обычной модели уравнения теплопроводности для кристаллической решетки

Сравнительный анализ результатов (рис. 1, 2) показывает, что электронный газ вносит существенный вклад в динамику температуры кристаллической решетки и динамику толщины удаленного слоя из-за испарения кристаллической решетки. В момент  $t = 10 t_0$  температура кристаллической решетки на поверхности образца  $z = 0$ , полученная в рамках уравнения теплопроводности для кристаллической решетки, почти в 15 раз больше, чем найденная в рамках модели термического пика. В рамках обычной

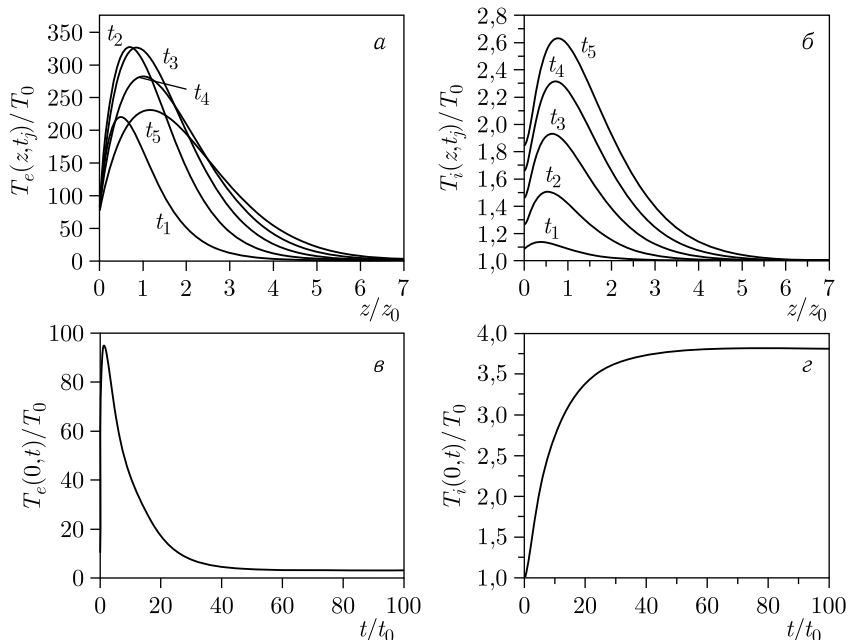


Рис. 2. Профили температур электронного газа  $T_e(z, t)$  и кристаллической решетки  $T_i(z, t)$  ( $T_0 = 300$  К,  $z_0 = 10^{-7}$  м) при временах  $t_j = j t_0$  ( $j = 1, 2, \dots, 5$ ,  $t_0 = 10^{-12}$  с) и их динамика на поверхности образца, полученная в рамках модели термического пика, с учетом эмиссии электронов и испарения кристаллической решетки

модели уравнения теплопроводности испарение материала возникает почти сразу после включения источника, в то время как в модели термического пика испарение материала возникает значительно позже и скорость абляции очень мала, т. е. испарение происходит очень медленно.

Интересно также проследить, как влияет эмиссия электронов на тепловые процессы в рамках модели термического пика. В результатах, которые приведены на рис. 2, учтен вклад эмиссии электронов. Чтобы выявить этот вклад, сравним результаты с учетом и без учета эмиссии электронов в рамках модели термического пика. Для этого в данной модели полагаем  $Q_e = 0$ .

На рис. 3 приведены аналогичные рис. 1 результаты, только без учета эмиссии электронов. Как видно, эмиссия электронов существенно влияет на тепловые процессы, возникающие в материалах при воздействии импульсных лазеров высокой интенсивности. При учете эмиссии электронов в рамках модели термического пика электронный газ почти в 3 раза, а кристаллическая решетка в 2 раза слабее греются. На границе  $z = 0$  при учете эмиссии электронов возникает перегрев обеих систем, а в случае отсутствия эмиссии этот эффект в данном интервале времени отсутствует.

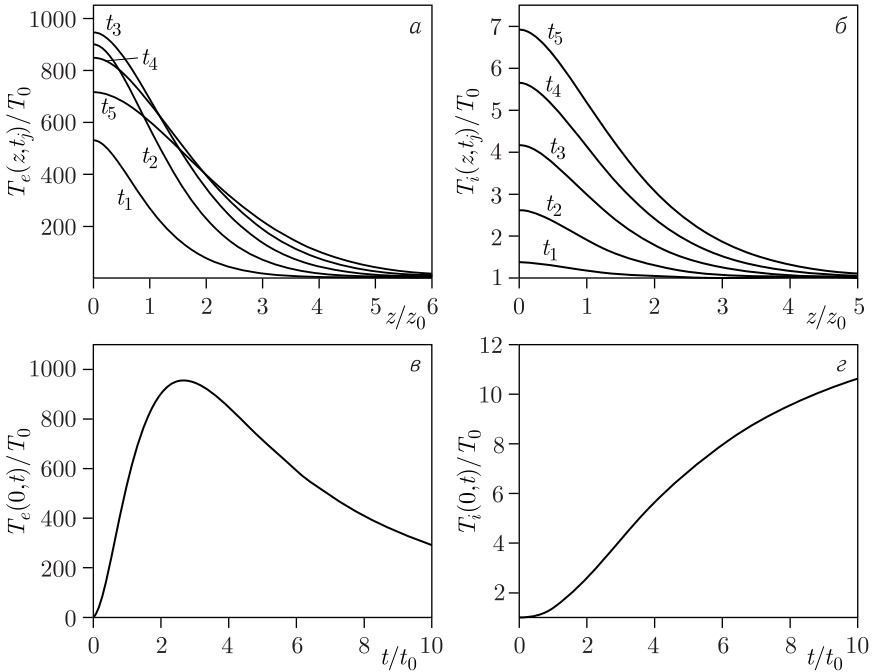


Рис. 3. Профили температур электронного газа  $T_e(z, t)$  и кристаллической решетки  $T_i(z, t)$  ( $T_0 = 300$  К,  $z_0 = 10^{-7}$  м) при временах  $t_j = 0,8j t_0$  ( $j = 1, 2, \dots, 5$ ,  $t_0 = 10^{-12}$  с) и их динамика на поверхности образца, полученная в рамках модели термического пика, без учета эмиссии электронов и испарения кристаллической решетки

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сравнительный анализ результатов абляции материалов в рамках модели термического пика и обычной модели уравнения теплопроводности показывает, что в модели термического пика абляция материала происходит значительно позже и кристаллическая решетка нагревается слабее. Потеря энергии электронного газа из-за эмиссии электронов является главной причиной этому.

**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. 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.



2. Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. // УФН. 2002. Т.172, №3. С.301; <https://doi.org/10.3367/UFN.0172.200203b.0301>.
3. 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.
4. Захаров Л.А., Булгакова Н.М. // Вестн. НГУ. Сер. «Физика». 2010. Т.5, вып.1. С.37; doi: 10.54362/1818-7919-2010-5-1-37-47.
5. Bauerle D. Laser Processing and Chemistry. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2000; doi: 10.1007/978-3-662-04074-4.
6. Miotello A., Kelly R. // Appl. Phys. A. 1999. V.69. P.S69; <https://doi.org/10.1007/s003399900296>.
7. Bulgakova N.M., Bulgakov A.V., Bourakov I.M., Bulgakova N.A. // Appl. Surf. Sci. 2002. V.197–198. P.96; doi: 10.1016/S0169-4332(02)00310-0.
8. Pound M.W., Kane J.O., Ryutov D.D., Remington B.A. et al. // Astrophys. Space Sci. 2007. V.307. P.187.
9. Формов В.Е. // УФН. 2007. Т.177, №4. С.347; <https://doi.org/10.3367/UFN.0177.200704c.0347>.
10. Meijer J., Du K., Gillner A., Hoffmann D., Masuzawa T., Ostendorf A., Poprawe R., Schulz W. // Ann. CIRP. Uetendorf: Edition Colibri Ltd., 2002. P.531–550; [https://doi.org/10.1016/S0007-8506\(07\)61699-0](https://doi.org/10.1016/S0007-8506(07)61699-0).
11. Zoubir A., Shah L., Richardson K., Richardson M. // Appl. Phys. A. 2003. V.77. P.311–315; <https://doi.org/10.1007/s00339-003-2121-9>.
12. Kuznetsov A.I., Koch J., Chichkov B.N. // Appl. Phys. A. 2009. V.94. P.221–230; <https://doi.org/10.1007/s00339-008-4859-6>.
13. Bulgakova N.M., Panchenko A.N., Tel'minov A.E., Shulepov M.A. // Appl. Phys. A. 2010. V.98. P.393; doi: 10.1007/s00339-009-5395-8.
14. Dijkkamp D., Gozdz A.S., Venkate-san T., Wu X.D. // Phys. Rev. Lett. 1987. V.58. P.2142; <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.2142>.
15. Burns F.C., Cain S.R. // J. Phys. D: Appl. Phys. 1996. V.29. P.1349; doi: 10.1088/0022-3727/29/5/034.
16. Fahler S., Krebs H.U. // Appl. Surf. Sci. 1996. V.96–98. P.61; [https://doi.org/10.1016/0169-4332\(95\)00466-1](https://doi.org/10.1016/0169-4332(95)00466-1).
17. Amirkhanov I.V., Sarker N.R., Sarkhadov I. // Discrete Contin. Models Appl. Comput. Sci. 2020. V.28, No.4. P.398; <https://doi.org/10.22363/2658-4670-2020-28-4-398-405>.
18. 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>.
19. Гафуров Х., Сархадов И., Тошходжаев Х.А., Хомидов М. // Политехн. вестн. Серия «Интеллект. Инновации. Инвестиции». 2019. Т.2, №46. С.41.
20. Амирханов И.В., Саркер Н.Р., Сархадов И. Численное моделирование лазерной абляции материалов // Матер. Всерос. конф. с междунар. участием, Москва, 13–17 апр. 2020 г. С.237–239.

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. 0,54. Тираж 105 экз. Заказ № 60772.

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

E-mail: [publish@jinr.ru](mailto:publish@jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)