

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UN PROBLEMA DE CALENTAMIENTO, FUSIÓN Y VAPORIZACIÓN POR LÁSER

J. Etcheverry

Laboratorio de Electrónica Cuántica, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Buenos Aires (FCE y N, UBA), Ciudad Universitaria, Pabellón I, (1428) Buenos Aires.

Se utiliza un modelo analítico de un problema unidimensional de calentamiento, fusión y vaporización por láser. Se presentan fórmulas analíticas para las fluencias necesarias para evaporar y/o fundir el material, y se muestran comparaciones con resultados numéricos obtenidos para el caso de interacción de un láser pulsado con muestras de aluminio.

I. INTRODUCCIÓN

La creciente importancia del procesado directo de materiales con láseres, ya sea continuos o pulsados (con duraciones de pulso en el rango de los milisegundos hasta los femtosegundos) ha focalizado mucho interés en el modelado analítico y resolución numérica de problemas de interacción de láser con materiales¹⁻⁵. Este tipo de modelado es particularmente importante dada la pequeñez de las zonas tratadas con láser en muchas de las aplicaciones (microelectrónica, etc.).

El tipo de modelo, y los algoritmos numéricos dependen de la aplicación concreta (material, longitud de pulso del láser, escala de tiempo de interés).

Analizaremos un problema de fusión y vaporización con láser²⁻⁴. Se utiliza un modelo analítico basado en la ecuación del calor, y se presentan fórmulas para las fluencias umbrales de comienzo de la fusión y la vaporización.

Finalmente se emplea un algoritmo numérico, aplicado al caso de una muestra de aluminio sometida a la acción de un láser pulsado de duración ~ 20 ns⁹⁻¹⁰.

II. MODELO ANALÍTICO

Considerando un medio semi-infinito, $x_0(t) \leq x < \infty$, y el láser incidiendo desde la izquierda.

Un problema de fusión y evaporización por láser puede plantearse, cuando el láser se absorbe en una capa muy delgada respecto de una longitud típica de difusión durante el pulso (como ocurre en el caso de los metales aún para pulsos del orden de nanosegundos), como un problema para la ecuación del calor con un flujo de energía prescripto en el borde. Se tienen en principio dos fronteras libres

que deben determinarse: la interfase líquido-sólido, y la interfase vapor-líquido.

Inicialmente el material se calienta por el flujo de energía incidente. Si el borde llega a temperatura de fusión u_f , aparece la interfase líquido-sólido $x_1(t)$, que se mueve hacia la derecha a medida que el material recibe más energía del láser. Si es alcanzada la temperatura de evaporación u_v , el material comienza a evaporarse y la interfase líquido-vapor $x_0(t)$ a moverse hacia la derecha. Cuando el pulso termina, comienza el enfriamiento, y la interfase vapor-líquido se detiene.

Debemos resolver la ecuación del calor en las fases sólida y líquida (se desprecia la conductividad térmica de la fase vaporizada)

$$\rho c_p u_t(x,t) = (\kappa u_x(x,t))_x \quad x_0(t) \leq x < \infty \quad (1)$$

donde $u(x,t)$ es la temperatura, y κ, c_p, ρ representan la conductividad térmica, la capacidad calorífica, y la densidad del material (líquido o sólido), respectivamente. Se satisface el dato en infinito:

$$u(\infty, t) = u_0 \quad (2)$$

y valores iniciales, por ejemplo:

$$u(x, 0) = u_0(x) \equiv u_0 \quad \text{en } x_0(t) \leq x < \infty \quad (3)$$

$$x_0(0) = 0 = x_1(0) \quad (4)$$

Hasta que el material comienza a fundirse, se tiene $x_1(t) = 0$, y un flujo de energía en el borde:

$$\kappa u_x(x_0(t), t) = -I(t) (1 - R(u(0, t))) \quad (5)$$

donde $I(t)$ es la intensidad del láser en la superficie, y $R(u)$ la reflectividad de la misma en función de la temperatura. Para la frontera líquido-sólido, se tiene un problema clásico de Stefan: $u(x_1(t), t) = u_f$, y el flujo térmico satisface:

$$\lambda_f \dot{x}_1(t) = \left[\kappa u_x(x_1(t), t) \right]_l^r \quad (6)$$

donde λ_f es el calor latente de fusión, y r, l denotan el lado derecho e izquierdo de la interfase, respectivamente.

Para la frontera vapor-líquido se tiene un problema de ablación: si la frontera $x_0(t)$ se mueve, debe satisfacerse $u(x_0(t), t) = u_v$, y la condición de conservación de energía en la interfase, que se escribe despreciando la conducción térmica del lado del vapor:

$$\lambda_v \dot{x}_0(t) = I(t) (1 - R(u_v)) + \kappa u_x(x_0(t), t) \quad (7)$$

Aquí λ_v es el calor latente de vaporización.

III. DETERMINACIÓN ANALÍTICA DE LOS UMBRALES

Es útil resolver la etapa de calentamiento en forma analítica, para encontrar una estimación de los umbrales de fusión y evaporación. En lo que sigue se supondrá que ρ, c_p y κ son constantes, independientes de la temperatura. Asimismo, se considera $I(t) = I$ constante, y la reflectividad R independiente de la temperatura.

Debemos resolver la ecuación (1), con condición en $x_0 = 0$ dada por (5), el dato en infinito (2), y la condición inicial (3). Se obtiene fácilmente la solución pues el flujo térmico cumple la misma ecuación, y satisface un dato de Dirichlet en $x_0(t) = 0$. Explícitamente:

$$u(x, t) = u_0 + I(1 - R) \left[2 \frac{\sqrt{t}}{\sqrt{\pi \kappa \rho c_p}} \exp \left(- \left(\frac{x}{2 \sqrt{\frac{\rho c_p}{\kappa t}}} \right)^2 \right) - \frac{x}{\kappa} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2 \sqrt{\frac{\rho c_p}{\kappa t}}} \right) \right] \quad (8)$$

En particular se obtiene:

$$u(0, t) = u_0 + 2I(1 - R) \left(\frac{\sqrt{t}}{\sqrt{\pi \kappa \rho c_p}} \right) \quad (9)$$

de donde el tiempo necesario para que el extremo del material llegue a temperatura de fusión es:

$$t_f = \frac{\pi}{4} \kappa \rho c_p \frac{(u_f - u_0)^2}{(I(1 - R))^2} \quad (10)$$

Para que haya fusión debiera ser $t_f \leq T$, de donde:

$$F \geq \frac{\sqrt{\pi \kappa \rho c_p T}}{(1 - R)} \frac{(u_f - u_0)}{2} \quad (11)$$

Si el calor latente de fusión es mucho menor que el de evaporación, podemos despreciarlo junto con el necesario para llevar el material a su punto de fusión, y utilizar la fórmula anterior para una estimación del umbral de evaporación. De los valores de las constantes físicas del Al se obtiene (pulsos de 10 ns) $F_f = 78 \text{ J.cm}^2$. Utilizando como reflectividad del estado líquido $R = .7$, se obtiene ($T = 10 \text{ nseg}$) $F_v = 1.62 \text{ J.cm}^2$.

IV. TRABAJO NUMÉRICO

Se resolvió numéricamente el modelo de la sección anterior usando diferencias finitas centradas conservativamente sobre una malla homogénea, para discretizar la parte espacial de:

$$\left(\rho c_p (u) + \lambda_f \delta_a (u - u_f) \right) u_t = \left(\kappa (u) u_x \right)_x \quad (12)$$

Aquí δ_a es alguna función que aproxima a la δ . Hemos elegido la familia:

$$\delta_a(x) = \max \left(0, \frac{3}{4a} \left(1 - \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right) \right) \quad a > 0$$

tal que $\delta_a \rightarrow \delta$ cuando $a \rightarrow 0$. La parte temporal se resuelve por un método explícito de primer orden.

Debe satisfacerse además las condiciones (2)-(4), juntamente con (5) o (7). Notar que en esta formulación no aparece explícitamente la interfase sólido-líquido $x_1(t)$.

Se realizaron simulaciones para el caso de muestras de Al sometidas a pulsos de duración ~ 10 ns FWHM. En la Fig. 1 se muestran los valores de la temperatura superficial en función del tiempo, para varias fluencias, mientras que en la Fig. 2 se muestran las variaciones predichas para el programa para la reflectividad superficial del aluminio.

La Fig. 3 muestra la temperatura máxima alcanzada en función de la fluencia. Finalmente, en la Fig. 4 se muestran la profundidad del material evaporado por el pulso, y la velocidad máxima del frente de evaporización en función de la fluencia.

Notar que los umbrales son prácticamente los

predichos por las fórmulas aproximadas de la sección anterior.

V. CONCLUSIONES

Es interesante notar que las fluencias umbral son proporcionales a la raíz cuadrada de la duración del pulso. Además, para el caso del Al, difieren sólo en un factor 2, mientras los respectivos calores latentes difieren en un factor 10. Esto es debido a la disminución de la reflectividad con la temperatura, y muestra la importancia del modelado de la misma ⁷.

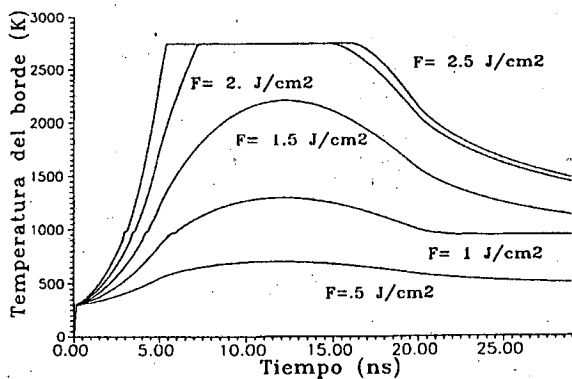


Fig. 1: Temperatura superficial del aluminio en función de t para varias fluencias. Constantes físicas del aluminio dadas en el apéndice A. Duración del pulso: 10 nseg FWHM.

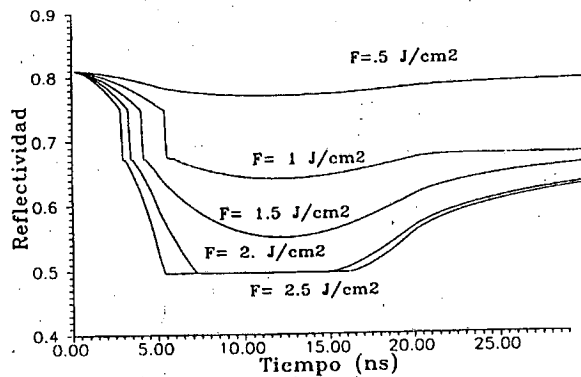


Fig. 2: Variación de la reflectividad del aluminio en función de t para varias fluencias. Constantes físicas del aluminio dadas en el apéndice A. Duración del pulso: 10 nseg FWHM.

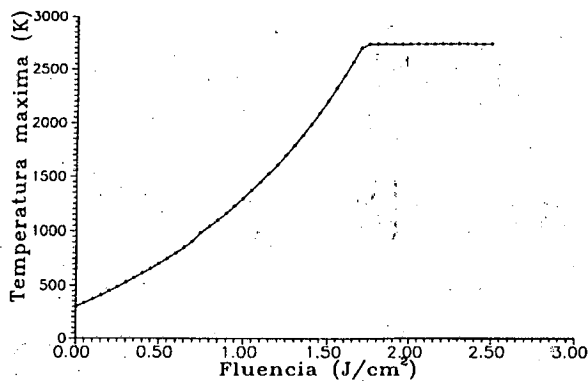


Fig. 3: Temperatura máxima en el aluminio vs. fluencia, obtenido numéricamente. Constantes físicas del aluminio dadas en el apéndice A. Duración del pulso: 10 nseg FWHM.

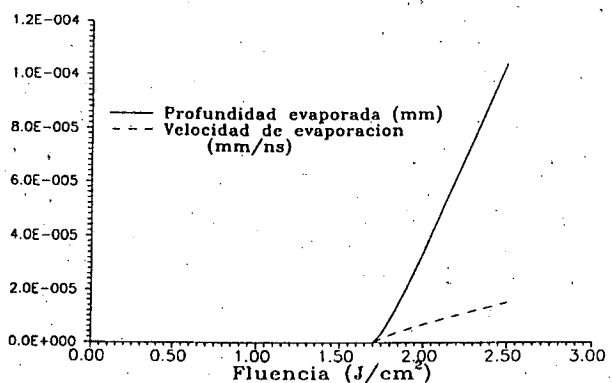


Fig. 4: Espesor del aluminio evaporado, y velocidad máxima del frente de evaporación vs. fluencia (numérico). Constantes físicas del aluminio dadas en el apéndice A. Duración del pulso: 10 nseg FWHM.

La comparación de los umbrales obtenidos para Al con los experimentales⁹⁻¹⁰ muestra diferencias del 30%, dentro del rango esperable².

APÉNDICE A: CONSTANTES FÍSICAS DEL ALUMINIO.

Los valores utilizados para las constantes físicas del aluminio son:

(1) Densidad $\rho = 2.52 \text{ g/cm}^3$

(2) Reflectividad $R = 0.84$ ⁸ aproximadamente independiente de la longitud de onda. Disminuye con la temperatura en forma aproximadamente lineal. Para las simulaciones numéricas se utilizó el siguiente modelo:

$$R(u) = 84 - 0.0001u - 0.07\Theta(u - u_f)$$

donde u es la temperatura, Θ la función salto unidad de Heaviside, y u_f la temperatura de fusión⁷.

(3) Calor específico: $u_f = 0.96 \text{ J/(g } ^\circ\text{K)}$.

(4) Conductividad termica (temperatura am-

biente: $\kappa = 220 \text{ J/(cm } ^\circ\text{K)}$.

(5) Calor latente de cambio de fase: Calor de fusión $\lambda_f = .956 \text{ J/mm}^3$. Calor de vaporización: $\lambda_v = 28.35 \text{ J/mm}^3$. La temperatura de fusión es $u_f = 933.3 \text{ } ^\circ\text{K}$, y la de vaporización $u_v = 2840 \text{ } ^\circ\text{K}$.

REFERENCIAS

1. M. K. El-Adawi, S. A. Shalaby. *J. Appl. Phys.* **63** (7). April 1988.
2. C. Surko, L. Simons, D. Auston, J. Golovchenko, R. Slusher, T. Venkatesan. *Appl. Phys. Lett.* **34** (10). May 1979.
3. I. Smurov, A. Uglov, A. Lashin, P. Matteazzi, V. Tagliaferri. *J. Appl. Phys.* **69** (12). June 1991.
4. C. E. Third, F. Weinberg, L. Young. *J. Appl. Phys.* **69** (12). June 1991.
5. C. Garrido, B. León, M. Pérez Amor. *J. Appl. Phys.* **69** (3). Feb. 1991.
6. J. Narayan. *Appl. Phys. Lett.* **34** (5). March 1979.
7. S. Cohen, P. Wyatt. *J. Appl. Phys.* **64** (10). Nov. 1988.
8. M. Aden, E. Beyer, G. Herzinger, M. Kunze. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **25** (1992).
9. M. Mesaros, J. Etcheverry, M. Marconi, O. Martínez, G. Bilmes, J. O. Tocho (Presentado en al 78° Reunion Nacional de Física. Enviado a publicar a Anales AFA.
10. J. Etcheverry, M. Mesaros, M. Marconi, O. Martínez (Presentado en la 78° Reunión Nacional de Física). Enviado a publicar a Anales AFA.