

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ОПТОАКУСТИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ В АЛЮМИНИИ И КРЕМНИИ

© 2011 г. О. Н. Королева\*, канд. физ.-мат. наук, А. В. Мажукин\*\*

\* Московский гуманитарный университет, Москва

\*\* Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва

E-mail: koroleva.on@mail.ru, specimen@modhef.ru

Методами математического моделирования проведен сравнительный анализ оптоакустического отклика на короткоимпульсное лазерное воздействие умеренной интенсивности на алюминий и кремний. Рассмотрены режимы воздействия, близкие к экспериментальным данным, когда использовались лазерные импульсы одинаковой длительности  $3 \times 10^{-9}$  с, интенсивность которых менялась в пределах  $10^7$ – $10^{10}$  Вт/см<sup>2</sup>.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, оптоакустика, лазерное воздействие, динамическая адаптация.

Коды OCIS: 350.3390, 320.4240, 350.5340

Поступила в редакцию 18.02.2011

### Введение

Бурное развитие лазерных технологий в различных областях обработки и создания новых материалов в последние десятилетия привлекает внимание к исследованию процессов, протекающих в зоне лазерного воздействия и к основному средству такого исследования – оптоакустической диагностике [1–4]. Оптоакустическая диагностика является точным и чувствительным способом всестороннего описания динамики протекающих процессов. Наибольший интерес для лазерных технологий представляет импульсное лазерное воздействие умеренной интенсивности ( $G \leq 10^{10}$  Вт/см<sup>2</sup>). Действие лазерного излучения на поглощающие конденсированные среды сопровождается генерацией импульсов давления, несущих информацию о характере процессов в зоне облучения. В основе оптоакустики лежит измерение акустических полей, возбуждаемых лазерным воздействием в конденсированных средах. Измерение акустических сигналов в рамках одномерной по пространству модели сводится к регистрации временной развертки импульса давления  $P(t)$ . Благодаря относительной простоте экспериментальной реализации акустические методы перекрывают широкий диапазон интенсивности  $10^6$ – $10^{10}$  Вт/см<sup>2</sup> и длительности

воздействия  $10^{-9}$ – $10^{-3}$  с. В ряде прикладных задач акустические методы позволяют получать информацию о процессах в конденсированных средах, недоступную для других способов измерений. Оказалось, что изучение формы акустических сигналов является эффективным способом исследования динамики быстрых фазовых переходов в процессе воздействия нано- и микросекундных лазерных импульсов на конденсированные среды [5].

При интерпретации экспериментально полученных сигналов трудно установить сочетанием каких процессов они были образованы, если отсутствует качественная информация о поведении и относительном вкладе в сигнал тех или иных процессов. Инструментом получения такой информации являются современные методы математического моделирования.

Работа посвящена изучению особенностей оптоакустических сигналов, возникающих в связи с плавлением и испарением вещества в зоне лазерного облучения алюминия и кремния.

### Постановка задачи

На свободную поверхность плоской сильнопоглощающей пластины воздействует лазерный импульс наносекундной длительности с интенсивностью  $10^7$ – $10^9$  Вт/см<sup>2</sup>. Энергия

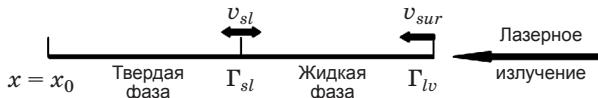


Рис. 1. Пространственное расположение фаз и межфазных границ при лазерном воздействии на мишень:  $\Gamma_{lv}$  – граница испарения;  $\Gamma_{sl}$  – граница раздела твердое тело–жидкость;  $v_{sl}$ ,  $v_{lv}$  – скорости движения границ испарения и плавления.

импульса поглощается в тонкой приповерхностной зоне мишени, что вызывает ее нагрев, плавление и испарение. Под действием теплового расширения и фазовых превращений вблизи поверхности формируется сигнал давления (оптоакустический сигнал), который распространяется к противоположной закрепленной стороне пластины. Радиус пятна фокусировки лазерного излучения предполагается много большим глубины проникновения лазерного излучения  $r \gg (\chi \tau_L)^{1/2}$ , где  $\chi$  – коэффициент температуропроводности (для кремния  $\chi = 1,01 \text{ см}^2/\text{с}$ ; для алюминия  $\chi = 0,99 \text{ см}^2/\text{с}$ ),  $\tau_L$  – полуширина лазерного импульса. Распределение интенсивности в плоскости пятна предполагается равномерным, что позволяет использовать

для математического описания одномерное по пространству приближение (рис. 1).

Математическое моделирование процессов формирования и распространения оптоакустического сигнала осуществляли в рамках совмещенного варианта гидродинамической задачи Стефана [6], включающего классический и однофазный варианты. Основу совмещенного варианта составляет система уравнений гидродинамики, дополненная уравнением переноса лазерного излучения в материале. Система гидродинамики включает уравнения неразрывности, движения и полной энергии. Учитываются конвективный, кондуктивный и излучательный механизмы переноса. В дивергентной форме система уравнений имеет вид

$$\left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) = 0 \right]_k, \quad (1)$$

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2) = - \frac{\partial p}{\partial x} \right]_k, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \left( H + \frac{u^2}{2} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho u \left( H + \frac{u^2}{2} \right) \right) = \right. \\ \left. = - \frac{\partial}{\partial x} (p u) - \frac{\partial W}{\partial x} - \frac{\partial G}{\partial x} \right]_k, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\left[ \frac{\partial G}{\partial x} + \alpha G = 0 \right]_k \quad x \in [x_0, \Gamma_{sl}] \cup [\Gamma_{sl}, \Gamma_{lv}] \quad k = \begin{cases} s, & x \in [x_0, \Gamma_{sl}] \\ l, & x \in [\Gamma_{sl}, \Gamma_{lv}] \end{cases}. \quad (4)$$

В качестве уравнения состояния использовали соотношения

$$H_l = c_{pl} T_l \quad p_l = u_c^2 \rho_{0l} \left( \left( \frac{\rho}{\rho_{0l}} - 1 \right) + \beta_l (T - T_m) \right) \quad x \in [\Gamma_{lv}, \Gamma_{sl}]. \quad (5)$$

$$H_s = c_{ps} T_s \quad p_s = u_c^2 \rho_{0s} \left( \left( \frac{\rho}{\rho_{0s}} - 1 \right) + \beta_s (T - T_0) \right) \quad x \in [\Gamma_{sl}, x_s]. \quad (6)$$

В рассматриваемой системе уравнений использованы следующие обозначения и единицы:  $\rho$  [г/см<sup>3</sup>] – плотность,  $u$  [см/с] – гидродинамическая скорость и давление,  $u_c$  [см/с] – скорость звука,  $H$  [Дж/см<sup>3</sup>] – энталпия,  $W$  [Вт/см<sup>2</sup>] – тепловой поток,  $\alpha$  [1/см] – коэффициент поглощения лазерного излучения,  $G$  [Вт/см<sup>2</sup>] – плотность мощности лазерного излучения,  $c_p$  [Дж/г К] – удельная теплоемкость при постоянном давлении,  $\beta$  [1/К] – температурный коэффициент линей-

ного расширения,  $T_0$  [К] – комнатная температура,  $T_m$  [К] – равновесная температура плавления,  $\rho_{0s}$ ,  $\rho_{0l}$  – начальные плотности твердой и жидкой фазы, задаваемые соответственно при температурах  $T_0$  и  $T_m$ . Индексы  $sur$ ,  $s$ ,  $l$ ,  $v$  обозначают принадлежность величин соответственно к поверхности, твердой, жидкой и парообразной средам, а индексы  $sl$  и  $lv$  – принадлежность к межфазным границам раздела твердое тело–жидкость  $x = \Gamma_{sl}$  и границе испарения  $\Gamma_{lv}$ . Система уравнений

(1)–(6) дополнялась граничными и начальными условиями.

Левая граница  $x = x_0$ , полагалась закрепленной и теплоизолированной (рис. 1).

$$x = x_0: \lambda \frac{\partial T_s}{\partial x} = 0, u_s = 0. \quad (7)$$

На межфазной границе  $x = \Gamma_{sl}$  формулируется модель поверхностного плавления, состоящая из трех законов сохранения, дополненных условием непрерывности температуры фазового перехода.

$$x = \Gamma_{sl}: \rho_s v_{sl} = \rho_l (u_s - u_l + v_{sl}), \quad (8)$$

$$\rho_s v_{sl}^2 + p_s = \rho_l (u_s - u_l + v_{sl})^2 + p_l, \quad (9)$$

$$\lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} - \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = L_m^{ne} \rho_s v_{sl}, \quad (10)$$

$$T_s = T_l = T_{sl} = T_m, \quad (11)$$

где

$$L_m^{ne} = L_m + (c_{pl} - c_{ps})(T_{sl} - T_{m,0}) + \frac{\rho_s + \rho_l}{\rho_s - \rho_l} \frac{(u_s - u_l)^2}{2}$$

– неравновесная теплота плавления,  $L_m$  [Дж/г] – равновесная теплота плавления,  $\lambda$  [Вт/см К] – коэффициент теплопроводности.

На правой облучаемой границе  $x = \Gamma_{lv}(t)$  формулируется модель поверхностного испарения, записанная в приближении кнудсеновского слоя и состоящая из трех законов сохранения и двух дополнительных условий, характеризующих степень неравновесности фазового перехода:

$$x = \Gamma_{lv}: \rho_l v_{lv} = \rho_v (v_{lv} + u_l - u_v), \quad (12)$$

$$p_l + \rho_l v_{lv}^2 = p_v + \rho_v (v_{lv} + u_l - u_v)^2, \quad (13)$$

$$W_l^T = \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho_l v_{lv} L_v^{ne} + \sigma T_{sur}^4, \quad (14)$$

$$T_v = T_l \alpha_T(M), \quad \rho_v = \rho_{sat} \alpha_p(M), \quad (15)$$

$$G_{lv} = A(T_{sur}) G_0 \exp \left( -4 \left( \frac{t}{\tau_L} \right)^2 \right), \quad (16)$$

где

$$L_v^{ne} = L_v (T_l) + c_{pv} (T_l - T_v) + \frac{\rho_l + \rho_v}{\rho_l - \rho_v} \frac{(u_l - u_v)^2}{2}$$

– неравновесная теплота испарения,  $G_{lv}$ ,  $G_0$  – поглощенная поверхностью энергия лазерного излучения и ее максимальное значение,

$A_{sur}$  [%] – поглощающая способность поверхности,  $\tau_L$  [нс] – полуширина лазерного импульса,  $L_v$  [Дж/г] – теплота кипения,  $M = u_{lv}/u_c$  – число Маха,  $u_c = (\gamma R T_v)^{1/2}$  – скорость звука на внешней стороне кнудсеновского слоя,  $\gamma = c_p/c_v$ ,  $R$  [Дж/г К] – универсальная газовая постоянная,  $\alpha_T(M)$ ,  $\alpha_p(M)$  – коэффициенты Крута [7, 8], при  $M = 1$   $\alpha_T(M) = 0,633$ ,  $\alpha_p(M) = 0,326$ .

Давление насыщенного пара вычисляли, используя уравнения Клапейрона–Клаузиуса:

$$p_{sat} = p_b \exp \left( \frac{L_v \mu}{RT_b} \left( 1 - \frac{T_b}{T_l} \right) \right), \quad \rho_{sat} = p_{sat} / RT_l, \quad (17)$$

где  $p_b$ ,  $T_b$  – соответственно давление и температура кипения при нормальных условиях. В начальный момент времени  $t_0$  температуру и плотность полагали постоянными, а скорость, равной нулю:

$$T_s = T_0, \quad \rho_s = \rho_{0,s}, \quad u_s = 0. \quad (18)$$

### Оптические и теплофизические характеристики алюминия и кремния

На форму оптоакустических сигналов большое влияние оказывают теплофизические и оптические характеристики материала мишени [9, 10]. Используемые в расчетах характеристики материалов, представленные на рис. 2а–б и 3, взяты из справочных данных [11, 12]. Вертикальными линиями на рисунках отмечены равновесные температуры плавления и испарения каждого из материалов. Все теплофизические и оптические характеристики обоих материалов претерпевают разрыв при переходе через значение равновесной температуры плавления (на рис. 2, 3 она отмечена вертикальными линиями). Учитывая, что один из рассматриваемых материалов является металлом, а другой полупроводником, их теплофизические и оптические характеристики сильно различаются. При переходе через фронт плавления теплофизические характеристики алюминия скачком уменьшаются, а кремния – возрастают. В таблице приведены значения теплофизических параметров, характеризующие свойства рассматриваемых материалов.

**Алгоритм решения.** Основная сложность решения задачи Стефана заключается в наличии двух подвижных границ, положение которых неизвестно и должно определяться в ходе расчетов, при этом размеры твердой и жидкой подобластей в процессе расчетов могут меняться на несколько порядков. Анализ вклада

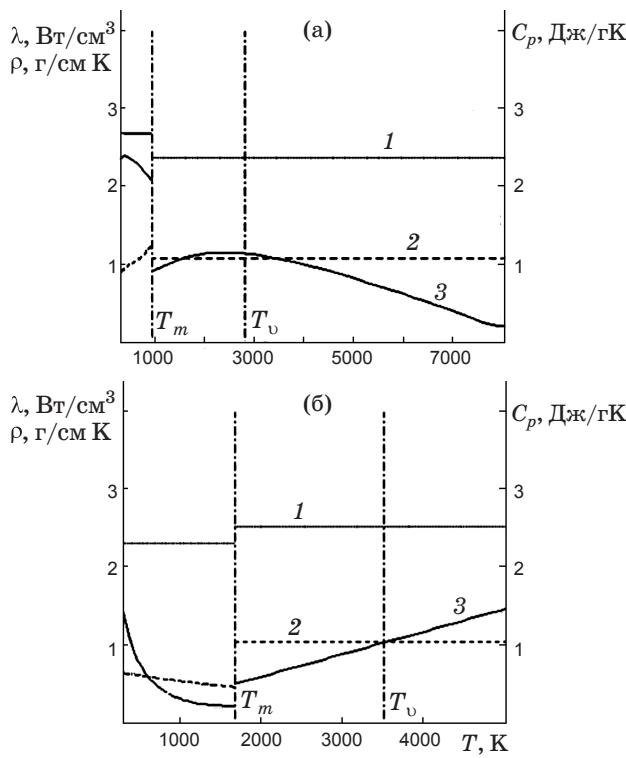


Рис. 2. Термофизические характеристики алюминия (а) и кремния (б). 1 – плотность; 2 – теплоемкость; 3 – теплопроводность;  $T_m$  – температура плавления;  $T_v$  – температура испарения.

фазового перехода в оптоакустический сигнал требует точного определения положения межфазной границы и ее скорости. Наиболее эффективным методом для решения поставленной задачи является метод динамической адаптации [13–16], позволяющий производить расчет с явным выделением межфазных границ.

**Метод динамической адаптации.** Численное решение задачи (1)–(18) осуществляется методом динамической адаптации, в основу которого положена идея перехода к произвольной нестационарной системе координат, осуществляемого с помощью искомого решения. В про-

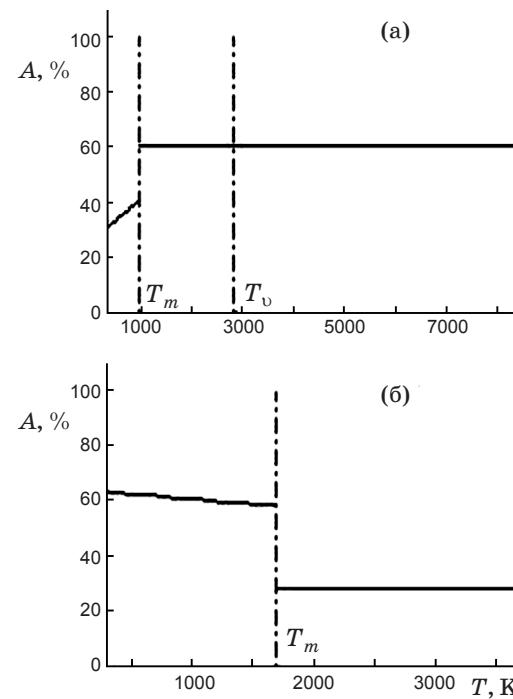


Рис. 3. Поглощательная способность алюминия (а) и кремния (б).  $T_m$  – температура плавления.  $T_v$  – температура испарения.

извольной нестационарной системе координат проблема описывается расширенной дифференциальной системой уравнений, часть из которых описывает физическое явление, а другая часть – динамику узлов расчетной сетки. Проблемы, связанные с подвижными границами, снимаются путем перехода к произвольной нестационарной системе координат, в которой узлы сетки и границы оказываются неподвижными. Преобразование координат осуществляется автоматически с помощью искомого решения, что позволяет производить размещение узлов сетки в зависимости от особенностей решения.

Переход из физического пространства с переменными  $(x, t)$  в расчетное с произвольной нестационарной системой координат  $(q, \tau)$  осу-

#### Термофизические параметры алюминия и кремния

Минерал	Атомный вес, г/моль	Температура		Коэффициент теплового расширения, 1/К		Теплота перехода	
		$T_m$ К	$T_b$ К	Твердая фаза $\beta_s$	Жидкая фаза $\beta_l$	Плавление $L_m$ (Дж/г)	Кипение $L_b$ (Дж/г)
Al	26,98	933	2793	$2,33 \times 10^{-5}$	$5,00 \times 10^{-5}$	400,30	10860
Si	28	1683	3514	$4,65 \times 10^{-3}$	$1,40 \times 10^{-4}$	1797,0	13720

ществляется с помощью замены переменных общего вида

$$x = f(q, \tau), \quad t = \tau, \quad (19)$$

имеющей обратное невырожденное преобразование  $q = \varphi(x, t)$ ,  $\tau = t$ . Частные производные в системе координат  $(q, \tau)$  имеют следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{Q}{\psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad (20)$$

где  $\partial x / \partial \tau = -Q$  – скорость движения новой системы координат относительно исходной, подлежащая в дальнейшем определению.

В нестационарной системе координат две фазовые подобласти  $[\Gamma_{lv}, \Gamma_{sl}] \cup [\Gamma_{sl}, x_s]$  с подвижными границами  $\Gamma_{lv}, \Gamma_{sl}$  отображаются на две расчетные подобласти  $[0, q_{sl}]$  и  $[q_{sl}, q_s]$  с неподвижными границами. До появления жидкой фазы физическая область  $[\Gamma_{lv}, x_s]$  отображается на расчетную подобласть  $[0, q_s]$ . Физическая координата  $x$  в расчетном пространстве становится новой неизвестной функцией. В новой системе координат динамика расчетной сетки описывается дополнительным дифференциальным уравнением:

$$\left[ \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = -\frac{\partial Q}{\partial q} \right]_k \quad k = s, l, \quad (21)$$

где  $\Psi = \partial x / \partial q$  – метрический коэффициент,  $Q$  – функция, определяющая конкретный вид преобразования в соответствии с особенностями задачи.

Используя преобразование переменных (19), запишем дифференциальную задачу (1)–(17) в произвольной нестационарной системе координат  $(q, \tau)$ :

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{\partial(\psi \rho)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial q}(\rho(u + Q)) = 0 \right]_k, \\ & \left[ \frac{\partial}{\partial \tau}(\psi \rho u) + \frac{\partial}{\partial q}(\rho u(u + Q)) = -\frac{\partial p}{\partial q} \right]_k, \\ & \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \psi \rho \left( H + \frac{u^2}{2} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial q} \left( \rho(u + Q) \left( H + \frac{u^2}{2} \right) \right) = \right. \\ & \quad \left. = -\frac{\partial}{\partial q}(p u) + \frac{\partial}{\partial q} \left( \frac{\lambda(T)}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q} \right) \right]_k, \\ & \left[ \frac{\partial G}{\partial q} + \alpha \psi G = 0 \right]_k, \end{aligned} \quad (22)$$

$$q \in [0, q_{sl}] \cup [q_{sl}, q_s], \quad \tau \in [\tau_0, \tau_{end}], \quad k = s, l.$$

Границные условия.

$$q = q_0: \quad u = W = 0, \quad Q = 0; \quad (23)$$

$$q = \Gamma_{sl}: \quad \rho_s(Q_{sl} + u_s) = \rho_l(Q_{sl} + u_l), \quad (24)$$

$$p_s + \rho_s(Q_{sl} + u_s)^2 = p_l + \rho_l(Q_{sl} + u_l)^2, \quad (25)$$

$$W_l - W_s = \rho_s v_{sl} L_m^{ne}, \quad v_{sl} = Q_{sl} + u_s, \quad (26)$$

$$q = \Gamma_{lv}: \quad \rho_l(Q_{lv} + u_l) = \rho_v(Q_{lv} + u_v), \quad (27)$$

$$p_l + \rho_l(Q_{lv} + u_l)^2 = p_v + \rho_v(Q_{lv} + u_v)^2, \quad (28)$$

$$\begin{aligned} W_l^T = W_l^T - \frac{\lambda_l}{\psi_l} \frac{\partial T_l}{\partial q} &= \rho_l v_{lv} L_v^{ne} + \sigma T_{sur}^4, \\ v_{lv} &= -(Q_{lv} + u_l), \\ G_{lv} &= A(T_{sur}) G_0 \exp \left( -4 \left( \frac{\tau}{\tau_L} \right)^2 \right). \end{aligned} \quad (29)$$

$$\tau = \tau_0: \quad T_s = T_0, \quad u_s = 0, \quad \rho_s = \rho_{0,s}, \quad \psi = 1. \quad (30)$$

Таким образом, при переходе к произвольной нестационарной системе координат исходная дифференциальная модель трансформируется в расширенную дифференциальную систему (21)–(30), в которой появляется дополнительное уравнение типа (21), являющееся уравнением обратного преобразования. Его тип, свойства и вид краевых условий зависят от конкретного вида функции  $Q$ . Для построения равномерных (квазиравномерных) на каждый момент времени сеток в областях с подвижными границами функция  $Q$  задается в виде [13, 14]:

$$\left[ Q = -D \frac{\partial \Psi}{\partial q} \right]_k, \quad k = s, l,$$

где коэффициент диффузии  $D$  выражается через геометрические и скоростные параметры задачи:  $D = L^2(t)(|v_{sl}| + |v_{lv}|)/\Delta x$ .

**Разностная аппроксимация.** Численное решение дифференциальной модели (21)–(30) осуществлялось при помощи конечно-разностного метода, согласно которому уравнения гидродинамики аппроксимировали семейством консервативных разностных схем, полученных интегро-интерполяционным методом [17]. Для построения семейства разностных схем в расчетном пространстве вводится сетка  $\omega_q^\tau$  с неравномерными шагами  $h_{k,i}$ ,  $\tau^j$  по пространственной  $q$  и временной  $\tau$  переменным:  $\omega = \{\omega_l \cup \omega_s\} \times \{\omega_\tau\}$ ,

где

$$\omega_l = \left\{ \begin{array}{l} q_{l,i}, q_{l,i+1/2}; \quad q_{l,i+1} = q_{l,i} + h_{l,i+1}, \quad q_{l,i+1/2} = q_{l,i} + 0,5h_{l,i+1} \\ i = 0, \dots, N_l - 1, \quad q_{l,0} = 0, \quad q_{N_l} = q_{sl}, \quad h_{l,0} = 0, \quad h_{l,N_l+1} = 0 \end{array} \right\},$$

$$\omega_s = \left\{ \begin{array}{l} q_{s,i}, q_{s,i+1/2}; \quad q_{s,i+1} = q_{s,i} + h_{s,i+1}, \quad q_{s,i+1/2} = q_{s,i} + 0,5h_{s,i+1} \\ i = 0, \dots, N_s - 1, \quad q_{s,0} = 0, \quad q_{N_s} = q_{sl}, \quad h_{s,0} = 0, \quad h_{s,N_s+1} = 0 \end{array} \right\},$$

$$\omega_{\tau} = \left\{ \tau^j, \quad \tau^{j+1} = \tau^j + \Delta\tau^{j+1}, \quad j = 0, \dots, J, \quad \tau^0 = t_0 \right\}.$$

При разностной аппроксимации уравнений к узлам с целочисленными индексами относятся сеточные функции  $p, Q, x$ , к точкам с полуцелыми индексами  $(q_{m+1/2}, \tau^j)$  – сеточные функции  $\psi, \rho, u, T$ . Аппроксимация системы

уравнений (22) производилась с помощью полностью неявной разностной схемы, имеющей порядок аппроксимации  $Q(\tau + h)$ .

Для дифференциальной системы (21), (22) семейство разностных схем имеет вид:

$$\left\{ \frac{(\psi\rho)_{i+1/2}^{j+1} - (\psi\rho)_{i+1/2}^j}{\Delta\tau^{j+1}} + \frac{[\rho(u+Q)]_{i+1}^{j+1} - [\rho(u+Q)]_i^{j+1}}{h_{i+1}} = 0 \right\}_k, \quad (31)$$

$$\left\{ \frac{(\psi\rho u)_{j+1/2}^{j+1} - (\psi\rho u)_{j+1/2}^j}{\Delta\tau^{j+1}} + \frac{[\rho u(u+Q)]_{i+1}^{j+1} - [\rho u(u+Q)]_i^{j+1}}{h_{i+1}} = -\frac{p_{i+1}^{j+1} + p_i^{j+1}}{h_{i+1}} \right\}_k, \quad (32)$$

$$\left\{ \frac{[\psi\rho(\varepsilon + u^2/2)]_{i+1/2}^{j+1} - [\psi\rho(\varepsilon + u^2/2)]_{i+1/2}^j}{\Delta\tau^{j+1}} + \frac{[\rho(u+Q)(\varepsilon + u^2/2)]_{i+1}^{j+1} - [\rho(u+Q)(\varepsilon + u^2/2)]_i^{j+1}}{h_{i+1}} = \right. \\ \left. = -\frac{(pu)_{i+1}^{j+1} + (pu)_i^{j+1}}{h_{i+1}} + \frac{1}{h_i} \left( \frac{\lambda_{i+1}^{j+1} T_{i+3/2}^{j+1} - T_{i+1/2}^{j+1}}{\psi_{i+1}^{j+1} 0,5(h_{i+1} + h_i)} - \frac{\lambda_i^{j+1} T_{i+1/2}^{j+1} - T_{i-1/2}^{j+1}}{\psi_i^{j+1} 0,5(h_i + h_{i-1})} \right) \right\}_k, \quad (33)$$

$$\left\{ \frac{\psi_{i+1/2}^{j+1} - \psi_{i+1/2}^j}{\Delta\tau^{j+1}} = -\frac{Q_{i+1}^{j+1} - Q_i^{j+1}}{h_{i+1}} \right\}_k, \quad (34)$$

$$\left\{ \frac{G_{i+1}^{j+1} - G_i^{j+1}}{h_{i+1}} + \alpha(\psi G)_{i+1/2}^{j+1} = 0 \right\}_k, \quad (35)$$

$$q = q_0: \quad \frac{\psi_{s,0}^{j+1} T_{s,0}^{j+1} - T_{s,1/2}^{j+1}}{\lambda_{s,0}^{j+1} h_{s,0}/2} = 0, \\ u_{s,0} = 0, \quad Q_{s0} = 0, \quad (36)$$

$$q = \Gamma_{sl}: \quad (\rho_s V_{sl})^{j+1} = \rho_l^{j+1} (u_s - u_l + v_{sl})^{j+1}, \quad (37)$$

$$\left[ Q_i^{j+1} = -D_i^j \frac{\psi_{i+1/2}^{j+1} - \psi_{i-1/2}^{j+1}}{(h_i + h_{i+1})/2} \right],$$

$$\left[ \frac{x_{i+1}^{j+1} - x_i^{j+1}}{h_{i+1}} = \psi_{i+1/2}^{j+1} \right]_k,$$

$$\left( \rho_s V_{sl}^2 \right)^{j+1} + p_s^{j+1} = \\ = \rho_l^{j+1} \left( (u_s - u_l + v_{sl})^{j+1} \right)^2 + p_l^{j+1}. \quad (38)$$

где  $i = 0, \dots, N_l - 1$  при  $k = l$ ,  $i = 0, \dots, N_s - 1$  при  $k = s$ .

Аппроксимация граничных условий (23)–(30) выполнялась следующим образом:

$$\frac{\lambda_{s,N-1} T_{s,N-1/2}^{j+1} - T_{s,N-1}^{j+1}}{\psi_{s,N-1} h_{s,N-1/2}} - \frac{\lambda_{l,0} T_{l,0}^{j+1} - T_{l,1/2}^{j+1}}{\psi_{l,0} h_{l,1/2}} = \\ = L_m (\rho_s v_{sl})^{j+1}, \\ T_s = T_l = T_m. \quad (39)$$

$$q = \Gamma_{lv}: (\rho_v v_{lv})^{j+1} = (\rho_v (u_{lv} - u_v + v_{lv}))^{j+1}, \\ Q_{lv}^{j+1} = - (v_{lv}^{j+1} + u_{lv}^{j+1}), \quad (40)$$

$$(\rho_{lv} v_{lv}^2)^{j+1} + p_{lv}^{j+1} = \\ = (\rho_v (u_{lv} - u_v + v_{lv})^2)^{j+1} + p_v^{j+1}, \quad (41)$$

$$\frac{\lambda_{sur}^{j+1}}{\Psi_{sur}^{j+1}} \frac{T_{k,1/2}^{j+1} - T_{sur}^{j+1}}{h_{k,1/2}} = (\rho_{sur} L_v V_{kv})^{j+1} + (\sigma T^4)^{j+1}, \quad (42)$$

$$(G_{lv})^{j+1} = A (T_{sur}^{j+1}) G_0 \exp \left( -4 \left( \frac{\tau}{\tau_L} \right)^2 \right)^{j+1}. \quad (43)$$

Величины в полуцелых узлах для сеточных функций, отнесенных к целым точкам, вычисляются как полусумма значений в ближайших узлах. При определении величин в узлах с целочисленными индексами для функций, отнесенных к полуцелым точкам, используется линейная интерполяция:

$$y_m = \frac{y_{m-1/2} \Psi_{m+1/2} + y_{m+1/2} \Psi_{m-1/2}}{\Psi_{m+1/2} + \Psi_{m-1/2}}. \quad (44)$$

## Результаты моделирования

Рассмотрим и проанализируем изменения амплитудных характеристик оптоакустических сигналов в алюминии и кремнии, вызванных короткоимпульсным лазерным воздействием.

Моделирование формы акустического сигнала проводилось для лазерного импульса гауссовой формы с длительностью на полувысоте  $\tau_L = 3$  нс, в диапазоне пиковых интенсивностей  $G_0 = 10^7 - 10^{10}$  Вт/см<sup>2</sup>. Кривые давления получены для глубины  $x_l = 10$  мкм. Точка расположена вне зоны теплового влияния импульса и на рассматриваемом интервале времени основной сигнал в ней не искажается отраженным. Выбранный диапазон интенсивности излучения для данной длительности  $\tau_L$  соответствует области доминирования процесса плавления обоих материалов, а испарение еще не вносит существенного вклада. Сравнительный анализ оптоакустических сигналов должен дать представление:

- о пороге плавления обоих материалов;
- о характерном профиле оптоакустических сигналов для металлов и полупроводников;
- о влиянии теплофизических и оптических параметров облучаемых материалов на динами-

ку фазовых переходов и амплитуды оптоакустических сигналов.

Для теплового механизма генерации звука существуют оценки [1], полученные из совместного решения линейных уравнений теплопроводности и гидродинамики, согласно которым:

$$P(t) = \chi \beta \rho_0 \frac{\partial T_{sur}}{\partial t} + \frac{1}{c_p \alpha} \frac{\partial G(t)}{\partial t}, \quad \chi = \frac{\lambda}{c_p \rho_0}. \quad (45)$$

На рис. 4а–в представлены временные зависимости температуры поверхности, скорости фронта плавления и давления для кремния. Моделирование показало, что, несмотря на более высокую, чем у алюминия, температуру плавления  $T_m^{\text{Si}}(1683\text{ K}) > T_m^{\text{Al}}(933,6\text{ K})$ , порог плавления кремния оказался ниже (рис. 4а). Пороговая интенсивность лазерного воздействия составила  $G_0 = 2,4 \times 10^7$  Вт/см<sup>2</sup>. Температура плавления на облучаемой поверхности кремния достигается на заднем фронте лазерного импульса (рис. 4а). Быстрому нагреву приповерхностных слоев кремния способствует значительное уменьшение теплопроводности в твердой фазе с ростом температуры. Появление жидкой фазы характеризуется скоростью  $V_{sl}$  (рис. 4б), отрицательная ветвь которой характеризует плавление, а положительная – затвердевание. Оптоакустический сигнал является динамической характеристикой, которая весьма чувствительна к темпу ввода энергии в систему. На начальной стадии нагрева импульс давления (рис. 4в), положителен. Величина его растет с ростом температуры до значения  $p_a \approx 3,5$  бар, а затем замедляется из-за уменьшения производных  $\partial T_{sur}/\partial t$ ,  $\partial G(t)/\partial t$  и плавно спадает после смены их знака. Момент образования жидкой фазы характеризуется отрицательным скачком плотности  $\Delta \rho = \rho_s - \rho_l < 0$ , что проявляется на развертке давления в виде резкого провала в область отрицательных значений давления,  $p_a \approx 7$  бар. Скачок давления, связанный со скачкообразным изменением плотности в момент плавления, основан на удовлетворительном согласовании этого скачка с максимальным значением скорости фронта плавления по элементарной оценке  $p = \Delta \rho V_{sl}^2$  [1]. Так как пороговое плавление происходит на заднем фронте лазерного импульса, процесс плавления из-за быстрого уменьшения интенсивности излучения длится короткое время. Процесс затвердевания сопровождается выделением теплоты плавления и быстрым подъемом давления, вплоть до положительных значений. После исчезновения жидкой фазы опто-

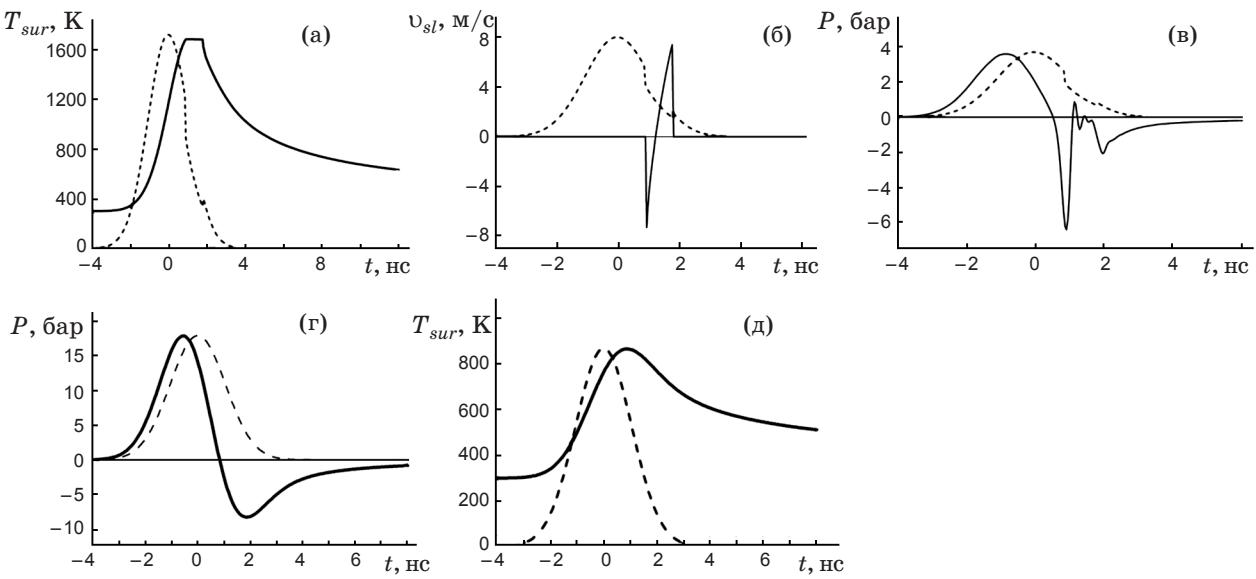


Рис. 4. Зависимость от времени температуры поверхности  $T_{sur}$ , скорости фронта плавления  $v_{sl}$  и давления  $p$  для кремния (а, б, в) и алюминия (г, д). Пунктиром обозначена зависимость поглощаемой лазерной энергии от времени. Полуширина лазерного импульса 3 нс. Для алюминия  $G_0 = 3 \times 10^7$  Вт/см<sup>2</sup>,  $A = 100\%$ ; для кремния  $G_0 = 4 \times 10^7$  Вт/см<sup>2</sup>,  $A = 60\%$ .

акустический сигнал под влиянием остывания мишени приобретает медленно изменяющееся отрицательное значение. Таким образом, плавление полупроводника в режиме, близком к пороговому режиму, характеризуется узким отрицательным провалом в оптоакустическом сигнале.

В отличие от кремния алюминий, обладающий большей теплопроводностью, прогревается на большую глубину, и температура на облучаемой поверхности не достигает температуры плавления, даже при несколько более высокой интенсивности излучения,  $G_0 = 3 \times 10^7$  Вт/см<sup>2</sup>. Форма оптоакустического сигнала алюминия имеет характерную для металлов, при отсутствии фазовых переходов, биполярную форму (рис. 4г–д). Регистрируемый сигнал примерно пропорционален производной по времени от температуры облучаемой поверхности. Положительная полуволна соответствует тепловому расширению  $\partial T_s / \partial t > 0$ , отрицательная полуволна – сжатию  $\partial T_s / \partial t < 0$ . Амплитуда положительной фазы приблизительно в 2 раза превосходит амплитуду отрицательной фазы, если лазерный импульс имеет гауссову форму [1]. Положительная полуволна давления, характеризующаяся нагревом, более продолжительна в алюминии и ее амплитуда почти в 4 раза больше, чем в кремнии. После положительной

полуволны в оптоакустическом сигнале алюминия следует отрицательная полуволна, характеризующая процесс остывания вещества. По времени полуволны остывания алюминиевой и кремниевой мишени примерно совпадают, однако амплитуда сигнала в алюминии примерно в 5 раз превышает амплитуду сигнала в кремнии.

Порог плавления для алюминия был зафиксирован при интенсивности  $G_0 = 3,5 \times 10^7$  Вт/см<sup>2</sup> на заднем фронте гауссова импульса (рис. 5а–в). Как и у кремния, плавление происходит в отрицательной полуволне давления с тем отличием, что в момент зарождения жидкой фазы скачок плотности у алюминия оказывается положительным  $\Delta\rho = \rho_s - \rho_l > 0$ . Это проявляется на развертке давления в виде резкого короткого скачка вверх, вплоть до нулевого значения давления  $p_a$ . Последующее затвердевание происходит при быстро уменьшающемся энерговкладе, в результате чего максимальная скорость затвердевания ( $\approx 60$  м/с) в 1,5 раза превышает максимальную скорость плавления (рис. 5б), и в 7,5 раз превышает максимальную скорость затвердевания кремния. Столь высокая скорость затвердевания вызывает резкое увеличение отрицательного давления,  $p_a \approx 15$  бар (рис. 5в).

При повышении интенсивности излучения до  $G_0 = 2 \times 10^8$  Вт/см<sup>2</sup> оптоакустические сигна-

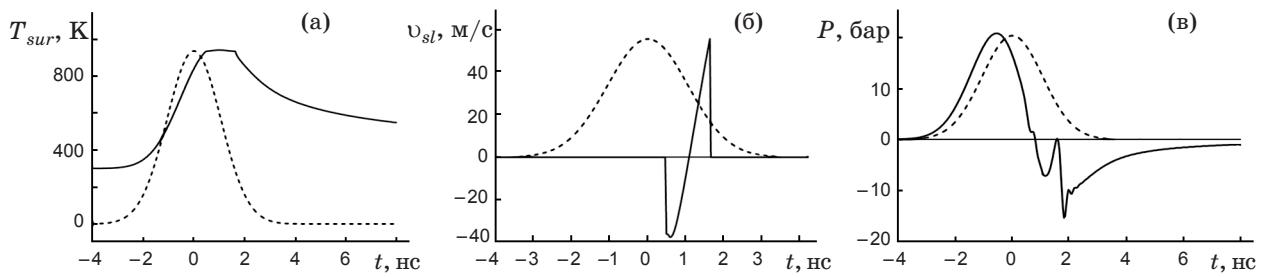


Рис. 5. Зависимость от времени температуры поверхности  $T_{sur}$ , скорости плавления  $v_{sl}$  и давления  $p$  для алюминия. Пунктиром обозначена зависимость поглощенной энергии лазерного излучения от времени. Полуширина лазерного импульса 3 нс.  $G_0 = 3,5 \times 10^7 \text{ Вт/см}^2$ .

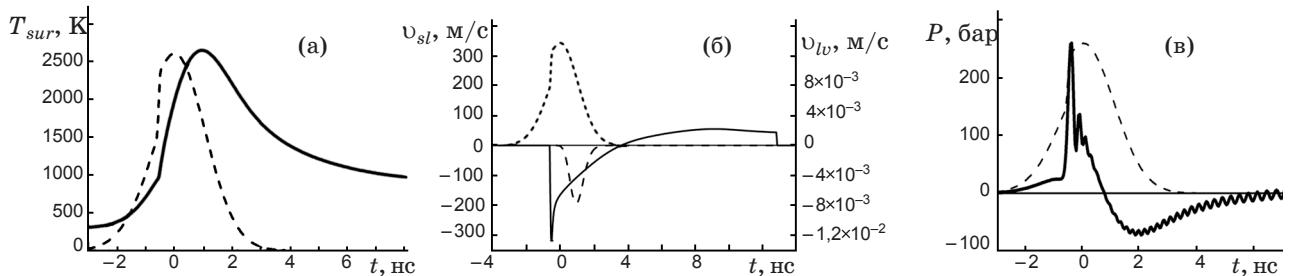


Рис. 6. Зависимость от времени температуры поверхности  $T_{sur}$ , скорости плавления  $v_{sl}$ , испарения  $v_{lv}$  и давления  $p$  для алюминия. Пунктиром обозначена зависимость поглощенной энергии от времени. Полуширина лазерного импульса 3 нс.  $G_0 = 2 \times 10^8 \text{ Вт/см}^2$ .

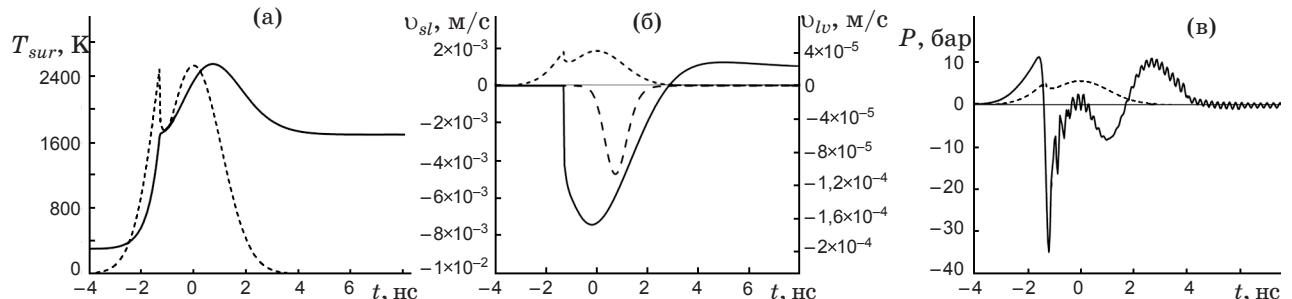


Рис. 7. Зависимость от времени температуры поверхности  $T_{sur}$ , скоростей плавления  $v_{sl}$ , испарения  $v_{lv}$  и давления  $p$  для кремния. Пунктиром обозначена зависимость поглощенной энергии от времени. Полуширина лазерного импульса 3 нс.  $G_0 = 2 \times 10^8 \text{ Вт/см}^2$ .

лы алюминия и кремния качественно меняются (рис. 6а–в, 7а–в). Момент плавления перемещается на передний фронт лазерного импульса, где возрастает роль поглощательной способности материала. В алюминии поглощательная способность при плавлении скачком увеличивается, усиливая скорость плавления до 300 м/с (рис. 6б) и, как следствие, происходит скачок давления до 270 бар (рис. 6в). Поверхность при этом разогревается до температуры  $T_{sur}^{\text{Al}} \geq T_b^{\text{Al}}$  и становится заметным вклад испарения, скорость которого достигает  $v_{lv} \approx 8 \times 10^{-3}$  м/с (рис. 6б).

(рис. 6б). Амплитуда оптоакустического импульса после всплеска давления, вызванного скачком поглощательной способности и положительным скачком плотности, под совместным воздействием плавления, испарения и уменьшения интенсивности излучения быстро спадает, переходя в отрицательную полу волну.

Оптоакустический сигнал в кремнии имеет еще более сложную временную структуру (рис. 7а–в). Для кремния поглощательная способность поверхности скачком уменьшается

(рис. 7а), что в совокупности с отрицательным скачком плотности приводит к увеличению отрицательного скачка давления до 35 бар (рис. 7в). Продолжающийся нагрев позволяет уменьшить отрицательное давление до нуля, которое затем снова увеличивается до 10 бар, из-за совместного воздействия испарения, скорость которого ( $v_{lv} \approx 4,5 \times 10^{-3}$  м/с, рис. 7б) становится заметной, и уменьшения интенсивности лазерного импульса. Процесс затвердевания приводит к формированию положительной полуволны с максимальным значением  $p_a \approx 10$  бар. Из-за более низкой поглощательной способности темп нагрева кремния ниже, чем у алюминия, чем и объясняются более низкие максимальные значения температуры поверхности, скорости плавления и скачков давления.

## Заключение

Выполненный с помощью математического моделирования сравнительный анализ оптоакустических сигналов, вызванных лазерным воздействием на алюминий и кремний, показал, что:

1. Плавление существенно меняет вид оптоакустического сигнала в кремнии и алюминии.

2. Скачок давления, связанный с плавлением, положителен у алюминия ( $\Delta p > 0$ ) и отрицателен у кремния ( $\Delta p < 0$ ).

3. Структура временной развертки давления существенно зависит от режима воздействия. В случае порогового режима скачок давления от плавления возникает в отрицательной полуволне оптоакустического сигнала. При интенсивностях излучения, превышающих пороговый вклад плавления в давление, происходит в виде узкого провала для кремния или в виде узкого всплеска для алюминия на стадии нагрева в положительной полуволне.

4. Пороговая интенсивность лазерного излучения, вызывающая плавление кремния, ниже, чем алюминия, хотя температура плавления кремния значительно выше.

5. Амплитуда оптоакустического сигнала для алюминия значительно больше, чем для кремния, при всех исследуемых режимах лазерного воздействия.

6. Увеличение интенсивности лазерного импульса от 24 до 200 МВт/см<sup>2</sup> сопровождается примерно 10-кратным ростом давления для алюминия и 5-кратным для кремния.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты РФФИ № 10-07-00246-а и 09-07-00225-а).

\* \* \* \* \*

## ЛИТЕРАТУРА

1. Самохин А.А. Действие лазерного излучения на поглощающие конденсированные среды // Труды ИОФАН, № 13 / Под ред. Прохорова А.М. М.: Наука, 1988. С. 1–119.
2. Гусев В.Э., Карабутов А.А. Лазерная оптоакустика. М.: Наука, 1991. 304 с.
3. Ахманов С.А., Гусев В.Э. Лазерное возбуждение сверхкоротких акустических импульсов: новые возможности в спектроскопии твердого тела, диагностике быстропротекающих процессов и нелинейной акустике // Успехи физических наук. 1992. Т. 162. № 3. С. 3–87.
4. Саватеева Е.В., Карабутов А.А., Панченко В.Я. Лазерная оптоакустическая спектроскопия биотканей // Сб. трудов ИПЛИТ РАН. Лазеры в биомедицине. 2005. С. 183–187.
5. Мажукин В.И., Никифорова Н.М., Самохин А.А. Фотоакустический эффект при плавлении и испарении вещества под действием лазерного импульса // Труды ИОФ им. А.М. Прохорова РАН. 2004. Т. 60. С. 108–126.
6. Mazhukin V.I., Samarskii A.A. Mathematical Modeling in the Technology of Laser Treatments of Materials // Review. Surveys on Mathematics for Industry. 1994. V. 4. № 2. P. 85–149.
7. Crout D. An application of kinetic theory to the problems of evaporation and sublimation of monatomic gases // J. Math. Phys. 1936. № 15. P. 1–54.
8. Мажукин В.И., Прудковский П.А., Самохин А.А. О газодинамических граничных условиях на фронте испарения // Математическое моделирование. 1993. Т. 5. № 6. С. 3–10.
9. Мажукин В.И., Носов В.В. Исследование влияния температурных зависимостей теплофизических и оптических характеристик и уравнения состояния металла на форму оптоакустического сигнала при лазерном воздействии // Математическое моделирование. 1993. Т. 5. № 5. С. 3–29.
10. Носов В.В., Мажукин В.И. Влияние процессов плавления и кристаллизации на форму оптоакустического сигнала при лазерном воздействии на сильно поглощающие конденсированные среды // Математическое моделирование. 1994. Т. 6. № 1. С. 3–54.

11. Смилз К.Дж. Металлы: Справочник. Издание пятое / Под ред. Глазунова С.Г. М.: Металлургия, 1980. 447 с.
12. Физические величины: Справочник / Под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
13. Мажукин В.И., Бреславский П.В., Шапранов А.В. Динамическая адаптация в дифференциальных уравнениях в частных производных гиперболического типа. Энциклопедическая серия “Энциклопедия низкотемпературной плазмы”. Серия Б. “Справочные приложения, базы и банки данных”. Тематический том VII-1, “Математическое моделирование в низкотемпературной плазме”. Часть I. М.: Янус-К. 2008. Т. VII-1. С. 190–216.
14. Мажукин В.И., Королева О.Н. Математическое моделирование лазерного плавления и испарения многослойных материалов // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2006. Т. 46. № 5. С. 910–925.
15. Мажукин В.И., Такоева Л.Ю. Принципы построения динамически адаптирующихся к решению сеток в одномерных краевых задачах // Математическое моделирование. 1990. Т. 2. № 3. С. 101–118.
16. Бреславский П.В., Мажукин В.И. Алгоритм численного решения гидродинамического варианта задачи Стефана на адаптивных сетках // Математическое моделирование. 1991. Т. 3. № 10. С. 104–115.
17. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Изд-во МГУ, 1999. 798 с.
-