

MODELIZACION POR DINAMICA MOLECULAR DE LA PRODUCCION DE ONDAS ACUSTICAS EN MATERIALES IRRADIADOS CON LASER

J.I. Etcheverry¹, M. Mesaros²

¹ Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina

² Departamento de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires, Paseo Colón 850, Buenos Aires, Argentina

En este trabajo se reporta la modelización de la producción de ondas elásticas en materiales irradiados con láser mediante simulaciones de dinámica molecular en tres dimensiones espaciales. Se utilizan potenciales de Lénard-Jones, con redes del orden de las 500 000 partículas.

In this work we report the modelization of the elastic waves production upon laser irradiation of a sample. The simulations are carried out by molecular dynamics in three space dimensions. We use Lénard-Jones potentials, and lattices of about 500 000 particles.

1 Introducción

En un trabajo previo [1] se estudió por técnicas de dinámica molecular en dos dimensiones espaciales la producción de ondas acústicas por irradiación láser de materiales. En dicho trabajo, se demostró la factibilidad de obtener información sobre ondas elásticas utilizando muestras del orden de 250 000 partículas. En este trabajo se reporta la extensión a tres dimensiones espaciales del modelo de dinámica molecular, se muestran los desplazamientos producidos por las ondas acústicas y se presenta un análisis de instantáneas obtenidas de las posiciones y velocidades de las partículas luego de un pulso de fluencia suficientemente elevada como para producir ablación.

Entre las ventajas de la simulación tridimensional está la posibilidad de reproducir más adecuadamente los procesos de inestabilización del material irradiado asociadas con la ablación de material, la posibilidad de comparar con resultados experimentales, típicamente obtenidos en geometrías uni o tridimensionales (campo cercano o lejano, respectivamente), y la posibilidad de describir también las ondas transversales (que no existen en una dimensión espacial). Además, para irradiación con simetría radial, es posible promediar sobre anillos concéntricos con el eje z , de modo de reducir el ruido producido por las fluctuaciones de la muestra.

La principal desventaja, en cambio, es el tamaño mucho más reducido de las muestras que pueden ser simuladas (con la misma cantidad de partículas), la mayor complejidad del cálculo del potencial, y el significativo incremento en el número de

vecinos de cada partícula.

2 Resultados numéricos

En las simulaciones que se muestran en este trabajo el potencial utilizado es un potencial de dos cuerpos de tipo Lénard-Jones:

$$V(r) = \frac{\epsilon}{4\pi} \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right) \quad (1)$$

con parámetros de argón [2]: $\epsilon = 119.8 k (K)$, $\sigma = 3.406 \text{ \AA}$ (donde k es la constante de Boltzmann).

Utilizamos una malla inicial fcc de $91 \times 181 \times 31$ partículas, recortada en forma de un cilindro como muestra la Figura 1. Las velocidades iniciales de las partículas están puestas al azar con una distribución gaussiana correspondiente a la temperatura inicial, que en este caso es de 50 K.

En el esquema de la Figura 1 se muestra además la disposición relativa de la muestra, del láser incidente sobre ella, y la posición del detector utilizado para registrar las señales acústicas a su llegada a la cara inferior de la muestra. En las simulaciones reportadas en este trabajo, el detector tiene dos capas atómicas de espesor y un radio de 10 nm.

La irradiación del láser se simuló suponiendo un pulso de perfil gaussiano, tanto espacial como temporalmente. Para distribuir en profundidad la energía del pulso, se supuso un coeficiente de absorción del material proporcional a la densidad, de tal modo que el láser se atenuara en $1/e$ en ~ 20 nm.

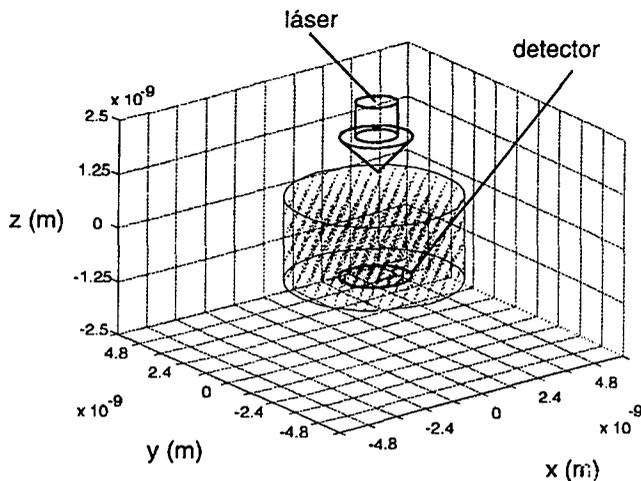


Figura 1: Diagrama esquemático de una muestra pequeña, mostrando la malla inicial, las celdas del dominio computacional, la posición del láser incidente, y la geometría del detector utilizado para registrar las señales acústicas.

En las simulaciones aquí presentadas, el ancho espacial del pulso láser es de $.025 \mu\text{m}$, y su ancho temporal es de 5 ps. El máximo de intensidad del pulso láser sobre la superficie de la muestra ocurre a $t=10$ ps.

Los desplazamientos del valor medio radial y de la posición en z de las partículas del detector correspondientes a irradiación con un pulso de 0.6 J/m^2 se muestran en la Figura 2. Se observa claramente la onda longitudinal (desplazamiento en z) que comienza a llegar muy poco después del final del pulso láser, con un posterior rebote longitudinal que llega al detector a $t \sim 30$ ps. La componente radial del desplazamiento da cuenta de la llegada de la onda transversal a la cara inferior de la muestra. En la Figura 3 se puede observar la posición de las partículas situadas en una sección paralela al plano $x - z$ que contiene al eje z , para tiempos 5 ps, 10 ps, 15 ps, 20 ps, 25 ps, y 30 ps. Las velocidades están representadas por los tonos de gris (más oscuro corresponde a mayor velocidad). Notar la ablación de material producida por el pulso, que comienza durante el pulso láser y que continúa aún después de finalizado el mismo. Notar además que las partículas más rápidas son expulsadas primero, en forma aislada, y que luego se produce expulsión de clusters a velocidades bastante inferiores. Esta es una de las características que complican la descripción de los

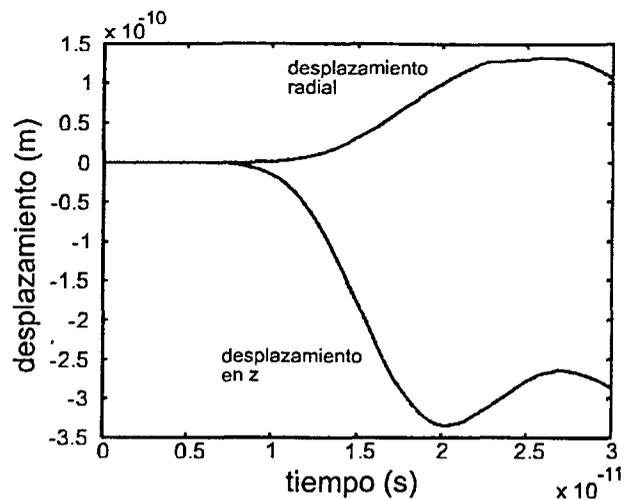


Figura 2: Desplazamientos en z y radiales registrados luego de irradiación con un pulso láser de 0.6 J/m^2 .

fenómenos de ablación por láser, pues una componente importante de la misma es debida a procesos de inestabilización colectiva que involucran muchas partículas y tiempos mucho más largos que la duración típica del pulso láser.

También es evidente en la Figura 3 la evolución de los planos cristalinos. Por ejemplo, entre los 15 y 20 ps se observa una deformación hacia abajo de la cara inferior de la muestra, producida por la llegada de la onda longitudinal (comparar con Figura 2). Hacia los 30 ps se observa la llegada de una nueva onda longitudinal, identificada como el rebote de la señal longitudinal en la cara inferior, y luego en la cara superior.

3 Conclusiones

En este trabajo se muestran resultados sobre la producción de ondas acústicas en materiales irradiados con pulsos láser de picosegundos, obtenidos mediante simulaciones de dinámica molecular en 3-D. Además, se muestra que es posible extraer de este tipo de simulaciones una gran cantidad de información sobre los procesos que producen la ablación de material a frecuencias elevadas.

Referencias

- [1] J.I. Etcheverry, M. Mesaros. Anales AFA vol. 9 (en prensa).
- [2] P.W. Atkins, Físico-química. Tercera edición Addison Wesley Iberoamericana, (1991).

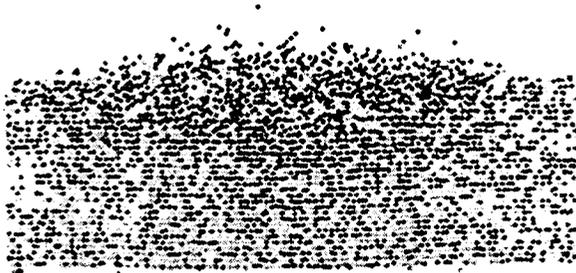
a)



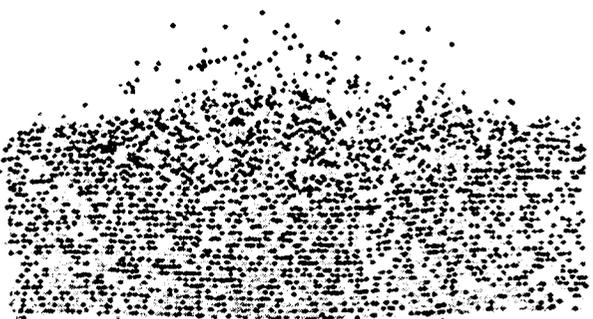
b)



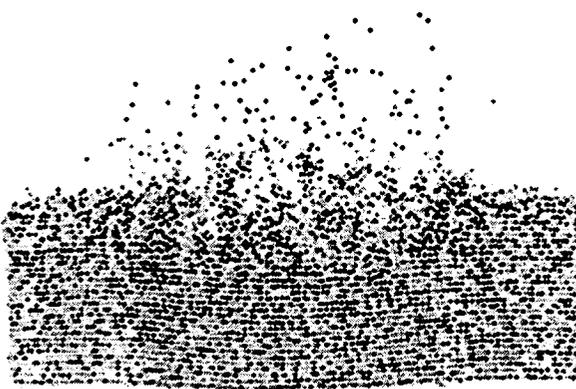
c)



d)



e)



f)

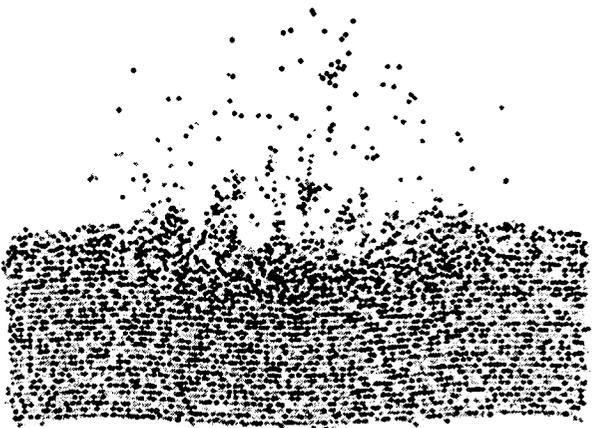


Figura 3: Posiciones de las partículas contenidas en una sección de la muestra, paralela al plano x, z , que contiene al eje z , para distintos tiempos: a) 5 ps, b) 10 ps, c) 15 ps, d) 20 ps, e) 25 ps, f) 30 ps. La velocidad de las partículas está representada con el tono de gris (más oscuro=más rápida).