

VILNIAUS UNIVERSITETAS
FIZIKOS FAKULTETAS
LAZERINIŲ TYRIMŲ CENTRAS

Julius Lukošius

TEORINIAI LAZERINIO MIKROFABRIKAVIMO VYKSMŲ MODELIAI

Magistrantūros studijų baigiamasis darbas

(studijų programa – LAZERINĖ FIZIKA IR OPTINĖS TECHNOLOGIJOS)

Studentas

Julius Lukošius

Darbo vadovas

dr. Eugenijus Gaižauskas

Recenzentas

doc. dr. Domas Paipulas

LTC direktorius

doc. dr. Aidas Matijošius

Vilnius 2020

Turinys

| | | |
|---|---|----|
| 1 | Įvadas | 2 |
| 2 | Aktualūs šilumos difuzijos ir lazerinio kaitinimo teorinio modeliavimo klausimai | 4 |
| | 2.1 Šilumos difuzijos diferencialinis aprašymas | 4 |
| | 2.1.1 Šilumos laidumo lygtis | 4 |
| | 2.1.2 Analizinis sprendimas Gryno funkcijos metodu | 5 |
| | 2.2 Variacinis skaičiavimas. Baigtinių elementų metodas | 6 |
| | 2.3 Femtosekundžių trukmės lazerio impulsų netiesinio sklidimo ypatumai skaidriose terpėse | 10 |
| 3 | Elementarus abliacijos femtosekundiniais impulsais modelis | 12 |
| | 3.1 Galingų femtosekundinių impulsų erdvinis skirstinys ir sukuriama nuostoliai skaidrijoje terpėje | 12 |
| | 3.2 Abliacijos modelis ir rezultatai | 14 |
| 4 | Difuzijos įtaka skaidrių terpių abliavimo femtosekundiniais impulsais vyksmams | 17 |
| | 4.1 Šilumos difuzijos modeliavimas stikle | 17 |
| | 4.1.1 Šilumos difuzijos modeliavimas stikle kaupinant pavieniu impulsu | 17 |
| | 4.1.2 Šilumos difuzijos modeliavimas stikle kaupinant impulsų vora..... | 21 |
| | 4.2 Šilumos difuzijos modeliavimas silicio karbide..... | 23 |
| | 4.2.1 Šilumos difuzijos modeliavimas silicio karbide kaupinant pavieniu impulsu | 23 |
| | 4.2.2 Šilumos difuzijos modeliavimas silicio karbide kaupinant impulsų vora | 26 |
| 5 | Pagrindiniai rezultatai ir jų aptarimas | 28 |
| | Išvados | 28 |
| | Literatūros sąrašas | 30 |
| | Santrauka | 32 |
| | Summary | 33 |

1 Įvadas

Jau pačioje lazerių eros pradžioje (septintame praėjusio amžiaus dešimtmetyje) imta ieškoti galimų lazerių taikymų (moksliniams tyrimams, medicinoje, ginkluotei, pramonėje ir kt.), o vystantis lazerinėms technologijoms, trumpėjant generuojamų lazeriais impulsų trukmei ir augant spinduliuotės galiai, lazerių taikymo sritys žymiai išsiplėtė. Pastaruoju metu prie ypač sparčiai besivystančių ir reikšmingų ūkiui sričių reiktų priskirti lazerinį medžiagų apdirbimą naudojant itin trumpus (pikosekundžių ir femtosekundžių trukmės) impulsus. Toks apdirbimo būdas leidžia minimizuoti paviršinius pažeidimus pjaustant ar efektyviai kontroliuoti susidarancius tūrinius defektus, taip sudarant įvairias struktūras, kaip antai - fotoninius kristalus, nanogardeles. Lazerinio rašymo metu pirmiausia medžiaga lokaliai kaitinama, o pasiekus aukštesnę temperatūrą medžiaga gali išgaruoti, išsilydyti ar suskilti. Norint, kad lazerinis rašymas būtų efektyvus, reikia tinkamai parinkti spinduliuotės parametrus - bangos ilgį, impulso trukmę, intensyvumą bei daugelį kitų [1]. Dielektrinės medžiagos, pavyzdžiui stiklai, gali būti skaidrios ne tik regimajame šviesos diapazone, bet ir dalyje infraraudonosios bei ultravioletinės srities. Tačiau, net ir tokios (skaidrios įprastai spinduliuotei) medžiagos gali būti paveiktos naudojant intensyvią lazerinę spinduliuotę, kurios metu pasireiškia netiesinė sugertis. Būtent dėl netiesinės sugerties medžiaga tampa nebeskaidri galingai spinduliuotei - susiformuoja plazma, kuri pasižymi metalams panašia sugertimi.

Prie tam tikrų spinduliuotės intensyvumo verčių, vadinamų medžiagos pažeidimo slenksčiu, gali įvykti medžiagos pažeidimas. Nors R. Wood'as išskiria keturias sritis, kuriose paviršinio pažeidimo slenkstis kinta pagal kitą dėsnį [2], galima išskirti dvi sritis - ilgųjų ir trumpųjų impulsų, kuriose lazerinio pažeidimo formavimosi principai iš esmės skiriasi. Ilgųjų impulsų (>10 ps) sukurtas pažeidimas yra terminio pobūdžio - lazerio spinduliuotė medžiagoje sugeriamą laisvųjų elektronų, kurie perduoda savo energiją gardelei ir ją kaitina. Temperatūra gali susidaryti labai aukšta, kad medžiagoje pradėtų vykti faziniai virsmai arba atsirastų įtempimų sąlygoti įskilimai. Mažėjant impulso trukmei (<10 ps), sukuriamas mažesnis medžiagos kaitinimo poveikis ir didesnė iš spinduliuotės gautos energijos dalis perduodama tiesiogiai medžiagos pašalinimui, o ne jos šildymui - impulsai yra trumpesni nei laikas, per kurį elektronai atiduoda šilumą gardelei, todėl medžiaga suyra spinduliuotės poveikio zonoje. Tai svarbu lazerinės abliacijos proceso metu, nes esant trumpams impulsams, medžiaga išgaruoja, kai tuo tarpu ilgesnių impulsų atveju medžiaga yra lydoma ir formuojasi daugiau užvartų [3].

Skaidrios medžiagos tūryje taip pat galima sukurti įvairių tipų modifikacijas, kurių išskiriamos keturios: nestabilios modifikacijos [4], kurios išsiskiria pakitusia sugertimi ar lūžio rodikliu, sukurti dariniai gali lengvai būti ištrinti arba išnykti savaime; vienalytis lūžio rodiklio pakitimas (*I* tipo modifikacija) [5] - spinduliuotės intensyvumui viršijant tam tikrą kritinę vertę, modifikuotos medžiagos darinys tampa stabilus su pakitusiu lūžio rodikliu; sritis su dvejopu lūžio rodikliu (*II* tipo modifikacija) [6] - esant didesniai intensyvumui, modifikuotos zonos vienaly-

tiškumas sumažėja, be to šie dariniai pasižymi dvejopu šviesos lūžimu; mikroertmės [7] - aštriai fokusuojant intensyvią lazerinę spinduliuotę, galima medžiagoje inicijuoti mikrospogimus, kurių metu iš epicentro medžiaga yra išstumiamą į periferines zonas.

Kalbant apie lazerines medžiagų mikrofabrikavimo technologijas ir jų vystymą, vienas svarbiausių tikslų yra pasiekti didesnę apdirbimo spartą, energinį efektyvumą, kokybę. Aklu eksperimentavimu, esant daugybei spiduliuotės, medžiagos ir ją supančios aplinkos parametrų, lemiančių fabrikavimo vyksmus, sunku su tokia užduotimi susidoroti. Todėl kuriami teoriniai lazerinio mikrofabrikavimo modeliai padeda rasti perspektyvias veikimo (bandymų) kryptis siekiant užsibrėžtų tikslų. Vienas tokių pavyzdžių galėtų būti neseniai publikuotas darbas, kuriame autoriai tiria medžiagos abliaciją efektyvumą ir spartą vandenyje ir teoriniu modeliavimu pagrindžia tiek efektyvumo padidėjimą, tiek ir lazerio pluoštu formuojamo kraterio pobūdį [8]. Vis dėlto, šiame darbe naudojamas pusiau empirinis modelis, kuris remiasi eksperimente išmatuotu atskiro šūvio poveikiu medžiagos paviršiui. Kita vertus, medžiagos garavimas iš abliuojamo tūrio vyksta dėl lazerio impulsais sukeltos šilumos (temperatūros), kuri gali kauptis po eilės šūvių ir, žinoma, sklaidytis (difunduoti) medžiagoje ir sąveikoje su aplinka. Taigi, siekiant adekvataus abliavimo vyksmų aprašymo pasikartojančiais impulsais, reiktų įvertinti tiek galimą šilumos kaupimąsi, tiek ir šilumos difuzijos vyksmus.

Šiame darbe, naudojant ankstesniais magistrinių studijų mokslo tiriamųjų darbų [9, 10] (kur buvo analizuojamas silicio karbido (SiC) ir stiklo kaitinimas lazeriu bei šilumos difuzija) metu sukauptomis žiniomis ir įgūdžiais siekiama sukurti (labiau) adekvatų medžiagos abliacijos femtosekundiniais impulsais modelį ir įvertinti difuzijos poveikį. Tiek stiklas, tiek SiC - plačiai naudojamos medžiagos perspektyviems mikroelektro-mechaninių sistemų taikymams.

Darbo tikslas: sukurti teorinį medžiagos paviršiaus abliacijos modelį, įvertintantį lazerinių impulsų sekomis sukeltą šilumos kaupimąsi ir difuziją.

Uždaviniai:

a) apskaičiuoti femtosekundinės lazerinės spinduliuotės sugertį medžiagoje dėl daugiafotonės sugerties ir įvertinti atskirais šūviais medžiagoje sukeltą šilumos skirstinį;

b) iširti medžiagos paviršiaus abliavimo vyksmus (kraterio profilį) naudojant rastą šilumos skirstinį;

c) įvertinti šilumos kaupimosi ir difuzijos poveikį abliuojant medžiagos paviršių atskirais femtosekundiniais impulsais ir jų voromis.

Reikšminiai žodžiai: šiluma, difuzija, daugiafotonė sugertis, abliacija, mikroapdirbimas.

2 Aktualūs šilumos difuzijos ir lazerinio kaitinimo teorinio modeliavimo klausimai

Medžiagos lazerinio mikrofabrikavimo vyksmai prasideda nuo lokalaus jos kaitinimo lazerine spinduliute. Femtosekundinės spinduliuotės sukelta šiluma medžiagoje sklaidosi (difunduoja), o šios difuzijos spartą sąlygoja tiek difuzijos koeficientas (skirtingas kiekvienai medžiagai), tiek ir kraštinės uždavinio sąlygos. Šios abi aplinkybės didžia dalimi lemia, kaip šiluma pasiskirsto (kaupiasi) medžiagoje, kai lazerinis kaupinimas vykdomas trumpų impulsų vora. Šiame skyriuje aptariami darbe taikyti difuzijos lygties sprendimo analiziniu ir skaitmeniniu būdu. Pradžioje aprašytas Gryno funkcijos metodas, kuriuo patogiu užrašyti analizinį sprendinį uždaviniams su šaltiniu ir kraštinėmis sąlygomis. Gryno funkcijos standartiniams atvejams yra žinomos ir gali būti rastos literatūros šaltiniuose. Sunkumai iškyla, kai kraštinės sąlygos tampa sudėtingos, pavyzdžiui, turime sudėtingesnį krašto kontūrą, ar netgi kintantį laikui bėgant. Tuomet užrašyti analizinę Gryno funkcijos išraišką yra sudėtinga. Lazerinio mikrofabrikavimo uždavinys kaip tik ir yra šis atvejis - laikui bėgant keičiasi tiek medžiagos paviršius, tiek ir temperatūra, t.y. tiek kraštinės, tiek ir pradinė uždavinio sąlygos. Todėl kitame (2.2) skyrelyje aprašytas vadinamas baigtinių elementų metodas (BEM), besiremiantis variaciniu skaičiavimu. Šis būdas pranašesnis tuo, jog galime naudoti norimą geometriją, įtraukti skirtingas medžiagos savybes bei fiksuoti lokalius efektus, keisti kraštines sąlygas. BEM padalina didelę sistemą į mažesnes diskretizuojant erdvę, t.y. sukuriame tinklę, skaitmeninę sritį sprendiniui. Paprastos lygtis, aprašančios šiuos elementus, yra sujungiamos į bendrą lygčių sistemą. Skyriaus pabaigoje (2.3 skyrelyje) užrašyta netiesinė Šredingerio lygtis, naudojama analizuojant itin trumpų impulsų sklaidimą skaidrioje terpėje ir aptariama tolydžios bangos artinio taikymo galimybė modeliuojant mikrofabrikavimo vyksmus, sukeltus impulsine spinduliuote.

2.1 Šilumos difuzijos diferencialinis aprašymas

2.1.1 Šilumos laidumo lygtis

1932 metais Sydney Goldstein [11] parodė, kaip Laplaso transformacijos gali būti panaudotos išspręsti daugelį šiluminio laidumo uždavinių, kurie iki tol buvo labai sudėtingi. Tarkime, kad turime viendimensinį šiluminio laidumo uždavinį:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < \infty, \quad 0 < t. \quad (1)$$

Imant (1) lygties Laplaso transformaciją, turime kad

$$\frac{d^2 U}{dx^2} = q^2 U, \quad 0 < x < \infty, \quad (2)$$

o atmetę nefizikinį (eksponentiškai augantį sprendinį begalybėje) (2) lygties sprendinį užrašome taip:

$$U(x, s) = Ae^{qx}, \quad (3)$$

kur pažymėta $s = a^2q^2$. Dabar randame:

$$2 \int_0^x U(x, s) dx = 2A(1 - e^{qx})/q. \quad (4)$$

Norint rasti Gryno funkciją, turime pasirinkti A tokią, kad ji atitiktų momentinį plokščių šilumos šaltinį nuo $x = -\infty$ iki $x = \infty$ riboje $t \rightarrow 0$. Šiuo atveju (4) lygties kairė pusė tampa lygi vienetui, kai $q \rightarrow \infty$, arba $2A = q$. Tada gauname:

$$G(x, s|0, 0) = \frac{1}{2}qe^{-qx}. \quad (5)$$

Imdami $G(x, s|0, 0)$ atvirkštinę funkciją, turime

$$g(x, t|0, 0) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi a^2 t} \exp\left(-\frac{x^2}{4a^2 t}\right). \quad (6)$$

2.1.2 Analizinis sprendimas Gryno funkcijos metodu

Griežtai imant, Gryno funkcijos lygtis viendimensinei šilumos lygčiai užrašoma tokiu būdu:

$$\frac{\partial g}{\partial t} - a^2 \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = \delta(x - \xi)\delta(t - \tau), \quad -\infty < x, \xi < \infty, \quad 0 < t, \tau, \quad (7)$$

esant kraštinėms sąlygoms

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} g(x, t|\xi, \tau) \rightarrow 0 \quad 0 < t, \quad (8)$$

ir pradinėms sąlygoms $g(x, 0|\xi, \tau) = 0, -\infty < x < \infty$. Panaudojus Laplaso transformaciją (7) lygčiai, ir gautam sąryšiui atlikę Furje transformaciją bei suradę jos atvirkštinę funkciją, gauname:

$$G(x, s|\xi, \tau) = \frac{e^{s\tau}}{2\pi a^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(x-\xi)k}}{k^2 + q^2} dk, \quad (9)$$

kur $q^2 = s/a^2$. Transformuodami (9) lygtį į uždara kontūrą pasinaudojant Jordan'o taisykle randame, kad:

$$G(x, s|\xi, \tau) = \frac{e^{-|x-\xi|\sqrt{s/a-s}\tau}}{2a\sqrt{s}}. \quad (10)$$

Dabar, pasinaudoję Laplaso transformacijų lentelėmis, randame (7) lygties Gryno f-ją:

$$g(x, t|\xi, \tau) = \frac{H(t - \tau)}{\sqrt{4\pi a^2(t - \tau)}} \exp\left[-\frac{(x - \xi)^2}{4a^2(t - \tau)}\right]. \quad (11)$$

Remiantis ta pačia logika, Gryno funkcija šilumos laidumo lygčiai su ašine simetrija:

$$\frac{\partial g}{\partial t} - \frac{a^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial g}{\partial r} \right) = \frac{\delta(r-\rho)\delta(t-\tau)}{2\pi r}, \quad 0 < r, \rho < \infty, \quad 0 < t, \tau, \quad (12)$$

užrašoma tokiu pavidalu:

$$g(r, t | \rho, \tau) = \frac{H(t-\tau)}{2\pi} \int_0^\infty J_0(kr) J_0(k\rho) e^{-k^2 a^2 (t-\tau)} k dk, \quad (13)$$

kur $H(t-\tau)$ yra Heaviside funkcija, o $J_0(kr), J_0(k\rho)$ žymi nulinės eilės Beselio f-jas.

Kai difuzijos lygtyje turime konkretų šilumos šaltinį $Q(r, t)$, ieškomas lygties sprendnys užrašomas tokiu būdu:

$$u(r, t) = \int_{-\infty}^\infty \int_0^t g(r, t | \rho, \tau) Q(\rho, \tau) d\rho d\tau. \quad (14)$$

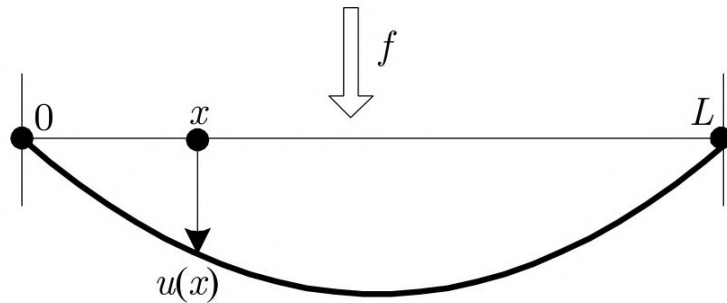
Vis dėlto, baigiant šį skyrelį, būtina pažymėti, kad panašaus pobūdžio diferencialinių lygčių sprendinio radimas yra patogus ir paprastas, tačiau padėti apsunkina sudėtinga Gryno funkcijos paieška, kai kraštinės sąlygos tampa sudėtingesnėmis, ar jos kinta laikui bėgant. Kalbant apie lazerinio mikrofabrikavimo uždavinius pasikartojančiais impulsais, turime būtent tokį atvejį. Inžineriniams uždaviniams spręsti, kur gali keisti medžiagos fazės, sričių ribos ir kraštinės sąlygos, patogesnis žemiau aprašytas variacinis skaičiavimas.

2.2 Variacinis skaičiavimas. Baigtinių elementų metodas

Baigtinių elementų metodas (BEM) yra plačiausiai naudojamas sprendžiant inžinierines problemas bei įvairius matematinius modelius. Įprasti uždaviniai apima tradicinės struktūrinės analizės, šilumos mainų, skysčių tekėjimo, masės pernešimo ir elektromagnetinio potencialo sritis. Šis metodas turi keletą privalumų: tikslus sudėtingos geometrijos atvaizdavimas, skirtingų medžiagų savybių įtraukimas, lengvas viso sprendinio atvaizdavimas, lokalių efektų fiksavimas.

BEM yra tam tikras skaitmeninis metodas, skirtas spręsti dalines diferencialines lygtis su dviem ar trimis erdviniais kintamaisiais, kurios turi ypatingų taškų arba sričių, kur negalima užrašyti tolydinės funkcijos išvestinės. Norint išspręsti uždavinį, BEM padalina didelę sistemą į mažesnes, paprastesnes dalis, kurios vadinamos baigtiniais elementais. Tai pasiekama per tam tikrą erdvės diskretizaciją erdvinėje dimensijoje, kuri yra sukuriama sukonstruojant objekto tinklą - skaitmeninę sritį sprendiniui, kuris turi baigtinį taškų skaičių. BEM formulavimas kraštinės sąlygos uždaviniui baigiasi algebrinių lygčių sistema. Šis metodas aproksimuoja nežinomą funkciją per visą sritį. Paprastos lygtys, aprašančios šiuos baigtinius elementus yra surenkamos į didelę lygčių sistemą, kuri aprašo visą problemą. BEM tada naudoja variacinius skaičiavimo metodus, kad aproksimuotų sprendinį minimizuojant priklausančią klaidos funkciją.

Baigtinių elementų metodo pranašumą galima pavaizduoti paprastu pavyzdžiu [12]. Tarkime turime idealiai elastingą ir tamprią stygą, ištiestą per ilgį $[0, L]$, ją veikia statmena jėga f ir ji yra pritvirtinta abiejuose galuose (1 pav.).



1 pav. Styga, veikiama jėgos f ir pritvirtinta abiejuose galuose.

Huko ir judesio kiekio tvermės dėsnis veda prie lygties $-(ku')' = L$, kur $k = k(x) \geq k_0 > 0$ priklauso nuo fizikinių stygos savybių. Jei šią stygą patalpiname elastingoje terpėje, tuomet ji sukuria dydžio $-\lambda u$ jėgą, atvirkščią f , kur $\lambda = \lambda(x) \geq \lambda_0 > 0$. Tuomet mes turime

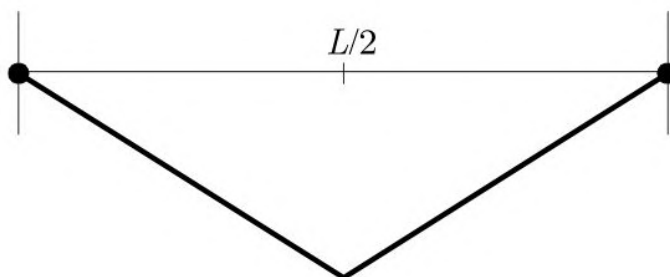
$$-(ku')' + \lambda u = f, \quad \text{intervale } (0, L) \quad (15)$$

ir tada matematinis aprašymas šiam uždaviniui yra

$$\begin{cases} -(ku')' + \lambda u = f, & (0, L) \\ u(0) = u(L) = 0 \end{cases} \quad (16)$$

Reikia pastebėti, kad šilumos difuzijos ir stygos tempimo uždaviniai nors ir akivaizdžiai skirtingi, tačiau matematika abiejuose iš esmės yra ta pati.

Grįžtant prie stygos uždavinio, tarkime kad išorinė jėga veikia ties tašku $x = L/2$, kaip pavaizduota 2 pav.



2 pav. Styga, veikiamą apkrovos taške $x = L/2$ ir pritvirtinta abiejuose galuose.

Tačiau funkcija ties šiuo tašku nėra diferencijuojama, todėl tokia funkcija negali būti sprendinys diferencialinės lygties $-(ku')' + \lambda u = f$, bent jau klasikiniu požiūriu, kad u dukart diferencijuojama kiekviename taške intervale $(0, L)$ ir tenkina diferencialinę lygtį tame intervale. Šis paprastas pavyzdys rodo, kad yra būtina ieškoti naujų būdų rasti diferencialinės lygties sprendinių.

Jeigu jėga f sukuria tariamą poslinkį $v(x)$ taške x , tada $f(x)$ atliktas darbas yra $f(x)v(x)$, o darbas atliktas per visą stygą lygus

$$\int_0^L f(x)v(x)dx. \quad (17)$$

Pritaikius tai (15) lygties kairei pusei ir integruojant dalimis, turime

$$\int_0^L -(k(x)u'(x))'v(x)dx = \int_0^L k(x)u'(x)v'(x)dx. \quad (18)$$

Tai leidžia pakeisti diferencialinę lygtį $-(ku')' + \lambda u = f$ į integralinę:

$$\int_0^L k(x)u'(x)v'(x)dx + \int_0^L \lambda(x)u(x)v(x)dx = \int_0^L f(x)v(x)dx. \quad (19)$$

Taigi, galime manyti, kad uždavinio sprendinys yra funkcija $u : [0, L] \rightarrow \mathbb{R}$, kai $u(0) = u(L) = 0$, kuri patenkina (19) lygtį visiems įmanomiems poslinkiams v , kad $v(0) = v(L) = 0$. Vienas pagrindinių šio metodo privalumų yra tai, kad sumažiname reikalavimus, kuriuos turi tenkinti funkcija u . Tačiau, yra du pagrindiniai momentai, kurie nėra visiškai aiškūs:

1. u visada turi būti bent jau vieną kartą diferencijuojama, išskyrus atvejį apkrovai, lokalizuotai taške.
2. jei apkrova yra lokalizuota taške $x = L/2$ (t.y., jei $f(x) = 0$ visiem $0 \leq x \leq L, x \neq L/2$), tada $\int_0^L f(x)v(x)dx = 0$, taip kad $u = 0$ patenkina (19).

Todėl yra svarbu surasti geresnį būdą matematiškai susitvarkyti su apkrova, lokalizuota

taške. Tarkime, kad apkrova yra paskirstyta mažomis dalimis apie tašką $x = L/2$:

$$f_\varepsilon = \begin{cases} 1/(2\varepsilon), & \frac{L}{2} - \varepsilon \leq x \leq \frac{L}{2} + \varepsilon. \\ 0, & \text{kitu atveju} \end{cases}. \quad (20)$$

Darbas, atliktas tokios apkrovos su poslinkiu v , dabar yra aprašomas

$$\int_0^L f_\varepsilon(x)v(x)dx = \int_{\frac{L}{2}-\varepsilon}^{\frac{L}{2}+\varepsilon} \frac{v(x)}{2\varepsilon}dx = v(\xi_\varepsilon), \quad (21)$$

kur $\frac{L}{2} - \varepsilon \leq \xi_\varepsilon \leq \frac{L}{2} + \varepsilon$. Dabar tarus, kad $\varepsilon \rightarrow 0$ ir v yra tolydi, daroma išvada, kad darbas atliktas vienos apkrovos taške $L/2$, kuriančios poslinkį $v = v(X)$, yra $v(L/2)$. Šis aiškinimas parodo, kad galime matematiškai susitvarkyti su apkrova, lokalizuota taške x_0 .

Diferencialinėmis lygtimis su dalinėmis išvestinėmis gali būti suformuluotos daugelis fizikinių problemų [13]. Norėdami pademonstruoti tokių uždavinių sprendimo variaciniu metodu galimybes paimsime kitą pavyzdį: elastinė membrana Ω yra plokštuminė apribota erdvė, pritvirtinta prie griežtos kreivės Γ , tačiau kiekvieną paviršiaus elementą $dx = dx_1 dx_2$ spaudžia jėga $f(x)dx$. Vertikalus membranos poslinkis yra aprašomas realaus dydžio funkcija u , kuri yra Laplaso lygties sprendinys:

$$-\Delta u(x) = f(x), \quad x = (x_1, x_2) \in \Omega. \quad (22)$$

Kadangi membrana yra pritvirtinta prie kreivės Γ , funkcija u tenkina šias kraštines sąlygas:

$$u(x) = 0, \quad x \in \Gamma. \quad (23)$$

Tai yra homogeniškas Dirichlet uždavinys Laplaso lygčiai. Tikslas yra parodyti, kad uždavinys aprašytas šiomis lygtimis turi unikalų sprendinį. Norint jį surasti, naudosimės variacinio skaičiavimo metodu uždaviniui su šia kraštine sąlyga [13].

Tarkime, kad aukščiau aprašytas uždavinys turi tolydų sprendinį u (tarkime, du kartus diferencijuojamą). Tariame, kad v yra bet kokia sutartinė funkcija neribotai diferencijuojamų funkcijų erdvėje $D(\Omega)$. Padauginame (22) lygtį iš funkcijos $v(x)$ ir suintegruojame x atžvilgiu visoje erdvėje Ω :

$$\int_\Omega -(\Delta uv)(x)dx = \int_\Omega (fv)(x)dx. \quad (24)$$

Prisimenant Gryno formulę, galime užrašyti lygtį:

$$\int_\Omega (\Delta uv)(x)dx = - \int_\Omega (\nabla u \nabla v)(x)dx + \int_\Gamma \left(\frac{\partial u}{\partial \nu} v\right)(x)d\Gamma(x), \quad (25)$$

kuri reiškia integravimo dalimis apibendrinimą vienoje dimensijoje. Šioje formulėje, $\nabla u(x)$ yra

u gradientas ties $x = (x_1, x_2)$, o $\nabla u(x) \cdot \nabla v(x)$ aprašo vektorių $\nabla u(x)$ ir $\nabla v(x)$ produktą

$$\nabla u(x) \cdot \nabla v(x) = \frac{\partial u}{\partial x_1}(x) \frac{\partial v}{\partial x_1}(x) + \frac{\partial u}{\partial x_2}(x) \frac{\partial v}{\partial x_2}(x);$$

galiausiai, $\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) = \nabla u(x) \cdot \nu(x)$, kur $\nu(x)$ yra normalė ties Γ kreivės x , orientuota į Ω išorę. (25) lygtis gali būti panaudotą transformuojant lygtį tokiu būdu:

$$\int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v)(x) dx = \int_{\Gamma} = \int_{\Omega} (fv)(x) dx, \quad (26)$$

kadangi $v|_{\Gamma} = 0$.

Toliau nagrinėsime naują (26) lygtį. Variacinis uždavinys formuluojamas taip:

$$\text{rasti } u \in H, \quad \text{kad visiems } v \in H, \quad A(u, v) = L(v), \quad (27)$$

kur dvilypė forma A ir linijinė forma L yra apibūdinama kaip:

$$A(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v(x) dx, \quad L(v) = \int_{\Gamma} = \int_{\Omega} f(x)v(x) dx. \quad (28)$$

Norint parodyti, kad kraštinių sąlygų uždavinys (22)-(23) turi sprendinį, pirmiausiai parodome jo ekvivalentiškumą su variaciniu uždaviniu (27)-(28), tada parodome, jog variacinis uždavinys turi tam tikrą sprendinį.

Tarkime, kad Ω yra apribota atvira R^n poerdvė su Lipschitz tolydžiomis kraštinėmis ir f priklauso $L^2(\Omega)$. Tegul $u \in H$ kai $H = H_0^1(\Omega)$. Jeigu u yra (27)-(28) lygčių sprendinys, tada $\Delta u \in L^2(\Omega)$ ir patenkina kraštinių sąlygų uždavinį (22)-(23). Priešingai, jeigu u patenkina (22)-(23) su $\Delta u \in L^2(\Omega)$, tada u yra (27)-(28) lygčių sprendinys.

2.3 Femtosekundžių trukmės lazerio impulsų netiesinio sklidimo ypatumai skaidriose terpėse

Tokie reiškiniai, kaip antai: netiesinis lūžio rodiklio pokytis, difrakcija bei dispersija, netiesiniai nuostoliai dėl daugiafotonės sugerties sąlygoja erdvėlaikių pluoštų formų kitimą ir iš esmės keičia intensyvių ultratrumpų impulsų sklidimą skaidriose terpėse. Griežtas ir išsamus vyksmų, vykstančių sklindant tokiems impulsams skaidrioje terpėje, modeliavimas atliekamas sprendžiant netiesinę Šredingerio lygtį, su aukščiau išvardintus reiškinius aprašančiais nariais. Optinio impulso lauko amplitudei, $A(r, z, t)$, kurio centrinis dažnis ν , sklindančio išilgai z ašies dispersinėje terpėje su nuo intensyvumo priklausančiu lūžio rodikliu, paprastai modeliuojama taikant paraksialinį artinį. Grupiniu greičiu ν_g judančioje koordinatinių sistemoje lauko ampli-

tudės lygtis yra tokia:

$$\frac{\partial A}{\partial z} = \frac{ik''}{2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{k'''}{6} \frac{\partial^3 A}{\partial t^3} - \frac{i}{2k} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial A}{\partial r} \right) + \frac{i\omega_0 n_2}{c} |A|^2 A - \frac{\beta^{(K)}}{2} |A|^{2K-2} A, \quad (29)$$

čia $k''''' = \partial^{2(3)}k(\omega)/\partial\omega^{2(3)}$ yra antrosios ir trečiosios eilės dispersijos koeficientai, n_2 netiesinis lūžio rodiklis $k = \omega n_0/c$, o $\beta^{(K)}$ - daugiafotonės sugerties koeficientas. Atkreipksime dėmesį, kad tarp medžiagos parametrų, naudojamų lauko ir medžiagos sąveikai modeliuoti, kaip tik šis koeficientas $\beta^{(K)}$ yra sunkiai išmatuojamas, o egzistuojantys teoriniai vertinimai skiriasi.

Vis dėlto, kiekvienu konkrečiu atveju užrašytoje netiesinėje Šredingerio lygtyje galima išskirti dalį reikšmingesnių narių ir atsisakyti narių, neturinčių didesnės įtakos, tuo pačiu sumažinant skaičiavimų apimtį, o atskirais atvejais netgi rasti analizinį sprendinį. Kalbant apie tokius lazerinio mikrofabrikavimo vyksmus kaip paviršiaus abliavimas femtosekundiniais impulsais, natūralu manyti, kad galima atsisakyti difrakcijos ir dispersijos reiškinių, nes pluoštas nesklinda dideliais atstumais. Pabrėžtina, kad dispersinių narių įtaka jau buvo nagrinėta [14] darbe, kur skaitmeniškai sprendžiant netiesinę Šredingerio buvo palygintas pluoštų sklaidimas abiem atvejais: a) visa apimantis Šredingerio lygtyje įskaičius dispersinius narius ir b) taikant tolydžios bangos artinį, t.y. atmetus dispersinius narius. Darbe, analizuojant femtosekundinių gijų ervinę pluoštų sandarą skaidrioje termėje, prieita prie išvados, kad erdvinis gijos intensyvumo pėdsakas dideliu tikslumu gali būti randamas naudojant tolydžios bangos artinį. Kadangi būtent erdvinis (integruotas laike) intensyvumo profilis ir lemia sukurtos medžiagoje šilumos skirstinį, tai siekiant šio darbo tikslų apsiribosime šiuo (tolydžios bangos) artiniu. Paprastumo dėlei, taikydami ašinės simetrijos artinį, Šredingerio lygtį užrašysime tokia forma:

$$\frac{\partial A}{\partial z} = -\frac{i}{2k} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial A}{\partial r} \right) + \frac{i\omega_0 n_2}{c} A - \frac{\beta^{(K)}}{2} |A|^{2K-2} A, \quad (30)$$

čia turime tik vieną skersinę (r) bei išilginę (z) koordinates. Atkreipsime dėmesį, kad galimybė taikyti inžinerinių problemų analizei tolydžios bangos artinį turi ir didelės praktinės reikšmės, nes šimtais kartų sumažina skaičiavimo apimtį (ir trukmę). Pažymėtina, kad prielaida dėl galimybės naudoti tolydžios bangos artinį paremta taip pat ir tikslaus sutapimo tarp eksperimentinių rezultatų ir tolydžios bangos modelių paremto modeliavimo duomenų, kaip tai buvo demonstruota [15] darbe.

3 Elementarus abliacijos femtosekundiniais impulsais modelis

Šioje dalyje spendžiami pirmieji aprašymo įvade suformuluoti uždaviniai. Tuo tikslu pradžioje įvertintas medžiagos kaitimas (sukeliamos temperatūros skirstinys) dėl lazerinės spinduliuotės sugertos energijos skaidrioje medžiagoje, suprantant, kad medžiagos garavimas iš abliuojamo tūrio vyksta dėl lazerio impulsais sukeltos šilumos (temperatūros). Todėl, siekiant adekvataus abliavimo vyksmų aprašymo pasikartojančiais impulsais, rastas skirstinys bus naudojamas siekiant sukurti medžiagos abliacijos modelį femtosekundiniais impulsais.

3.1 Galingų femtosekundinių impulsų erdvinis skirstinys ir sukuriami nuostoliai skaidrioje terpėje

Mažo intensyvumo šviesos sugertis terpėje, kurioje draudžiamos juostos energinis tarpas žymiai viršija fototono energiją, yra nežymi, todėl tokia terpė vadinama skaidria. Tačiau augant krentančios į skaidrią terpę šviesos galiai (o tai būdinga itin trumos trukmės impulsams) randasi daugiafotonė sugertis. Šiame skyrelyje, analizuodami anksčiau užrašytą Šredingerio lygtį (30) ieškosime jos sprendinio itin galingų laukų atveju. Analizuosime atvejį, kai impulso galia žymiai (keliasdešimt kartų) viršija kritinę impulso savaiminio fokusavimo galią P_{cr} . Tokiu atveju lygtyje (30) lemiamas tampa daugiafotonės sugerties narys, o likusius (difrakciją ir lūžio rodiklio moduliaciją) galime atmesti. Mus dominančios srities ilgis, kurioje vyksta daugiafotonė sugertis ir sklisdamas impulsas praranda energiją, nėra didelis - palyginimas su pluošto matmenimis. Todėl impulso priklausomybės nuo gylio z funkciją gausime sprenddami dešinėje pusėje palikę tik nari, aprašantį daugiafotonę sugertį, t.y. perrašę (30) lygtį tokiu būdu:

$$\frac{\partial A}{\partial z} = -\frac{\beta^{(K)}}{2}|A|^{2K-2}A. \quad (31)$$

Kadangi čia neturime narių su menamais koeficientais, tai užrašysime lygtį pluošto intensyvumui. Tuo tikslu dauginame lygtį (31) iš kompleksiskai jungtinės amplitudės A^* , kompleksiskai sujungtinę lygtį (31) iš A ir jas sudėję, gauname lygtį intensyvumui:

$$\frac{\partial I}{\partial z} + \beta^{(K)}I_0^K = 0, \quad I(r, z=0, t=0) = I_0. \quad (32)$$

Pastarosios lygties sprendinį randame tokio pavidalo:

$$I(r, z, t) = ((-1 + K)z\beta^{(K)} + I(r, t)^{1-K})^{\frac{1}{1-K}}, \quad (33)$$

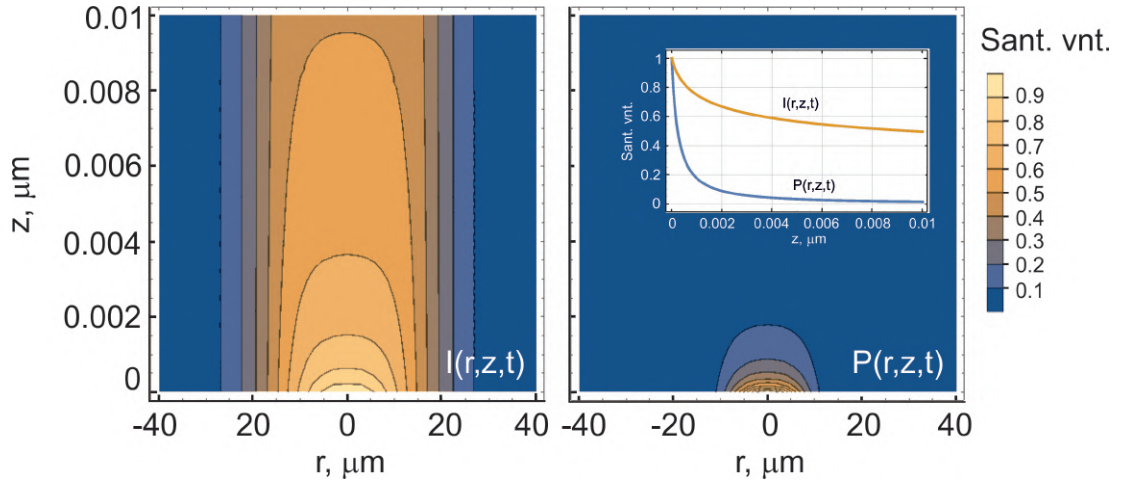
kur $I(r, t) = I_0 \exp\left(-2\frac{r^2}{\rho_0^2} - 2\frac{t^2}{\tau^2}\right)$. Dabar, naudodami intensyvumo ir galios sąryšį $I_0 = \frac{2P}{\pi\rho_0^2}$, galime perrašyti šią išraišką galiai P , normuotai į kritinės galios pluošto maksimumą:

$$P_{norm}(r, z, t) = ((-1 + K)z\beta + P(r, t)^{1-K})^{\frac{1}{1-K}}. \quad (34)$$

Dabar, norėdami rasti sugeriamą dėl daugiafotonės sugerties galios skirstinį, imame (34) funkcijos išvėtinę pagal z . Turime:

$$P(r, z, t) = \beta \left((-1 + K)z\beta + P(r, t)^{1-K} \right)^{\frac{K}{1-K}}, \quad (35)$$

kur $\beta = \frac{2P_{cr}K^{-1}}{\pi\rho_0^2} \beta^{(K)}$ - naujas sunormuotas koeficientas, o $P(r, t) = P_0 \exp\left(-2\frac{r^2}{\rho_0^2} - 2\frac{t^2}{\tau^2}\right)$, $P_0 = I_0 2\pi\rho_0^2 / P_{cr}$ - krentančios ir kritinės galios santykis. Normuoti intensyvumo ir sugeriamos galios skirstiniai palyginimui pavaizduoti 3 pav. Matyti, kad prielaida, jog galima atmesti difrakcijos ir netiesinio lūžio rodiklio pokyčio narius iš (30) lygties yra teisinga - atstumai yra labai maži ir šie efektai nespėja pasireikšti.



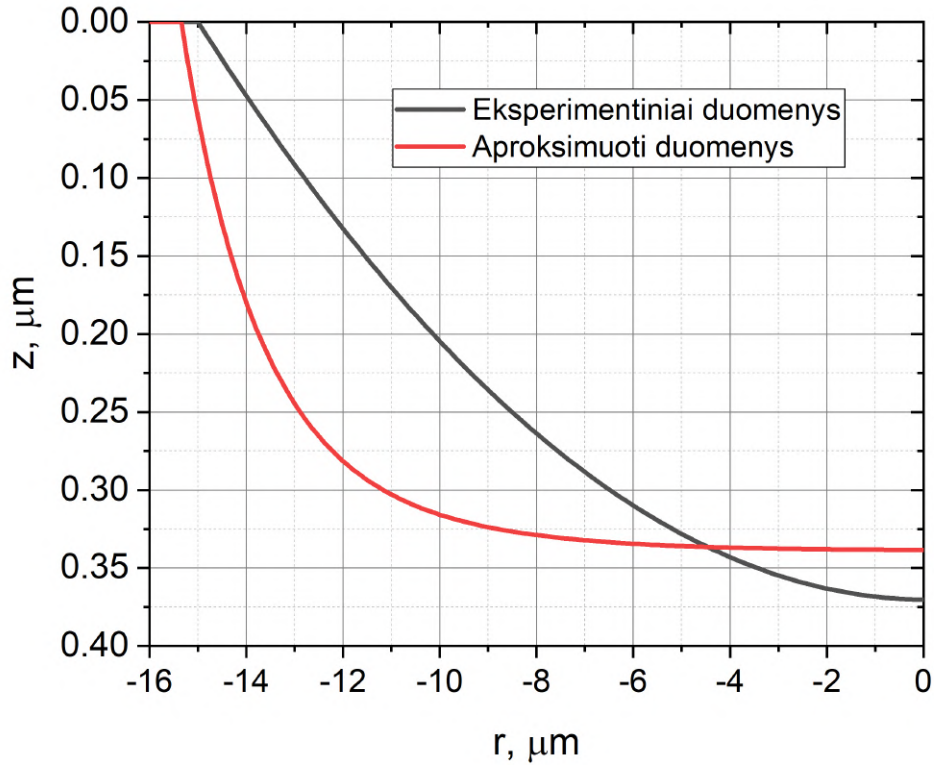
3 pav. Normuotas intensyvumo (kairėje) ir dėl daugiafotonės sugerties sugeriamas galios skirstinys (dešinėje)

Aprašydami lazerinės spinduliuotės sąveiką su medžiaga iš esmės bandomė įvertinti, kiek energijos yra perduodama medžiagai. Turėdami galios funkciją, galime modeliuoti energijos pokyčius medžiagoje. Kadangi galia - energija, pernešama per laiko vieneta, tai energijos pokytį galima apskaičiuoti galios pokytį padauginus iš impulso trukmės: $\Delta E = \Delta P \cdot \tau$. Toliau laikant, kad visa medžiagoje sugerta energija yra atiduodama gardelei ir pakelia temperatūrą, pasinaudodami šilumos ir temperatūros sąryšiu, galime apskaičiuoti medžiagos temperatūros pokytį: $\Delta T = \frac{Q}{c\rho}$, kur $Q = \Delta E$, c - savitoji šiluminė talpa, ρ - medžiagos tankis. Tai momentinis temperatūros pokytis, atsirandantis iškart po to, kai impulsas yra sugeriamas medžiagoje. Pasinaudodami šiais sąryšiais, gauname lazerio impulsu sukeltą temperatūros pasiskirstymą medžiagoje:

$$T(r, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{P(r, z, t)}{c\rho} dt, \quad (36)$$

3.2 Abliacijos modelis ir rezultatai

Žinoma, kad medžiaga pažeidžiama spinduliuotės energijos tankiui pasiekus apibrėžtą slenksčių, vadinamą medžiagos pažeidimo slenksčiu. Norint, kad dalis medžiagos būtų pašalinta, reikia galingesnių impulsų, kurių energijos tankis žymiai viršytų slenkstines medžiagos abliacijos vertes. Atsižvelgiant į eksperimentinius vienu $100 P_{cr}$ galios impulso šūviu išabliuoto kraterio stiklo duomenis [8] (t.y. imant išabliuoto kraterio formą) buvo ieškomas β parametras (1 lentelė). β vertė buvo parinkta tokia, kad esant šešiafotonei sugerčiai, išabliuoto kraterio kontūras atitinkų teoriškai įvertintos lazerio impulso sukurto temperatūros skirstinio izoterma, atitinkančią abliacijos slenksčio vertes. Kaip matyti iš 4 pav., $P(r, z)$ funkcijos izokontūras nepilnai sutampa su eksperimente išabliuoto kraterio kontūru, tačiau plotis ir gylis atitinkamai skiriasi tik maždaug 2,5 ir 0,025 μm .



4 pav. Eksperimentiniai ir teoriškai aproksimuotos kraterio formos

Modeliuojant kraterio formą po kiekvieno sekančio šūvio, esančio kraterio taškai buvo pastumiami, atsižvelgiant į šūviu sugeriamą medžiagoje šilumos kiekį ir sukurtą naują temperatūros skirstinį. Sugeriamas energijos kiekis (taigi, ir sukeliama medžiagoje temperatūra) buvo koreguojamas atsižvelgiant į esamo kraterio kontūrą, kiekviename taške dauginant iš $\cos(\alpha)$, kur α - kraterio linijos liestinės kampas su r ašimi $\alpha = \text{ArcTan}(dz(r)/dr)$. Taigi naujo kraterio slenkstinės abliacijos temperatūros kontūras po i šūvių užrašomas taip:

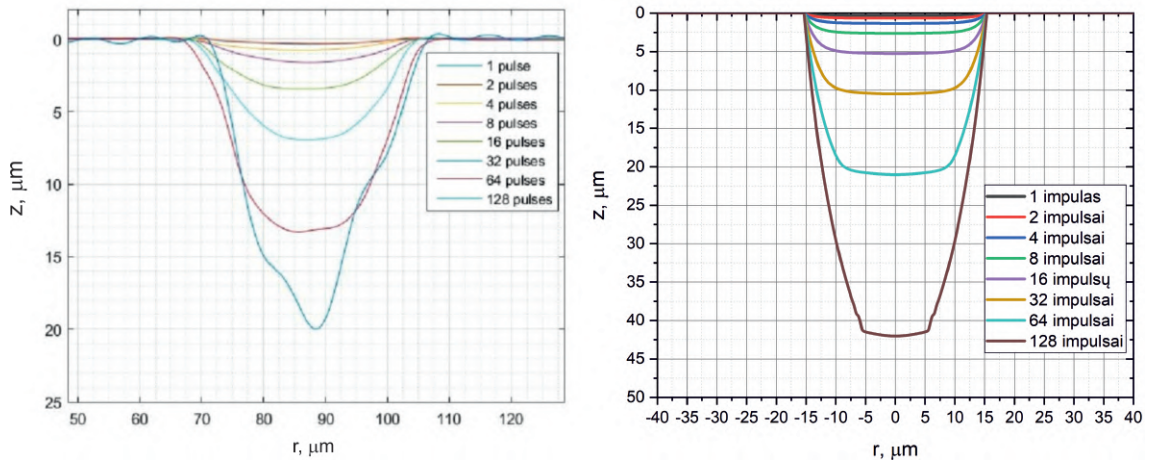
$$T_{i+1}(r, z) = T_0(r, z - z_{kr} \cos(\alpha)), \quad (37)$$

kur $z_{kr}(r)$ - pradinio kraterio kontūras. Tuomet paimamas jau naujas kontūras ieškant $T(r, z - z_{kr}(r)) = T_{lyd}$, kuris lygus naujo kraterio formai. Taip kartojamas procesas po kiekvieno impulso ir randama daugelio šūvių išabliuota kraterio forma.

Kraterio abliacijos rezultatai, remiantis parametrais, pateiktais 1 lentelėje, pateikiami 5 paveikslėlyje (dešinėje), kartu su [8] darbe išmatuotais eksperimentiniais rezultatais (5 pav. kairėje).

1 lentelė. Skaitmeninio modeliavimo parametrai.

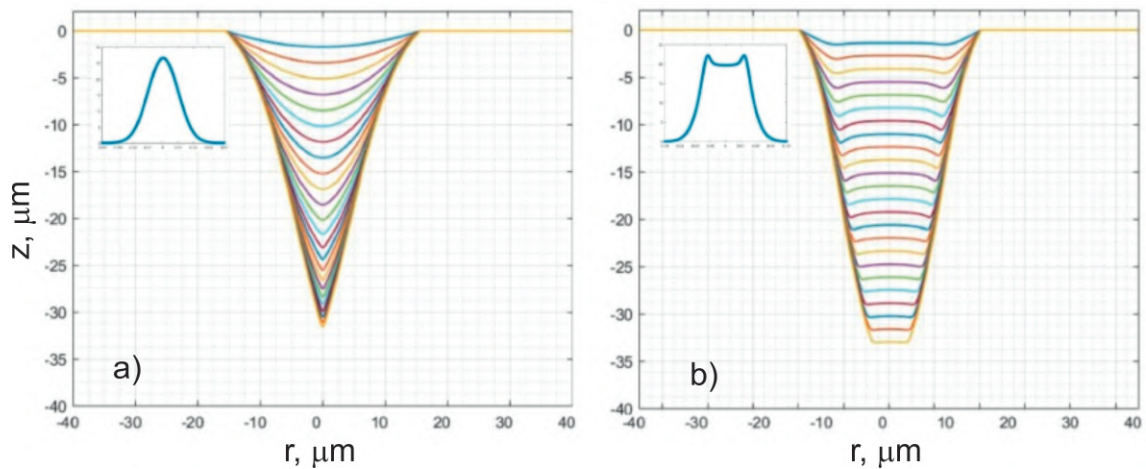
| | | |
|---|--------------------------------------|-----------------------------|
| Impulso trukmė, τ | Stiklas [16] 300 fs | SiC 300 fs |
| Kritinė galia, P_{cr} | 4 MW | 2.39 MW |
| Bangos ilgis, λ | 1030 nm | 1030 nm |
| Pluošto radiusas, r_0 | 30 μm | 30 μm |
| Draustinės juostos plotis | 6,5 eV [17] | 3,23 eV [18] |
| Daugiafotonės sugerties laipsnis, K | 6 | 3 |
| Sunormuotas daugiafotonės sugerties koeficientas, β | $6,5 \cdot 10^{-8}$ | 10^{-3} |
| Šilumos difuzijos koeficientas, D | $4,25 \cdot 10^{-3} \mu m^2 ns^{-1}$ | $0,17 \mu m^2 ns^{-1}$ [18] |
| Savitoji šiluma, C | 0,88 J/g $^\circ K$ | 0,69 J/g $^\circ K$ [19] |
| Tankis, ρ | 2,52 g/cm 3 | 3.21 g/cm 3 [20] |
| Konvekcijos su oru koeficientas, α | $10^{-11} W/\mu^2 K$ | $10^{-11} W/\mu^2 K$ |
| Lydomosi temperatūra, T_{lyd} | 1000 $^\circ C$ | 2700 $^\circ C$ [21] |



5 pav. Skaitmeniškai sumodeliuotas kraterio profilis (dešinėje) ir eksperimentinis rezultatas [8] (kairėje), kai galia impulso lygi $100 P_{cr}$,

Aptariant šiuos, vaizduojamus 5 pav. rezultatus, galima pastebėti šiokią tokią modeliavimo rezultatų neatitikimą palyginti su [8] darbo eksperimentiniais matavimais. Tačiau šioje vietoje verta palyginti taip pat ir minėtame straipsnyje naudoto modelio rezultatais (6 pav.). Kaip

matyti, mūsų teoriškai sumodeliuoto kraterio gylis panašus į [8] darbe sumodeliuotą, forma panaši į pusiau plokščio intensyvumo skirstinio (6 b) pav.) suformuotą kraterį, tik su šiek tiek platesniu kraterio dugnu, o apibendrintant, vis dėl to savo forma panašesnis į eksperimentinius rezultatus, nei [8] darbe atlikti modeliniai skaičiavimai.



6 pav. [8] darbe sumodeliuota kraterio abliacija, kai intensyvumo skirstinys Gauso formos (a) ir pusiau plokščias (b).

Eksperimentinis kraterio kontūro plotis didėja, kai tuo tarpu skaitmeniškai sumodeliuoti, tiek šiame darbe, tiek ir aptariamame [8] - lieka pastovus. Šiuos neatitikimus galima paaiškinti tuo, kad po daugelio impulsų sąveikos su medžiaga metu abliacijos slenkstis žemėja dėl sukuriamų defektų periferinėje srityje, bet krateris V formos profilį išlaiko. Anksčiau aprašytas modelis leidžia pakankamai tiksliai atkartoti kraterio formą - pirmaisiais šūviais pastebimas nors ir platus kraterio dugnas, tačiau jis siaurėja, kas atitinka eksperimentinį atvejį. Verta paminėti, kad modeliuojant nebuvo atsižvelgta į kraterio galimai susidariusius defektus, Frenelio atspindžius ir kitus efektus, kurie turi įtakos kraterio profilio formai.

Apibendrinant šiame skyrelyje atliktus tyrimus, galime suformuluoti tokius pagrindinius čia gautus rezultatus: a) naudojant netiesinės Šredingerio lygties sprendinį, aprašantį itin trumpų ir galingų šviesos impulsų sklaidimą skaidrioje terpėje, užrašytas analizinis sprendinys sukeliama medžiagoje temperatūrai dėl daugiafotonės sugerties; b) naudojant gautą temperatūros skirstinį patobulintas elementarus skaidrių medžiagų abliacijos modelis (aprašytas [8] darbe), tokiu būdu pagerinant eksperimente stebimo ir gaunamo modeliuojant abliacijos kraterio kontūrų sutapimą.

4 Difuzijos įtaka skaidrių terpių abliavimo femtosekundiniais impulsais vyksmams

Modeliuojant abliacijos vyksmus ankstesniame skyrelyje nebuvo įskaitytas nei šilumos (temperatūros) kaupimosi efektas (kai abliavimas vyksta impulsų vora), nei svarbūs tokiais atvejais difuzijos vyksmai. Šiame skyriuje pateikiami skaitmeninio lazerio impulsų sukeltos šilumos difuzijos modeliavimo rezultatai, gauti skaitmeniškai baigtinių elementų metodu sprendžiant šilumos difuzijos lygtį nepažeistame medžiagos paviršiuje ir su suformuotu krateriu. Skaitmeniniam difuzijos lygties modeliavimui buvo naudojamas laisvos prieigos FreeFEM++ programinis paketas. Formuluoiant problemą sprendimui variaciniu pavidalu cilindrinėje koordinatinių sistemoje, tariant kad charakteringos difuzijos medžiagoje trukmės yra ilgesnės, nei naudojamo femtosekundinio lazerio impulso trukmė, praėjusiame skyrelyje rastas temperatūros skirstinys (36), kuris buvo imamas kaip pradinė sąlyga difuzijos lygčiai.

Matematiškai sprendžiama problema (difuzijos lygtis) apibrėžtoje erdvėje Ω (esant ribai oras-medžiaga) su kraštinėmis sąlygomis Γ ir pradine sąlyga (36) laiko tarpu $(0,t)$ užrašoma taip:

$$\begin{aligned} r\partial_t T - k\partial_r(r\partial_r T) - k\partial_z(r\partial_z T) &= 0, & \Omega \times (0,t), \\ T(r,z,t=0) &= T_0, \\ k\frac{\partial T}{\partial n} + \alpha(T - T_e) &= 0, & \Gamma \times (0,t), \end{aligned} \tag{38}$$

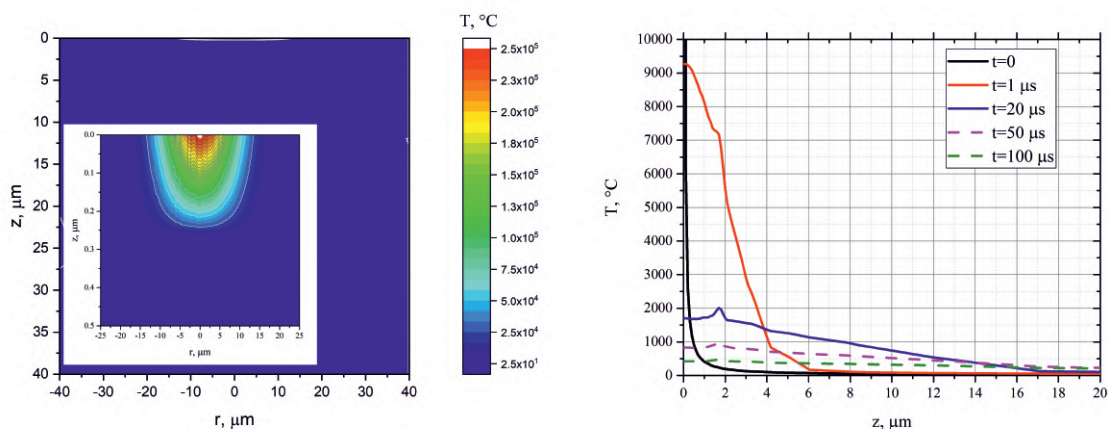
kur $T(r,z,t=0) = T_0 = T(r,z)$. Paskutinė lygtis aprašo kraštinės sąlygas - temperatūros kitimą dėl konvekcijos su oru.

Sekančiuose skyreliuose teoriniai difuzijos stikle ir SiC tyrimo rezultatai buvo gauti naudojant paramentrus, pateiktus 3 skyriaus 1 lentelėje. Kaupinamo impulso maksimali galia pavienių impulsų atveju buvo $60 P_{cr}$, o kaupinant impulsų voromis - $20 P_{cr}$.

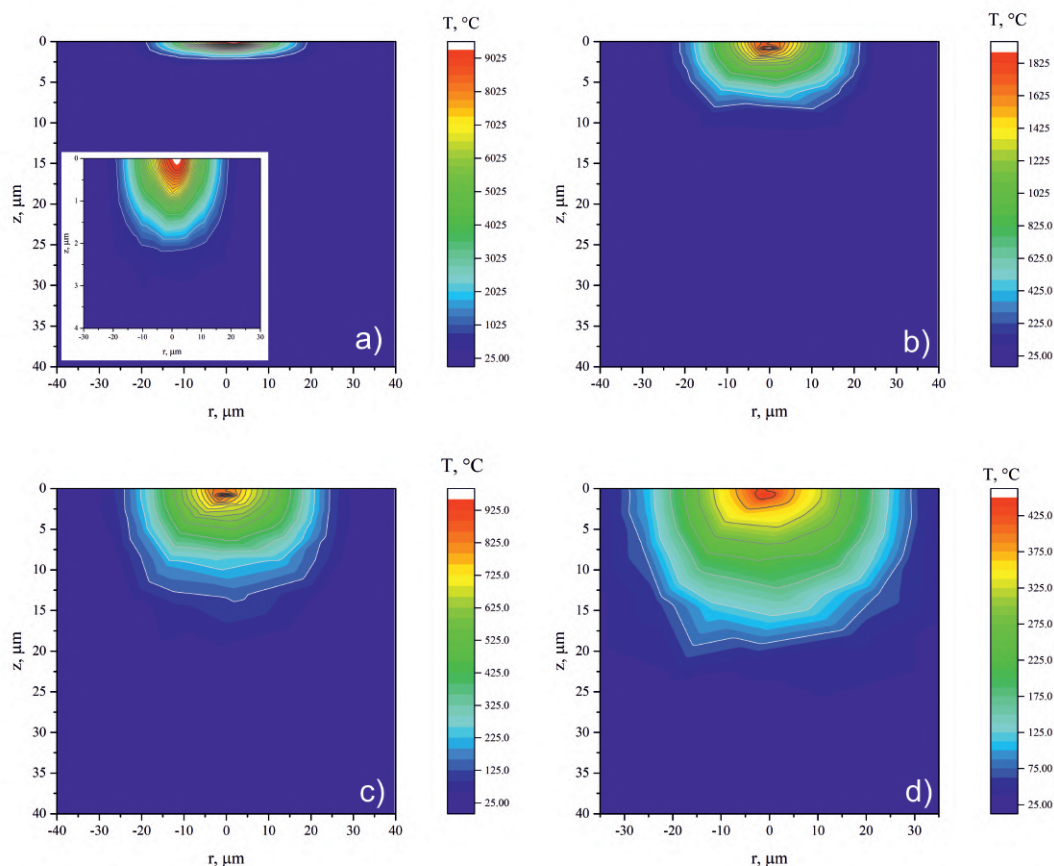
4.1 Šilumos difuzijos modeliavimas stikle

4.1.1 Šilumos difuzijos modeliavimas stikle kaupinant pavieniu impulsu

Šio skyrelio pradžioje informatyvumo dėlei pateikiami lazerinio impulso sukeltos šilumos difuzijos modeliavimo rezultatai kai stiklo paviršius - lygus, be pažeidimų. Temperatūros skirstinys po impulso sąveikos su medžiaga laiko momentu $t=0$ pateiktas 7 paveiksle (kairėje). Kartu (dešinėje paveikslo dalyje) parodytas temperatūros skirstinys z ašyje šaltinio centre ($r=0$) praėjus 1, 20, 50 ir 100 μs . Matyti, kad arti paviršiaus sukuriama milžiniška temperatūra, žymiai viršijanti lydymosi temperatūrą ir sukelianti medžiagos garavimą. Tokiu būdu dalis medžiagos (tiesa, nedideliame gylyje - iki 0,25 μm) yra pašalinama. Žemiau, 8 paveikslėlyje parodyti temperatūros skirstiniai stikle laiko momentais a) 1 μs , b) 20 μs , c) 50 μs , d) 100 μs .



7 pav. Temperatūros skirstiniai stikle, nesant pažeidimo: laiko momentu $t=0$, padidintas in-tarpe (kairėje) ir temperatūros dinamika šaltinio centre - z ašyje, kur $r=0$ (dešinėje) laiko momentais 1, 20, 50 ir 100 μs , kai impulso galia lygi $60 P_{cr}$.



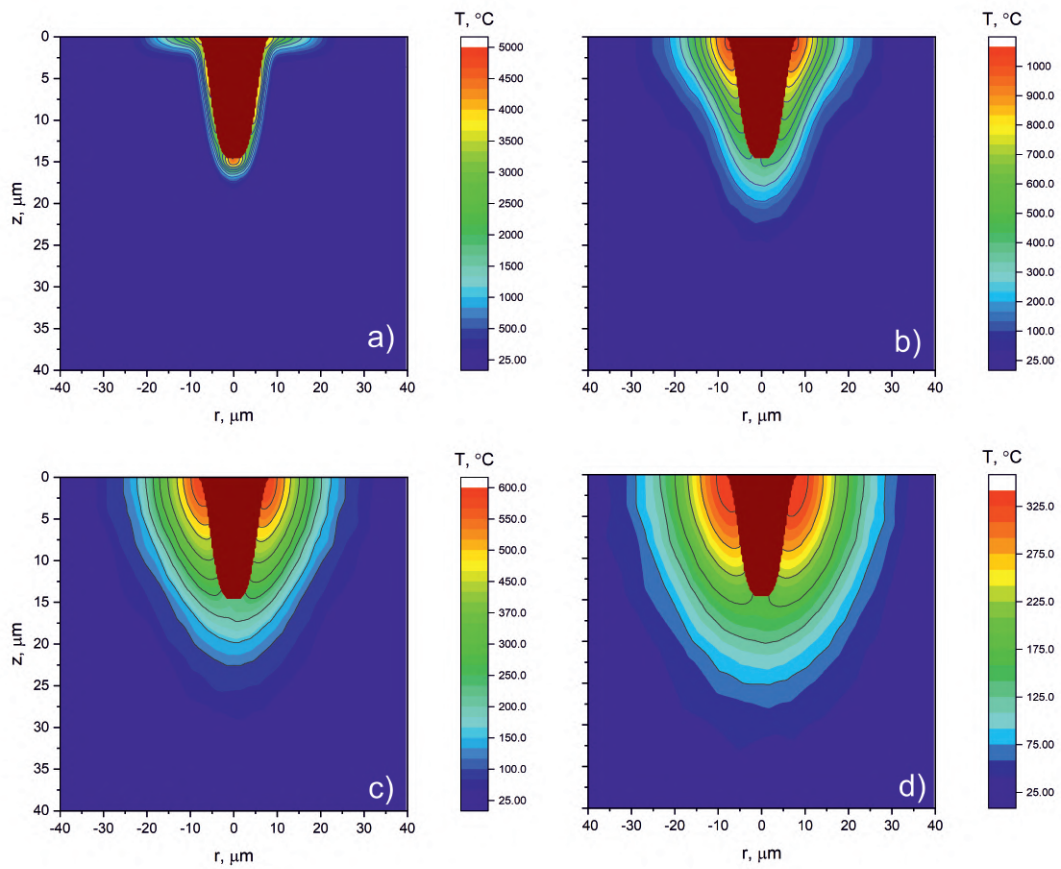
8 pav. Temperatūros skirstiniai stikle, nesant pažeidimo, laiko momentais a) 1 μs , b) 20 μs , c) 50 μs , d) 100 μs , kai impulso galia lygi $60 P_{cr}$.

Apibendrinant šiuos rezultatus, matyti, kad stikle net po 100 μs temperatūra medžiagoje išlieka pakankamai aukšta - apie 200-400 $^{\circ}C$. Todėl darytina išvada, kad pjaunant ar gręžiant

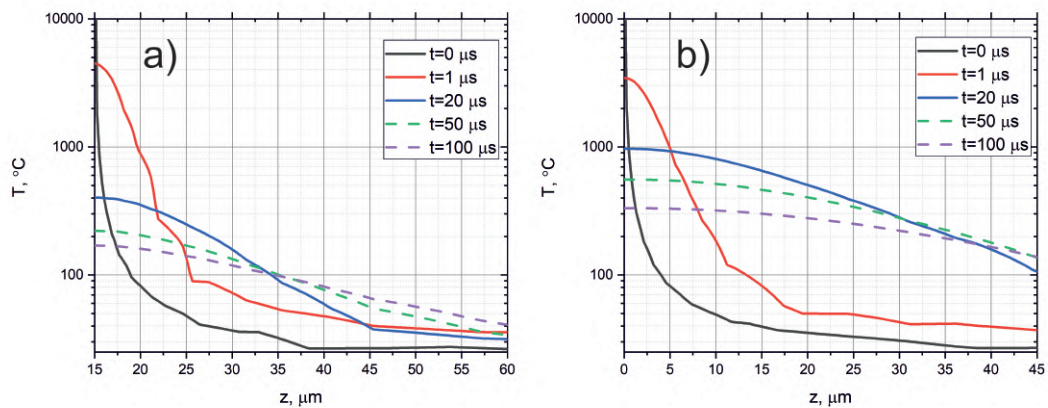
medžiagą dažniu, didesniu nei 10 kHz, neišvengiamai randasi šilumos kaupimasis ir modeliuojant mikrofabrikacinius vyksmus šilumos akumuliaciniai efektai turėtų būti įskaitomi, kai žadinimui naudojami didesnio, nei 10 kHz dažnio impulsų voros.

Siekiant ištirti šilumos difuziją pažeistame stiklo paviršiuje (su suformuotu jame abliacijos krateriu), paprastumo dėlei buvo pasirinktas hipotetinis kraterio kontūras, aprašomas hiper-gauso pavidalo funkcija $a_0 \exp(-x^4/r_0^4)$. Kraterio parametrai čia buvo pasirinkti tokie: kraterio gylis $a_0 = -15 \mu m$, radiusas $r_0 = 6 \mu m$. Tokiu paviršiumi ribojamoje srityje buvo atliktas analogiškas šilumos difuzijos tyrimas. Žadinant impulsu, kurio galia $60 P_{cr}$, buvo veikiamas kraterio sritis. Impulso sukuriama šilumos funkcija kiekviename kraterio taške buvo dauginama iš $\cos(\alpha)$, kur $\alpha = \text{ArcTan}(dz/dr)$ (dz/dr - santykinis kraterio kontūro ilgio pokytis taške r).

Temperatūros skirstiniai skirtingiems vėlinimams (1, 20, 50 ir 100 μs po atskiro impulso sąveikos su krateriu) pateikti 9 paveikslėlyje. Žemiau, 10 paveikslėlyje atskirai pavaizduoti temperatūros skirstiniai centrinėje ($r=0$, paveikslėlio kairėje) ir periferinėje ($r=10 \mu m$ dešinėje) kraterio dalyse. Matyti, kad nemažai šilumos yra sukuriama ne tik kraterio dugne, tačiau ir kraštuose, prie medžiagos paviršiaus. O stebint šilumos difuzijos dinamiką prie paviršiaus (palyginti su tais pačiais vėlinimais stiklo tūryje) matyti kad kraterio dugne (centre) šiluma difunduoja greičiau nei kraštuose: jei po 20 μs centre temperatūra siekia $400^\circ C$, tai kraštuose - apie $1000^\circ C$. Šį efektą galima paaiškinti tuo, kad kraterio kraštuose prie paviršiaus šiluma turi mažiau erdvės difunduoti - ji yra tarsi įkalinta, o šilumos konvekcija (riboje su oru) yra lėtesnė, nei difuzija tūryje. Ir priešingai, kraterio centre, kur šiluma gali būti pernešama praktiškai į visas puses, temperatūros kritimas yra žymesnis. Kadangi kraštuose šiluma difunduoja lėčiau ir gali kauptis, pavyzdžiui, gręžiant didesnio dažnio impulsų voromis, toks šilumos akumuliacinio efektas gali paaiškinti kraterio plėtimąsi prie paviršiaus.



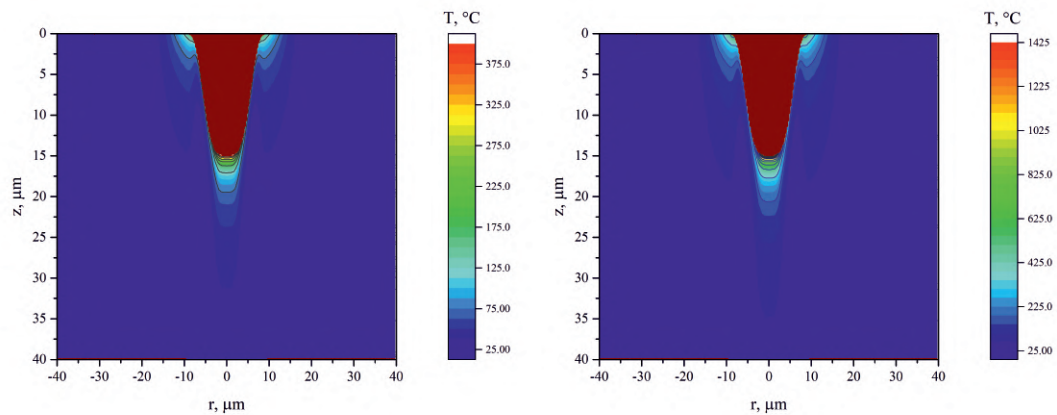
9 pav. Temperatūros skirstinys stikle su suformuotu krateriu laiko momentais a) $1 \mu s$, b) $20 \mu s$, c) $50 \mu s$, d) $100 \mu s$, kai impulso galia lygi $60 P_{cr}$.



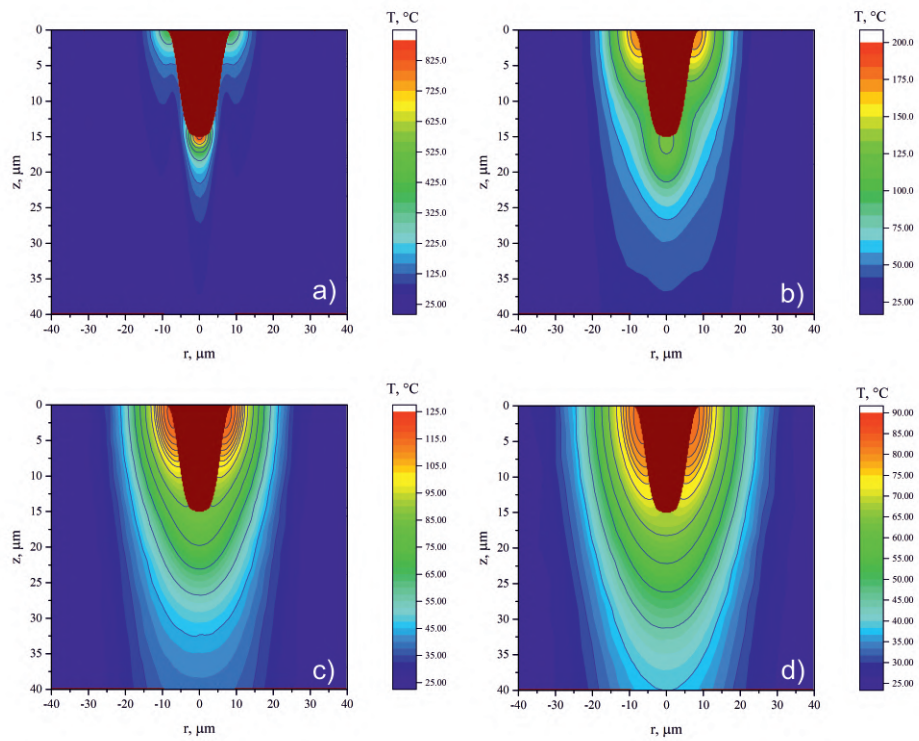
10 pav. Temperatūros skirstinys stikle su suformuotu krateriu z ašyje a) kraterio centre $r=0$ ir b) kraterio krašte $r=10 \mu m$, laiko momentais $1 \mu s$, $20 \mu s$, $50 \mu s$, $100 \mu s$, kai impulso galia lygi $60 P_{cr}$. a) paveikslėlyje z ašis prasideda nuo kraterio dugno, $z=15 \mu m$.

4.1.2 Šilumos difuzijos modeliavimas stikle kaupinant impulsų vorą

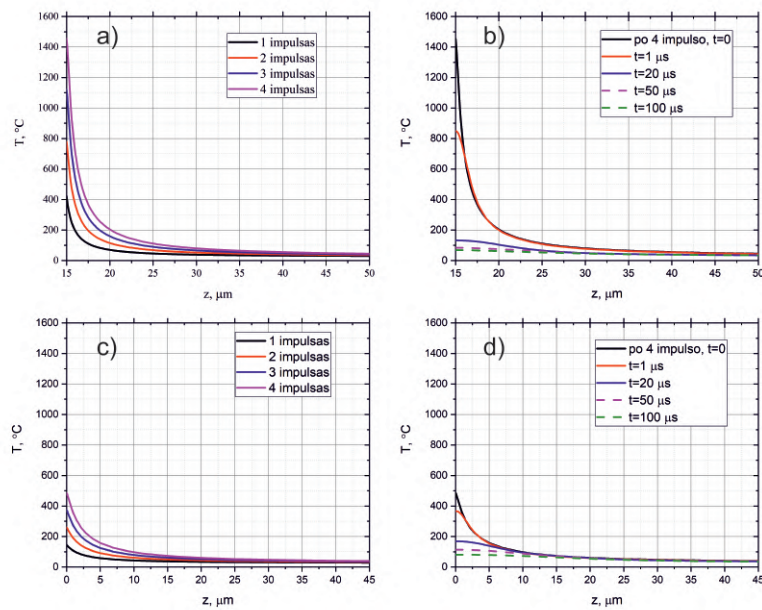
Modeliuojant šilumos difuziją medžiagą veikiant impulsų vorą, kraterio sritis buvo kaupinama keturiais impulsais, nustačius 16 ns vėlinimo tarp impulsų intervalą. Atskiro impulso maksimalią galią imsimė $20 P_{cr}$. Iš 11 paveikslėlyje pateiktų rezultatų, matyti, kad po 4 voros impulsų akumuliuota medžiagoje temperatūra yra apytikriai 4 kartus didesnė nei po pirmojo. Taip yra dėl to, kad stiklo šilumos difuzija yra palyginti lėta, todėl tarp impulsų voroje šiluma praktiškai nedifunduoja ir impulsų voros sukurta temperatūra lygi atskirų impulsų sukurtų temperatūrų sumai. Taip pat verta pastebėti, jog nors čia atskiro impulso maksimali galia paimita 3 kartus mažesnė nei aukščiau aprašytu atveju, tačiau kuriama temperatūra medžiagoje yra mažesnė, dėl mažesnės sugerties, kuri didžia dalimi priklauso nuo impulsų intensyvumo. Temperatūriniai skirstiniai po skirtingų laiko momentų pavaizduoti 12 pav., o gilyje z - 13 pav. Matyti, kad vaizdas čia panašus kaip vieno šūvio atveju: kraterio kraštuose prie paviršiaus lieka šilumos sankaupos sritys, tačiau su žemesne temperatūra. Kadangi lazerinio impulso periferijoje intensyvumas mažesnis, išeina, kad mažiau yra ir sugerama. Tai leidžia parinkti tokius parametrus, kad kraterio kraštuose sugertos ir sukauptos šilumos kiekis būtų minimalus, taip sumažinant įtaką galimam kraterio plėtimuisi.



11 pav. Temperatūros skirstinys stikle su suformuotu krateriu po 1 (kairėje) ir 4 (dešinėje) impulsų, kai atskiro voros impulso galia lygi $20 P_{cr}$.



12 pav. Temperatūros skirstinys stikle su suformuotu krateriu po 4 voros impulso, laiko momentais a) $1 \mu s$, b) $20 \mu s$, c) $50 \mu s$, d) $100 \mu s$, kai atskiro voros impulso galia lygi $20 P_{cr}$.

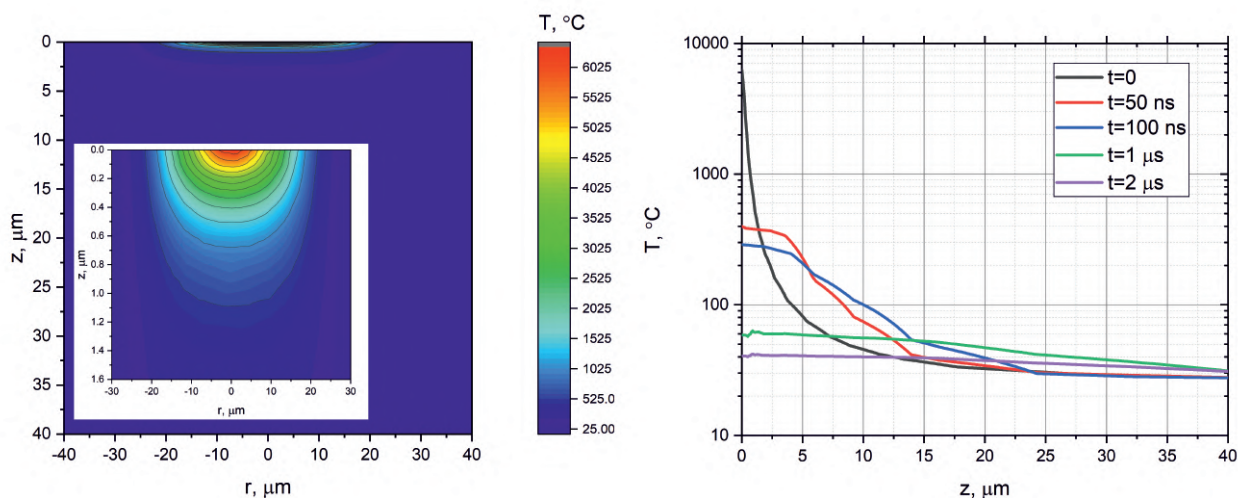


13 pav. Temperatūros skirstinys stikle su suformuotu krateriu z ašyje a) kraterio centre $r=0$ po kiekvieno impulso, b) kraterio centre $r=0$ po 4 voros impulso atitinkamais laiko momentais, c) kraterio krašte $r=10 \mu m$ po kiekvieno impulso, d) kraterio krašte $r=10 \mu m$ po 4 voros impulso atitinkamais laiko momentais, kai atskiro impulso galia lygi $20 P_{cr}$. a) ir b) paveikslėliuose z ašis prasideda nuo kraterio dugno, $z=15 \mu m$.

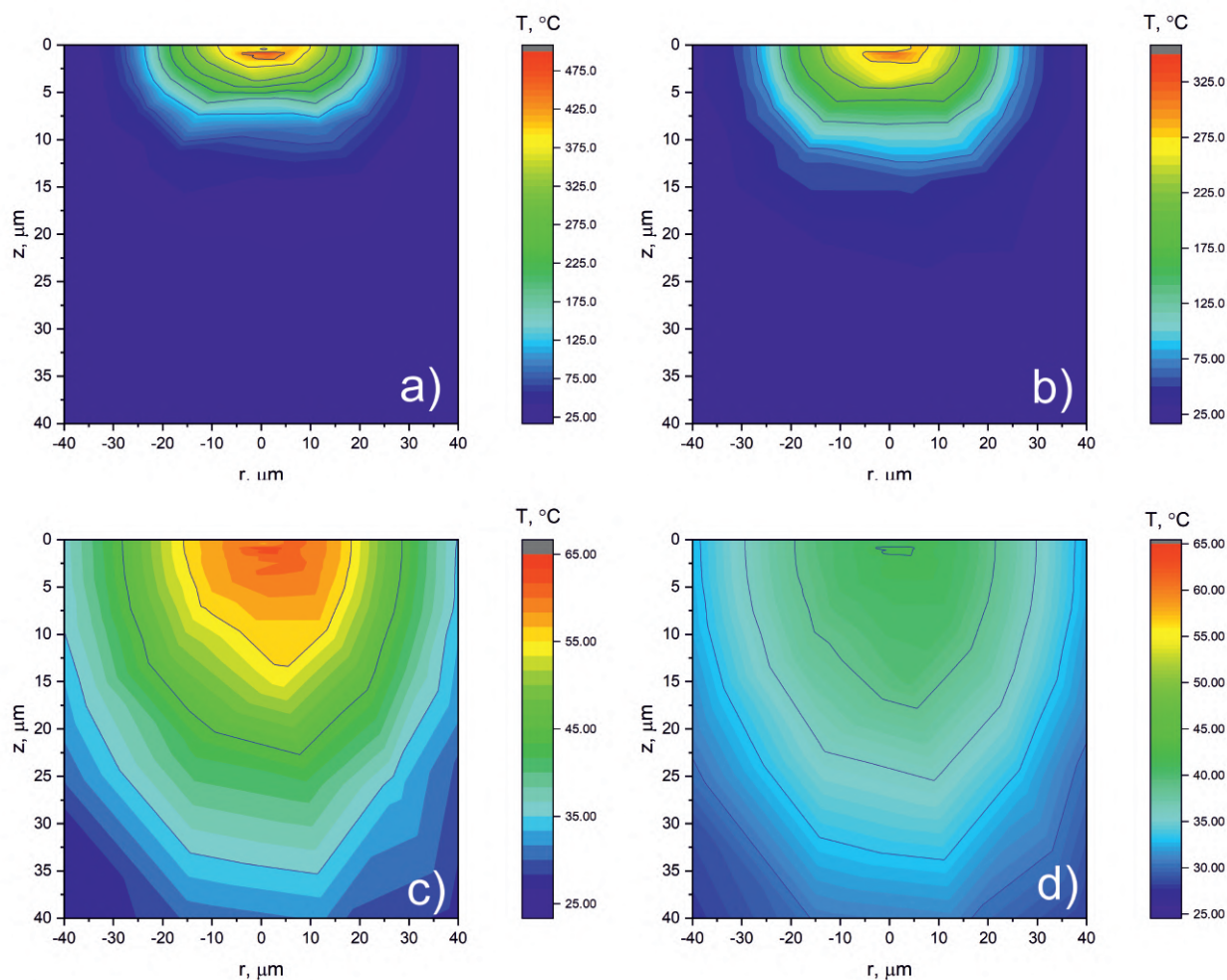
4.2 Šilumos difuzijos modeliavimas silicio karbide

4.2.1 Šilumos difuzijos modeliavimas silicio karbide kaupinant pavieniu impulsu

Kaip pastebėjome, šilumos difuzija stikle labai lėta, kad praktiškai galime jos nepaisyti. Tačiau, yra medžiagų, pavyzdžiui SiC, kurio difuzijos koeficientas yra didelis ir ši medžiaga būtent dėl to yra patraukli aukštos galios prietaisų taikyme. Šioje medžiagoje šilumos difuzija, sukelta lazerinės spinduliuotės, buvo tiriama analogiškai praeitame skyrelyje tirtam stiklui. Rezultatas, po medžiagos paviršiaus sąveikos su $60 P_{cr}$ galios impulsu, laiko momentu $t=0$, pateiktas 14 pav (kairėje) bei temperatūros pasiskirstymas medžiagos gylyje z ties $r=0$ (dešinėje). Matyti, kad sukuriama maždaug 6 tūkst. $^{\circ}C$ temperatūra, su galimybe išabliuoti apie $0,3 \mu m$ gylio kraterį, turint omenyje, kad SiC lydimosi temperatūra apie $2700^{\circ}C$. Toliau kartu pateikiami temperatūros skirstiniai po 50, 100, 1000, 2000 ns (15 pav.). Silicio karbide jau pastebima šilumos difuzija - po 50 ns po impulso, temperatūra medžiagoje sumažėja kiek daugiau nei 10 kartų, tuo tarpu po $2 \mu s$ medžiagos temperatūra poveikio zonoje praktiškai susilygina su aplinkos temperatūra, kas leidžia apdirbti medžiagą dideliais dažniais, taip pagreitinant apdirbimo procesą.

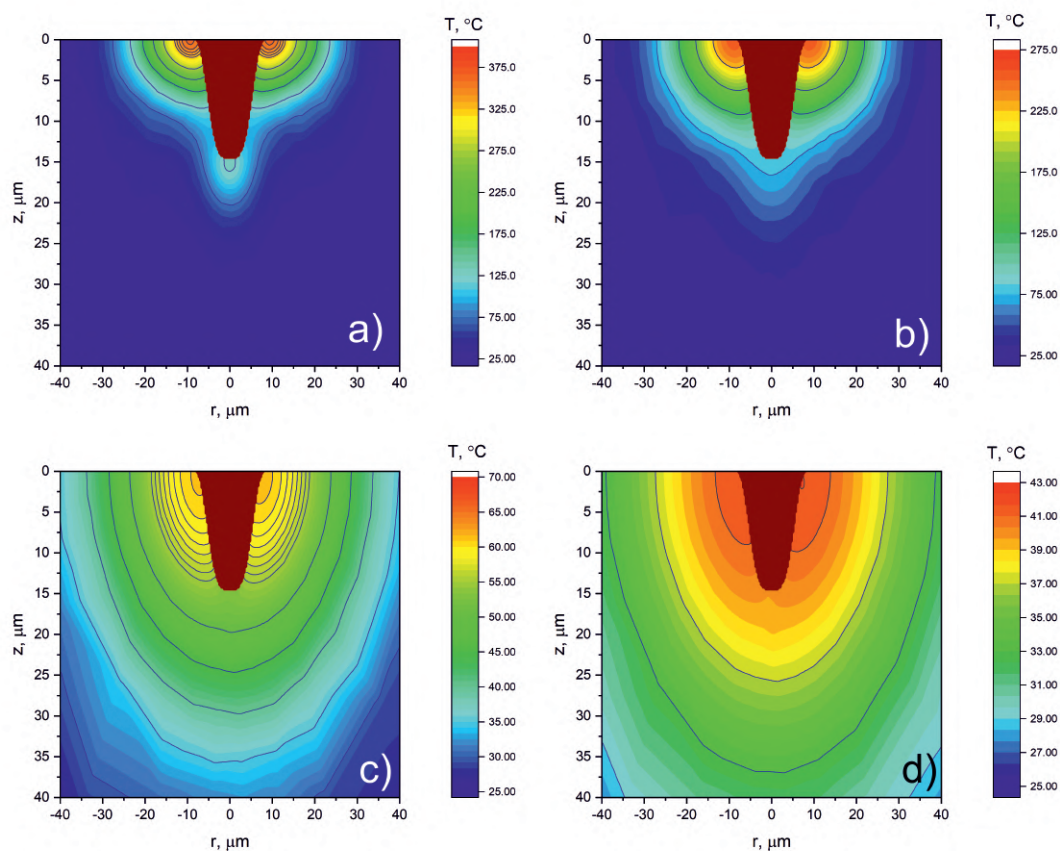


14 pav. Temperatūros skirstiniai SiC, nesant pažeidimo: laiko momentu $t=0$, padidintas intarpe (kairėje), ir temperatūros dinamika šaltinio centre - z ašyje, kur $r=0$ (dešinėje) laiko momentais 50, 100, 1000 ir 2000 ns, kai impulslo galia lygi $60 P_{cr}$.

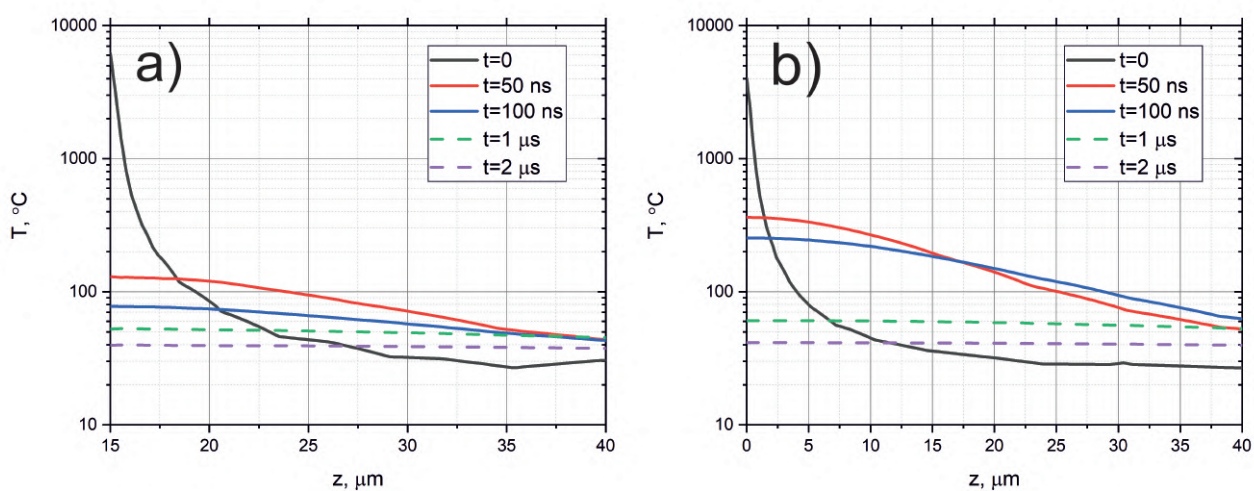


15 pav. Temperatūros skirstiniai SiC, nesant pažeidimo, laiko momentais a) 50 ns, b) 100 ns, c) 1000 ns, d) 2000 ns, kai impulso galia lygi $60 P_{cr}$.

Toliau, kaip ir modeliuojant difuziją stikle, buvo paimtas toks pat krateris, ir modeliuota šilumos difuzija jame. Iš temperatūros skirstinių skirtingais laiko momentais 16 ir 17 pav., skirtingai nei stikle, jau matosi šilumos difuzijos skirtumas tarp šilumos, sukurtos paviršiuje ir krateryje. Krateryje centrinėje dalyje šiluma difunduoja greičiau nei paviršiuje - po 50 ns kraterio dugne lieka $150\text{ }^{\circ}\text{C}$, kai tuo tarpu paviršiuje apie 2,5 karto daugiau. Tą galima interpretuoti panašiai kaip ir stiklo atveju, tik mažesnėje laiko skalėje - kraterio dugne šiluma turi didesnę erdvę su dideliu temperatūriniu gradientu ir gali laisviau difunduoti, priešingai nei paviršiuje. Iš šių rezultatų pastebimas toks pat efektas kaip ir anksčiau, modeliuotas stikle - šiluma lėčiau difunduoja kraterio kraštuose prie paviršiaus, tačiau medžiagai su greita difuzija tai gali turėti mažai įtakos, nes jau po $1\text{ }\mu\text{s}$ temperatūra lieka vos didesnė nei kambario (17 c) pav.).



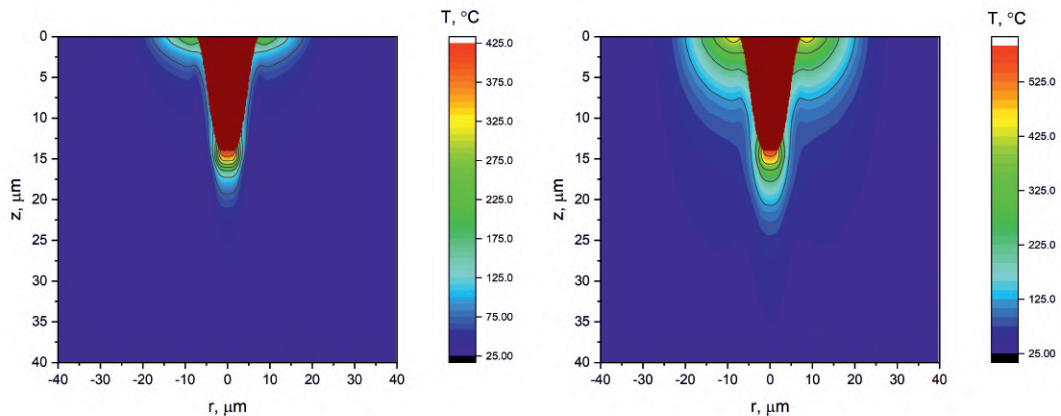
16 pav. Temperatūros skirstinys SiC su suformuotu krateriu laiko momentais a) 50 ns, b) 100 ns, c) 1000 ns, d) 2000 ns, kai impulso galia lygi $60 P_{cr}$.



17 pav. Temperatūros skirstinys SiC su suformuotu krateriu z ašyje a) kraterio centre $r=0$, b) kraterio krašte ties $r=10$ μm atitinkamais laiko momentais, kai impulso galia lygi $60 P_{cr}$. a) paveikslėlyje z ašis prasideda nuo kraterio dugno, $z=15$ μm .

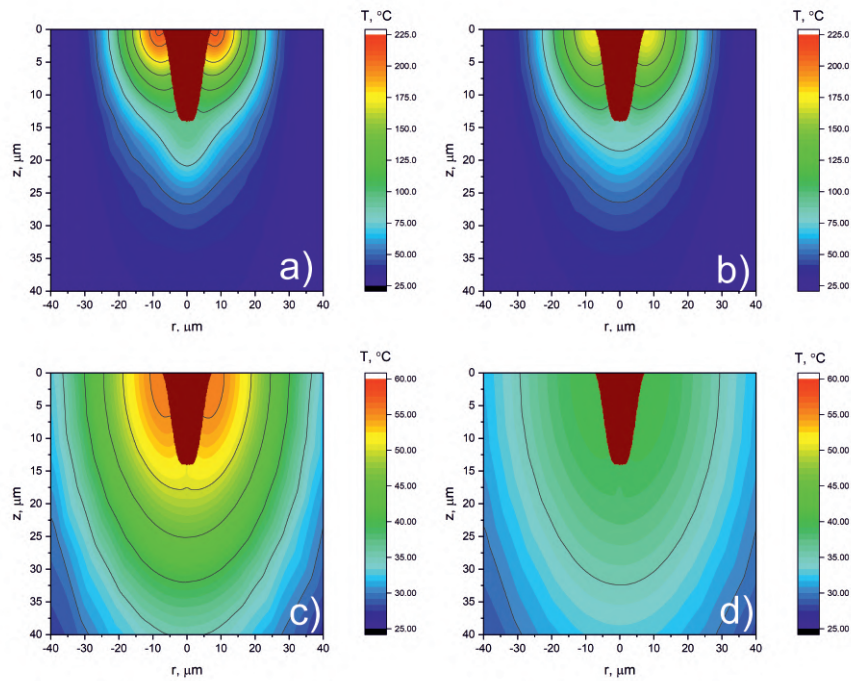
4.2.2 Šilumos difuzijos modeliavimas silicio karbide kaupinant impulsų vorą

Sumodeliavus keturių impulsų vorą su 16 ns vėlinimu tarp impulsų, kai vieno voros impulso galia $20 P_{cr}$, pastebėta, kad vėlinimas pakankamai didelis, kad šilumos difuzija turėtų įtaką. Po pirmojo impulso temperatūra siekia apie $400\text{ }^{\circ}\text{C}$, tuo tarpu po ketvirtojo - tik $550\text{ }^{\circ}\text{C}$ (18 pav.). Tai reiškia, tarp impulsų didžioji dalis šilumos spėja išsisklaidyti ir dėl to naudoti impulsų voras su mažomis atskirų impulsų galiomis ir tokiu vėlinimu galbūt nėra optimalus variantas - reiktų mažinti vėlinimą tarp impulsų. Iš temperatūros skirstinių laikinės dinamikos (19, 20 pav.) matyti, kad kaip ir stikle, kraterio kraštai difunduoja maždaug dvigubai lėčiau nei dugnas, tačiau kadangi difuzija apskritai greita, tai daro mažesnę įtaką, nei medžiagose su lėta difuzija. Norint tinkamai išnaudoti šilumos akumuliacinius efektus, galima naudoti impulsų voras, sudarytas iš atskirų silpnesnių impulsų taip sumažinant šiluminės akumuliacijos reiškinį kraterio kraštuose.

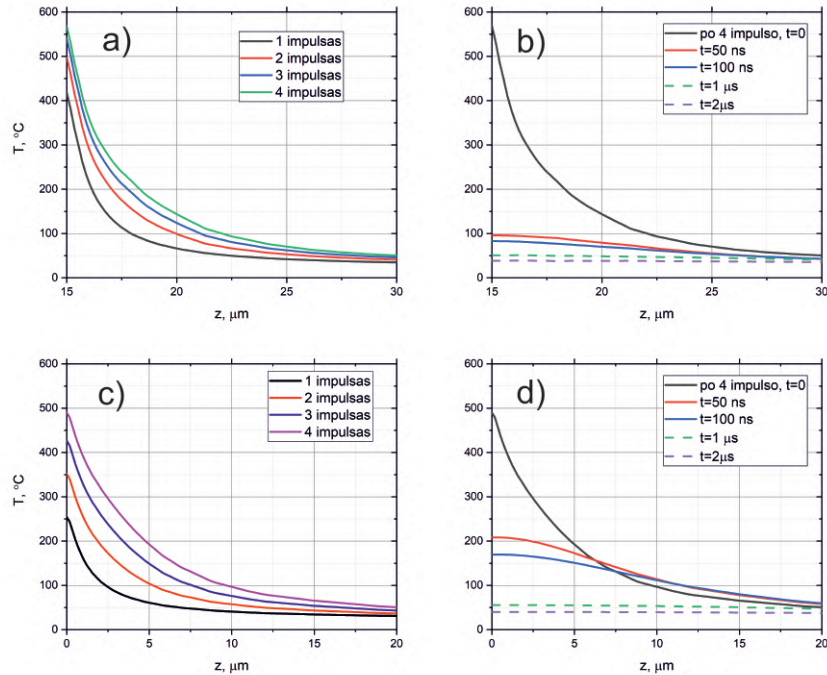


18 pav. Temperatūros skirstinys SiC su suformuotu krateriu po 1 voros impulso (kairėje) ir po 4 voros impulso (dešinėje), kai vieno atskiro voros impulso galia lygi $20 P_{cr}$.

Apibendrinant rezultatus galima teigti, jog modeliuojant medžiagoje sukauptą šilumą dėl daugiafotonės sugerties, buvo parodyta šilumos difuzijos įtaka abliacijos procesui - šie rezultatai leidžia įvertinti reikiamus lazerio parametrus mikroapdirbimui bei parodo, jog modeliuojant lazerinės abliacijos procesus, verta įskaityti šilumos difuziją, ko dažnai yra atsisakoma. Taip pat pastebėtas šilumos kaupimasis kraterio kraštuose prie paviršiaus paaiškina kraterio plėtimą gręžimo metu. Iš šių rezultatų matyti, jog naudojant impulsų voras, kurių atskirų impulsų galios yra mažesnės nei pavienio, galima patikimiau kontroliuoti šilumos akumuliacinius efektus, tačiau reikia turėti omenyje, kad dėl to krenta efektyvumas - mažesnio intensyvumo spinduliuotė yra mažiau sugerama, todėl išgaunama mažiau naudingos spinduliuotės galios, kuri yra sugeriama. Nepaisant to, lazeriniai šaltiniai, gebantys generuoti impulsų voras, gali būti patrauklūs, siekiant padidinti lazerinio mikroapdirbimo efektyvumą. Impulsų vorų generacija leidžia sumažinti reikiamas impulsų energijas, dėl ko galima naudoti silpnesnius lazerinius šaltinius, kurių kainos paprastai būna mažesnės.



19 pav. Temperatūros skirstinys SiC su suformuotu krateriu laiko momentais a) 50 ns, b) 100 ns, c) 1000 ns, d) 2000 ns, kai vieno atskiro voros impulso galia lygi $20 P_{cr}$.



20 pav. Temperatūros skirstinys SiC su suformuotu krateriu ašyje z a) kraterio centre $r=0$ po kiekvieno impulso, b) kraterio centre $r=0$ po 4 voros impulso atitinkamais laiko momentais, c) kraterio krašte $r=10 \mu m$ po kiekvieno impulso, d) kraterio krašte $r=10 \mu m$ po 4 voros impulso atitinkamais laiko momentais, kai atskiro impulso galia lygi $20 P_{cr}$. a) ir b) paveikslėliuose z ašis prasideda nuo kraterio dugno, $z=15 \mu m$.

5 Pagrindiniai rezultatai ir jų aptarimas

1. Taikant pagrįstus artinius netiesinėje Šredingerio lgytyje, užrašyta analizinė itin galin-gais femtosekundiniais impulsais sklaidrioje medžiagoje (dėl daugiafotobės sugerties) sukeltamos temperatūros skirstinio analizinė išraiška. Šio rezultato pagrindu, remiantis pasikartojančiais lazerinių impulsų sukuriama (kritinės medžiagos abliacijai) temperatūros kontūro analize, buvo patobulintas pusiauempirinis skaidrios medžiagos abliacijos modelis.

2. Sumodeliuotas naudojant sukurtą teorinį modelį abliacijos krateris stikle palygintas su [8] darbe gautais teoriniais ir eksperimentiniais rezultatais. Pastebėtas geresnis sutapimas su eksperimente išabliuota kraterio forma. Tačiau ir čia liko nepaaiškinta platesnė kraterio dalis arti paviršiaus. Geresnio atitikimo, galima būtų tikėtis teoriniame modelyje įskaičius: a) tiesinę sugertį dėl paviršinių būsenu; b) įskaičius šilumos difuziją, kuri yra apribota paviršiuje šalia kraterio (žr. rezultatus žemiau).

3. Baigtinių elementų metodais (pradine sąlyga imant analizinę temperatūros skirstinio išraišką) skaitmeniškai modeliuojant šilumos difuzija badinyje su nepažeistu paviršiumi ir ban-dinyje su suformuotu abliacijos krateriu pastebėta: a) medžiagose su dideliu difuzijos koeficientu (SiC), šilumos kaupimosi (akumuliacijos) efektai yra nežymūs, nes po keliasdešimt nanosekun-džių didžioji dalis šilumos yra išsisklaidžiusi iš paveiktos srities. b) medžiagose su mažesniu difuzijos koeficientu (pvz. stikle jis yra apie 1000 kartų mažesnis, nei SiC) modeliuojant reiktų atsižvelgti į šilumos akumuliacinius reiškinius.

4. Modeliuojant šilumos difuziją krateryje pastebėta, kad kraterio kraštuose prie pavir-šiaus šiluma difunduoja žymiai lėčiau, nei kraterio dugne. Pastebėtas efektas, gali turėti įtakos stebimam eksperimentuose kraterio plėtimuisi prie paviršiaus lazerinės abliacijos metu. Kont-roliuoti (sumažinti) šį akumuliacinį efektą, galima naudojant mažesnės galios impulsų voras su atitinkamu (šilumos difuzijos spartai) vėlinimu. Tačiau tokiu atveju krenta energinis abliacijos efektyvumas - mažesnio intensyvumo spinduliuotė yra santykinai mažiau sugerama. Tačiau, lazeriniai šaltiniai, generuojantys impulsų voras, gali būti patrauklūs lazerinio mikroapdirbimo panaudojimui dėl mažesnės kainos.

Išvados

Šio darbo metu rastas dėl daugiafotonės sugerties sugeriamas galios skirstinys - pritaikius tolydžios bangos artinį buvo išspręsta netiesinė Šredingerio lygtis, atmetant difrakcijos ir netiesinio lūžio rodiklio moduliacijos įtaką, dėl mažo jų indėlio. Gauta lygtis sunormuota į impulso kritinę galią, o pasinaudojus galios, energijos ir temperatūros sąryšiais rastas temperatūrinis šilumos skirstinys. Naudojant šį šilumos skirstinį sumodeliuotas paviršiaus abliacijos procesas stikle ir palygintas su kitų darbų eksperimentiniais bei teoriniais rezultatais. Su nedideliais neatitinkamais mūsų sukurtas modelis pakankamai tiksliai atitinka formuojamo kraterio profilį bei patobulina [8] darbe naudotą teorinį modelį. Aptariant gautus rezultatus padaryta išvada, kad sukurtas modelis gali būti pagerintas, taigi ir sutapimas su eksperimentu būtų geresnis, jei: a) ieškant analizinės kuriamo medžiagoje šilumos šaltinio išraiškos būtų įskaityta tiesinė spinduliuotės sugertis arti bandinio paviršiaus; b) įskaitytas šilumos akumuliacijos efektą tarp sekančių (vienas kitą) impulsų.

Skaitmeniškai sprendžiant šilumos difuzijos lygtį baigtiniu elementų metodu su artimomis realiam elementui kraštinėmis ir pradine sąlygomis, buvo įvertintas šilumos kaupimosi ir difuzijos poveikis atskirais atvejais: femtosekundiniais impulsais ir jų voromis veikiant medžiagos paviršių be pažeidimų bei su suformuotu tariamu abliacijos krateriu. Pastebėtas šilumos kaupimasis kraterio kraštuose prie paviršiaus, galintis būti viena iš papildomų kraterio plėtimosi priežasčių lazerinio gręžimo metu. Taip pat, naudojant impulsų voras galima patikimiau kontroliuoti šilumos akumuliacinius efektus, tačiau silpnesnių voros impulsų efektyvumas mažesnis, kadangi sugertis smarkiai priklauso nuo intensyvumo. Įvertinus skirtumus tarp šilumos difuzijos stikle ir SiC, darytina išvada, kad modeliuojant lazerinio mikroapdirbimo procesus šilumos difuzijos įtaką svarbu įskaityti medžiagose tiek su aukštu, tiek ir žemu difuzijos koeficientu. Pirmuoju atveju svarbu parinkti tinkamą impulsų sekos dažnį, norint efektyviau išnaudoti sugertą medžiagoje spinduliuotės energiją, o antruoju - vertinant galimą energijos kaupimosi įtaką abliacijos kraterio (ar medžiagos graviravimo) kontūriui.

Literatūros sąrašas

- [1] B. Saleh, T. Malvin, *Fundamentals Of Photonics* (Wiley-Interscience, 1991).
- [2] R. Wood, *Laser-Induced Damage of Optical Materials* (CRC Press, 2003).
- [3] S. Nolte, M. Will, M. Augustin, P. Triebel, K. Zoellner, A. Tuennermann, Cutting of optical materials by using femtosecond pulses, Proc. SPIE Conf. (4440), 152–160 (2001).
- [4] V. Kononenko, V. Pashinin, M. Komlenok, V. Konov, Laser-induced modification of bulk fused silica by femtosecond pulses, Laser Phys. **19**(6), 1294–1299 (2009).
- [5] K. Davis, K. Miura, N. Sugimoto, K. Hirao, Writing waveguides in glass with a femtosecond laser, Opt. Lett. **21**(21), 1729–1731 (1996).
- [6] L. Sudrie, M. Franco, B. Prade, A. Mysyrowicz, Study of damage in fused silica induced by ultra-short ir laser pulses, Opt. Commun. **191**(3-6), 333–339 (2001).
- [7] E. Glezer, M. Milosavljevic, L. Huang, R. Finlay, T. Her, J. Callan, E. Mazur, Three-dimensional optical storage inside transparent materials, Opt. Lett. **21**(24), 2023–2025 (1996).
- [8] S. Butkus, E. Gaižauskas, L. Mačernytė, V. Jukna, D. Paipulas, V. Sirutkaitis, Femtosecond beam transformation effects in water, enabling increased throughput micromachining in transparent materials, Appl. Sci. **9**, 2405 (2019).
- [9] J. Lukošiusas, *Lazerinio mikrofabrikavimo sukeltos šilumos difuzijos ir šiluminių įtempių SiC modeliavimas*, Mokslo tiriamasis darbas, Vilniaus Universitetas (2019).
- [10] J. Lukošiusas, *Lazerinio kaitinimo sukeltos šilumos difuzijos modeliavimas*, Mokslinė tiriamoji praktika, Vilniaus Universitetas (2020).
- [11] S. Goldstein, Some two-dimensional diffusion problems with circular symmetry, P. Lond. Math. Soc. **34**, 51–88 (1932).
- [12] F. Periago, A first step towards variational methods in engineering, International Journal of Mathematical Education in Science and Technology **34**, 549–559 (2003).
- [13] B. Lucquin-Desreux, *Computational Methods and Algorithms*, volume 1 (Eolss, 2009).
- [14] E. Gaižauskas, Filamentation versus optical breakdown in bulk transparent media, in *3D Laser Microfabrication: Principles and Applications* (2006), 109–138.
- [15] A. Dubietis, E. Gaižauskas, G. Tamošauskas, P. D. Trapani, Light filaments without self-channeling, Phys. Rev. Lett. **92**(25), 253903 (2004).

- [16] S. Karazi, I. Ahad, K. Benyounis, *Laser micromachining for transparent materials*, Elsevier 11 (2017).
- [17] A. Couairon, E. Gaižauskas, D. Faccio, A. Dubietis, P. D. Trapani, Nonlinear x-wave formation by femtosecond filamentation in kerr media, *Phys. Rev.* **73**, 4 (2006).
- [18] J. R. O'Connor, J. Smiltens, *Silicon carbide, a high temperature semiconductor* (Pergamon Press, 1960).
- [19] Y. Goldberg, M. Levinshtein, S. Rumyantsev, *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe* (John Wiley & Sons, Inc, 2001).
- [20] A. G. de Mesquita, Refinement of the crystal structure of sic type 6h, *Acta Crystallographica* 610 (1967).
- [21] Y. M. Tairov, V. Tsvetkov, *Handbook Of Electrotechnical Materials*, volume 3 (Energomas-hizdat, 1988).

TEORINIAI LAZERINIO MIKROFABRIKAVIMO VYKSMŲ MODELIAI

Santrauka

Pastaruoju metu prie ypač sparčiai besivystančių ir reikšmingų ūkiui sričių reiktų priskirti lazerinį medžiagų apdirbimą naudojant itin trumpus (pikosekundžių ir femtosekundžių trukmės impulsus). Toks apdirbimo būdas leidžia minimizuoti paviršinius pažeidimus pjaustant, ar efektyviai kontroliuoti susidarančius tūrinius defektus taip sudarant įvairias struktūras.

Šiame darbe, naudojant ankstesniais magistrinių studijų mokslo tiriamųjų darbų metu sukauptomis žiniomis ir įgūdžiais siekta sukurti adekvatų medžiagos abliacijos femtosekundiniais impulsais modelį ir įvertinti difuzijos poveikį. Konkrečiai, nustatyti femtosekundinės lazerinės spinduliuotės medžiagoje sukeltą šilumos skirstinį, jį naudojant iširti medžiagos paviršiaus abliavimo vyksmus (rasti grėžiamo kraterio profilį) ir įvertinti šilumos kaupimosi ir difuzijos poveikį abliuojamoje medžiagoje. Dėl daugiafotonės sugerties sukeltas šilumos (temperatūros) skirstinys buvo rastas, pritaikius tolydžios bangos artinį netiesinėje Šredingerio lygtyje ir neatsižvelgiant joje į difrakcijos narius bei savaiminio fokusavimąsi. Remiantis rasta skirstinio analize išraiška buvo modeliuojami medžiagos abliacijos vyksmai stikle ir silicio karbide. Modeliuojant kraterio formą po kiekvieno sekančio šūvio, naujas kraterio kontūras buvo randamas, atsižvelgiant į sukurtą šūviu medžiagoje sugertą šilumos kiekį (temperatūrą). Gautas rezultatas, modeliuojant tokiu būdu palyginti su anksčiau taikytu pusiau-empiriniu modeliu, parodė geresnį sutapimą su eksperimento rezultatais.

Skaitmeniškai sprendžiant šilumos difuzijos lygtį baigtiniu elementų metodu su artimomis realiam eksperimentui kraštinėmis ir pradine sąlygomis, buvo įvertintas šilumos kaupimosi ir difuzijos poveikis stikle bei SiC atskirais atvejais: kaupinanant femtosekundiniais impulsais ir jų voromis nesant medžiagos paviršiaus pažeidimų, bei su suformuotu tariamu abliacijos krateriu. Pastebėtas šilumos kaupimasis suformuoto kraterio kraštuose paviršiuje stikle, kurio šilumos difuzijos koeficientas yra trimis eilėmis (t.y apie 10^3 kartų) mažesnis, nei SiC. Šis efektas gali būti viena iš kraterio plėtimosi, stebimo lazerinio grėžimo metu, priežasčių. Pažymėtina, kad kontroliuoti (sumažinti) akumuliacinius efektus lazerinio mikroapdirbimo metu galima naudojant mažesnės galios impulsų voras su atitinkamu (šilumos difuzijos spartai) vėlinimu. Tačiau, tokiu atveju krenta energinis abliacijos efektyvumas - mažesnio intensyvumo spinduliuotė yra santykinai mažiau sugerama. Vis dėlto, lazeriniai šaltiniai, generuojantys impulsų voras, gali būti patrauklūs naudoti lazeriniam mikroapdirbui dėl mažesnės jų kainos.

TEORETICAL MODELS OF LASER MICROFABRICATION PROCESSES

Summary

Laser micromachining using ultrashort (pico and femtosecond) pulses is one of the most rapidly growing and economically significant areas. This kind of machining allows to minimize surface damage during cutting and effectively control volume defects, thus forming various structures.

In this work, by using knowledge and skills gained from previous works during master's study program, the aim was to make an adequate model of laser ablation with femtosecond pulses and evaluate the effect of heat diffusion. Specifically, to determine the heat distribution induced by femtosecond laser radiation in the material, to study the surface ablation processes of the material (to find the profile of the drilled crater) and to evaluate the effect of heat accumulation and diffusion in the material. The heat (temperature) distribution caused by multiphoton absorption was found by applying a continuous-wave approximation in the nonlinear Schrödinger equation without taking into account the diffraction terms and self-focusing. Based on the analytical expression of the distribution found, the ablation processes of the material in glass and silicon carbide were modeled. By modeling the shape of the crater after each subsequent shot, a new crater contour was found based on the amount of heat (temperature) absorbed by the shot in the material. The obtained result, modeling in this way compared to the previously applied semi-empirical model, showed a better agreement with the experimental results.

Numerically solving the heat diffusion equation by the finite element method with near-experimental boundary and initial conditions, the effects of heat accumulation and diffusion in glass and SiC were evaluated in individual cases: pumping by femtosecond pulses and their bursts in the absence of material surface damage and with hypothetically formed ablation crater. Heat accumulation was observed at the edges of the formed crater near the surface of the glass, which has a heat diffusion coefficient three orders of magnitude (about 10^3 times) lower than SiC. This effect may be one of the reasons for the crater expansion observed during laser drilling. It is noted that the accumulation effects during laser micromachining can be controlled (reduced) by using lower power pulses burst with a corresponding (to thermal diffusion rate) delay. However, in this case, the energy efficiency of ablation decreases - less intense radiation is relatively less absorbed. However, laser sources that generate burst of pulses may be attractive to use for laser micromachining due to their lower cost.