

۱۴۱۷



دانشگاه شهید بهشتی

پژوهشکده لیزر و پلاسما

پایان نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد فوتونیک

عنوان:

حل عددی، بسط و گسترش پلاسما در فرآیند برهمکنش لیزر با فلز

دانشجو:

نیما نوری

استاد راهنما:

سید حسن توسلی

۱۳۸۸/۱۲/۲

تاریخ دفاع

۱۳۸۸/۴/۱۰

۱۳۱۷۷۷



دانشگاه شهید بهشتی

تاریخ:
شماره:
پوست:

بسمه تعالی

شماره: ۱۹۸۳۹۰۳۱۱۳ آوین

تلفن: ۲۹۹۰۱

« صور تجلسه دفاع از پایان نامه دانشجویان دوره کارشناسی ارشد»

بازگشت به مجوز دفاع شماره ۸۷/۱۰۲۰۰/۲۰۰۴ مورخ ۸۸/۳/۲۶ جلسه هیأت داوران ارزیابی پایان نامه آقای نیما نوری به شناسنامه شماره ۱۱۶۰ صادره از شمیران متولد ۱۳۶۳ دانشجوی دوره کارشناسی ارشد ناپیوسته رشته فوتونیک با عنوان:

« حل عددی بسط و گسترش پلازما در فرآیند برهمکنش لیزر با فلز »

به راهنمایی: دکتر توسلی

طبق دعوت قبلی در تاریخ ۸۸/۴/۳ تشکیل گردید و براساس رأی هیأت داورى و با عنایت به ماده ۲۰ آئین نامه کارشناسی ارشد مورخ ۷۵/۱۰/۲۵ پایان نامه مزبور با نمره ۱۹٫۲۰ و درجه خیلی مورد تصویب قرار گرفت.

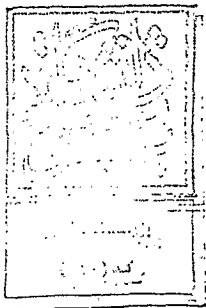
۱- استاد راهنما: دکتر توسلی

۲- استاد مشاور: -----

۳- استاد داور خارجی: دکتر قربانعلی

۴- استاد داور داخلی: دکتر نیکنام

۵- نماینده تحصیلات تکمیلی پژوهشکده: دکتر قمی مرزدشتی



تقدیم به

پدرم

مادرم

و نسیم دلم

و با تشکر از کمک‌های بی‌دریغ جناب آقای دکتر توسلی

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه

- ۱-۱ حوزه کاربردهای کندگی لیزری ۱
- ۲-۱ مروری بر مدل‌های متفاوت کندگی لیزری ۳
- ۳-۱ اساس فرآیند کندگی لیزری ۴
- ۱-۳-۱ برهم کنش لیزر با ماده ۵
- ۲-۳-۱ پخش ذرات کنده شده در محیط (خلا یا گاز) ۵
- ۳-۳-۱ تابش پلاسمای ناشی از برهم کنش لیزر با ماده ۷
- ۴-۱ شکل‌گیری ذرات در فرآیند کندگی لیزری ۸
- ۵-۱ مدل پایه موجود برای بررسی کندگی لیزری ۱۰

فصل دوم: اصول روش محاسباتی مونت کارلو

- ۱-۲ مقدمه ۱۲
- ۲-۲ انتگرال‌گیری مونت کارلو ۱۳
- ۱-۲-۲ روش برخورد خطا ۱۳
- ۲-۲-۲ انتگرال‌گیری به روش میانگین نمونه ۱۴
- ۳-۲ محاسبه خواص ترمودینامیکی با استفاده از انتگرال‌گیری مونت کارلو ۱۶
- ۱-۳-۲ نمونه برداری ساده ۱۷
- ۲-۳-۲ نمونه برداری با اهمیت ۱۸
- ۳-۳-۲ الگوریتم متروپلیس ۲۰
- ۴-۲ شبیه‌سازی مونت کارلو در هنگرد کانونی (NVT) ۲۱
- ۱-۴-۲ جابه‌جایی تک جزء ۲۲

- ۲-۴-۲ جابه‌جایی چند جزء..... ۲۴
- ۵-۲ شبیه‌سازی مونت کارلو در هنگرد هم‌دما-هم‌فشار (NPT)..... ۲۵

فصل سوم: بررسی فیزیک کندگی لیزری

- ۱-۳ مقدمه..... ۲۸
- ۲-۳ گرمایش، ذوب و تبخیر سطح..... ۲۸
- ۳-۳ شکل‌گیری پلاسما..... ۳۰
- ۴-۳ شرط تعادل ترمودینامیکی..... ۳۱
- ۵-۳ جذب ناشی از پلاسما..... ۳۴
- ۶-۳ تابش پلاسما..... ۳۵
- ۱-۶-۳ تابش طیفی..... ۳۵
- ۲-۶-۳ تابش برمشترلانگ..... ۳۸

فصل چهارم: شبیه‌سازی مستقیم جریان‌های گازی به روش مونت کارلو

- ۱-۴ مدل ملکولی..... ۴۰
- ۱-۱-۴ مقدمه..... ۴۰
- ۲-۱-۴ مروری بر خصوصیات عمومی گازها..... ۴۱
- ۲-۴ برخورد الاستیک دو ذره..... ۴۵
- ۱-۲-۴ اندازه حرکت و توزیع انرژی..... ۴۵
- ۲-۲-۴ پارامترهای برخورد و سطح مقطع برخورد..... ۴۹
- ۳-۲-۴ دینامیک برخورد..... ۵۰
- I. مدل قانون توان معکوس..... ۵۳
- II. مدل کره سخت..... ۵۵

- III مدل کره سخت متغير..... ۵۶.....
- ۳-۴ توزیع ماکسولی سرعت‌ها..... ۵۷.....
- ۴-۴ نمونه برداری تصادفی از یک تابع توزیع..... ۶۲.....
- ۵-۴ قضایای عمومی مربوط به روش شبیه سازی مستقیم..... ۶۶.....
- ۱-۵-۴ مقدمه..... ۶۶.....
- ۲-۵-۴ ارتباط با معادله بولتزمن..... ۶۷.....
- ۳-۵-۴ بازه‌های زمانی و مکانی و تعداد ذرات موجود در شبیه‌سازی..... ۶۸.....
- ۴-۵-۴ روش نمونه برداری از برخوردها..... ۶۹.....

فصل پنجم: نتایج

- ۱-۵ شبیه سازی پالس لیزری..... ۷۱.....
- ۲-۵ برهم‌کنش لیزر با ماده..... ۷۳.....
- ۳-۵ پخش توده پلاسما در گاز محیط..... ۷۵.....
- ۴-۵ تابش پلاسما..... ۷۹.....
- نتیجه‌گیری و پیشنهادات..... ۸۱.....
- مراجع..... ۸۲.....
- چکیده به انگلیسی..... ۹۲.....

فهرست شکلها

- شکل ۱-۱: حالت‌های گذار تابشی موجود در اتم یا یون. به ترتیب از چپ به راست: وابسته - وابسته، آزاد - وابسته، آزاد - آزاد..... ۸
- شکل ۱-۲: ساختار هندسی مورد نیاز برای روش انتگرال‌گیری برخورد و خطا برای محاسبه مساحت یک دایره با شعاع واحد..... ۱۴
- شکل ۲-۲: شکل سمت چپ نحوه ایجاد پیکربندی j (حالت جدید) از پیکربندی i (حالت قدیم) برای ذره دلخواه p و شکل سمت راست تعریف δr_{\max} و ناحیه مجاز حرکت، R ، برای ذره p ۲۲
- شکل ۱-۴: برخورد دو کره به شعاع a ۴۲
- شکل ۲-۴: برخورد دو ملکول به طوریکه مرکز مولکول A' در داخل حجم جاروب شده بوسیله قرصی که مولکول A حمل می‌کند قرار دارد..... ۴۲
- شکل ۳-۴: دستگاه‌های مرجع برای تحلیل برخورد دو مولکول..... ۴۸
- شکل ۴-۴: نمایش پارامترهای برخورد..... ۵۰
- شکل ۵-۴: هندسه برخورد دو مولکول در مدل کره سخت..... ۵۶
- شکل ۱-۵: پالس لیزری رسیده به سطح ماده هدف قبل و بعد از تشکیل سپر پلاسمایی..... ۷۱
- شکل ۲-۵: نمای سه بعدی پالس لیزری بر حسب زمان و مکان..... ۷۲
- شکل ۳-۵: نمای دو بعدی طیفی پالس لیزری..... ۷۲
- شکل ۴-۵: نمای دو بعدی از چگونگی کندگی لیزری بوسیله لیزر نانو ثانیه..... ۷۳

شکل ۵-۵: (a) توزیع زمانی دمای سطح، (b) نرخ کندگی سطح ماده بر اثر تبخیر و (c) عمق کندگی بر حسب زمان (خطوط مشکی) و توزیع زمانی پالس لیزری رسیده به سطح پس از عبور از سپر پلاسمایی (خطوط طوسی)..... ۷۴

شکل ۵-۶: توزیع فضایی (a) چگالی عددی مس، (b) چگالی عددی هلیوم، (c) دما و (d) فشار توده بخار در زمان‌های 50ns (قرمز)، 100 ns (آبی)، 150ns (سبز)، 200ns (قهوه‌ای) و 250ns (نیلی)..... ۷۵

شکل ۵-۷: توزیع فضایی، (a) چگالی تعداد Cu، (b) دمای توده و (c) فشار توده در زمان‌های متفاوت: 50ns، 100ns (۲)، 150ns (۳)، 200ns (۴) و 250ns (۵)، در دو بعد: مرکز (آبی)، 300μm (قرمز)، 600μm (سبز) و 900μm (سورمه‌ای)..... ۷۷

شکل ۵-۸: ۵ تصویر لحظه‌ای از توزیع فضایی چگالی تعداد مس (a) و نقشه رنگی از توزیع دمایی توده پلاسما (b) در زمان‌های متفاوت: 50ns، 100ns، 150ns، 200ns و 250ns..... ۷۸

شکل ۵-۹: توزیع زمانی تابش طیفی پلاسمای ناشی از مس، 521nm (خط)، 515nm (خط چین) و 510nm (نقطه چین)..... ۷۹

شکل ۵-۱۰: توزیع فضایی تابش ترمزی (آبی) و تابش طیفی (قرمز) در طول موج‌های 510nm (A)، 515nm (B) و 521nm (C) و در زمان‌های متفاوت ۵۰، ۱۰۰، ۱۵۰، ۲۰۰ و ۲۵۰ نانوثانیه..... ۸۰

چکیده پایان نامه

در این کار پدیده پخش پلاسمای ناشی از برهم کنش لیزر با ماده در حضور گاز هلیوم (با فشار یک اتمسفر) بوسیله روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو^۱ در سه بعد مطالعه شده است. در این پژوهش یک مدل محاسباتی سه مرحله‌ای برای توصیف چگونگی پخش توده پلاسما، در نظر گرفته شده است. مرحله اول، شامل برهم کنش لیزر با ماده و کنده شدن ذرات از ماده هدف می‌باشد که بوسیله مدل تبخیر حرارتی^۲ بررسی خواهد شد. در مرحله دوم چگونگی پخش ذرات کنده شده از سطح ماده هدف، بوسیله روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو بررسی خواهد شد. مرحله سوم شامل دو فرآیند متفاوت (تابش و جذب توده پلاسما) برای بررسی تغییرات انرژی توده پلاسما می‌باشد. مرحله اول جذب انرژی توسط توده پلاسما که سپر پلاسمایی^۳ نامیده می‌شود. پدیده‌های فوتو یونیزاسیون^۴ و برمشترلانگ معکوس^۵ دو عامل موثر در ایجاد سپر پلاسمایی می‌باشند. این دو پدیده باعث یک افت شدید در میزان شدت لیزری رسیده به سطح ماده می‌شوند. پدیده جذب به روش برمشترلانگ معکوس شامل دو نوع الکترون-سختی و الکترون-یون می‌باشد. مکانیزم دیگری که موجب تغییر انرژی توده پلاسمایی می‌شود، میزان انرژی گسیل شده توسط توده پلاسما در واحد حجم و زمان می‌باشد. این پدیده در دو نوع تابش طیفی و برمشترلانگ بررسی می‌شود.

سرانجام قسمت‌های مختلف فرآیند شامل انتقال حرارتی، تبخیر، پخش، شکل گیری پلاسما، جذب و تابش پلاسما به منظور بدست آوردن یک نمای کلی از چگونگی فرآیند برهم کنش لیزر نانو ثانیه با ماده هدف (مس) به صورت موازی و تابعی از زمان بررسی می‌شود. هدف این پروژه بررسی و تحلیل پارامترهای موجود در توده پلاسما اعم از دما، چگالی، فشار و... برای استفاده در روش طیف سنتزی پلاسمای جفت شده القایی^۶ و همچنین در لایه نشانی لیزری^۷ می‌باشد. همچنین، پیش‌بینی بهینه زمان ممکن

¹ Direct Simulation Monte Carlo

² thermal evaporation model

³ Plasma shielding

⁴ Photo-ionization

⁵ inverse bremsstrahlung

⁶ Inductively Coupled Plasma (ICP) Spectrometry

⁷ Pulsed Laser Deposition (PLD)

برای بررسی تابش‌های طیفی حاصل از توده پلاسما، برای استفاده در روش طیف نمایی تخلیه لیزری القایی^۱، از دیگر اهداف این پروژه می‌باشد.

کلید واژه‌ها:

کندگی لیزری، شبیه‌سازی مستقیم، مونت کارلو، پخش پلاسما، تابش پلاسما، سپر پلاسمایی

¹ Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS)

فصل اول

مقدمه

در طول فرآیند کندگی لیزری یک پالس لیزری به سطح ماده هدف تابانده می‌شود. انرژی حاصل از پالس لیزری بر اثر فرآیندهای فیزیکی، توسط شبکه ماده هدف جذب شده و باعث افزایش دمای ماده هدف و نهایتاً ذوب و یا تبخیر آن می‌شود. این امر موجب ایجاد یک حفره داخل ماده هدف شده و مواد کنده شده، به داخل محیط اطراف پاشیده می‌شوند.

۱-۱- حوزه کاربردهای کندگی لیزری^۱

حوزه کاربردهای کندگی لیزری بسیار وسیع است. به عنوان مثال می‌توان به کاربردهای آن در لایه نشانی لیزری^۲ [۱-۳]، تولید نانو پارتیکل‌ها^۳ [۴]، عمل‌های جراحی [۵] و در آنالیزهای شیمیایی [۶-۸] اشاره کرد. چگونگی فرآیند بر هم کنش لیزر با ماده و تشکیل توده پلاسما در بسیاری از روش‌های آنالیز عناصر حائز اهمیت است. از آن جمله می‌توان به موارد زیر اشاره کرد

[۹] Matrix Assisted Laser Desorption Ionization (MALDI)

^۱ Laser Ablation (LA)

^۲ Pulsed Laser Deposition (PLD)

^۳ nanoparticle manufacturing

[۱۰] Laser Microprobe Mass Spectrometry (LMMS)

[۱۱] Laser Induced Breakdown Spectrometry (LIBS)

[۱۲-۱۸] Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry (ICP-MS)

[۱۲-۱۸] Inductively Coupled Plasma Optical Emission Spectrometry (ICP-OES)

با وجود کاربردهای بسیار وسیع کندگی لیزری در صنعت، هنوز بسیاری از بخش‌های این فرآیند ناشناخته باقی مانده است. همچنین می‌بایست توجه داشت که ویژگی‌هایی مانند انواع متفاوت ماده هدف، شدت لیزر و طول موج لیزر باعث گستردگی هر چه بیشتر حوزه تحقیقاتی این فرآیند می‌شود، به طوری که حتی LIBS^۱ که یکی از روش‌های بسیار مفید امروزی در تحلیل عناصر مواد است، به علت عدم شناخت کافی نسبت به بخش‌های متفاوت آن مانند فرآیندهای کندگی، انتقال ذرات، تبخیر، یونیزاسیون و غیره دارای یک سری اشکالات در نتایج خود می‌باشد. این امر محققان را بر این واداشته است که با ایجاد یک سری مدل‌های کمکی، محدوده خطاهای موجود را به حداقل برسانند. بنابراین ما در این کار سعی کرده‌ایم با ایجاد یک مدل عددی و بوسیله شبیه‌سازی کامپیوتری بخش‌های متفاوتی که در طول فرآیند کندگی لیزری رخ می‌دهد را در حد امکان به صورت دقیق توصیف و بررسی کنیم. در گام نخست سعی شده است که مشخصه‌های مهم تر این فرآیند، به منظور شناخت هر چه بیشتر آن توصیف شود.

یکی از کاربردهای فرآیند کندگی لیزر نانو ثانیه در روش‌های آنالیز عنصری مواد مانند ICP-MS^۲ و LIBS می‌باشد. لازم به ذکر است که اساس دو روش بالا بر چگونگی وقوع این فرآیند بنا نهاده شده است. کندگی لیزری مرحله نخست در ICP-MS و LIBS می‌باشد و آثار آن، می‌تواند در میزان دقت و صحت آزمایش بسیار تاثیرگذار باشد.

^۱ Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS)

^۲ Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry (ICP-MS)

۱-۲- مروری بر مدل‌های متفاوت کندگی لیزری

به طور کلی یک محدوده وسیعی از مدل‌ها، برای بررسی جنبه‌های متفاوت کندگی لیزری وجود دارد. این محدوده شامل نواحی مختلف طیفی (UV, Vis, IR)، انواع شدت‌ها ($10^4 - 10^{10} \text{ W/cm}^2$)، انواع طول موج‌ها (fs, ps, ns)، جنس‌های متفاوت ماده هدف (فلزات، مواد آلی،...) و گازهای محیط در فشارهای متفاوت (خلا، گازهای احاطه کننده) می‌باشد. تعداد زیادی از مدل‌هایی که به توصیف برهم‌کنش لیزر با ماده می‌پردازند، مبتنی بر فرآیندهای حرارتی هستند. گرمایش سطح و به دنبال آن ذوب و تبخیر. این قسم از مدل‌ها، برهم‌کنش لیزر با ماده را از لحاظ ویژگی‌های ماکروسکوپیکی مبتنی بر معادله رسانش گرمایی بررسی می‌کنند [۱۹-۳۶]. استفاده از این معادله در مورد پالس‌های لیزری نانو ثانیه و به خصوص برای هدف‌های فلزی صادق می‌باشد. در این نوع از هدف‌ها، نور لیزر توسط سطح فلزی هدف جذب شده و فرآیند گرمایش صورت می‌پذیرد. یک مقدار از انرژی اپتیکی نور لیزر توسط الکترون جذب می‌شود. الکترون به ترازهای بالاتر یعنی ترازهای گسیل، گذار می‌یابد. در آنجا بر اثر برخورد با فونون‌های شبکه، انرژی جذب شده را به شبکه انتقال می‌یابد. از آنجا که در فلزات زمان واهلش انرژی در حدود 10^{-13} S می‌باشد [۳۷، ۱]، انرژی اپتیکی لیزر را می‌توان به عنوان گرمای تبدیل آبی در کندگی پالس‌های لیزری نانو ثانیه در نظر گرفت. در این صورت مفاهیم دما و رسانش گرمایی قابل کاربرد می‌باشند [۳۷]. در پالس‌های لیزری پیکو ثانیه انرژی اپتیکی لیزر را نمی‌توان به عنوان گرمای تبدیل آبی در نظر گرفت. در این حالت ما یک مدل دو دمایی نیاز خواهیم داشت که بتواند چگونگی رابطه مابین دمای الکترونی و دمای شبکه را توصیف کند [۳۸-۴۵]. تعداد اندکی از مدل‌ها خواص میکروسکوپیکی این فرآیند را مورد بررسی قرار داده‌اند. برخی از این مدل‌ها مبتنی بر معادله انتقال بولتزمن^۱ چگونگی انتقال انرژی را در برخوردهای مابین الکترون-الکترون و الکترون‌ها با شبکه توصیف می‌کنند [۴۶]. برخی دیگر مبتنی بر شبیه سازی دینامیک مولکولی برای فلزات [۴۸، ۴۷] و برای مواد آلی [۴۹-۵۳] این فرآیند را توصیف می‌کنند. به طور کلی هر یک از مدل‌های مذکور به علت حجم بالای محاسبات بسیار زمان گیر می‌باشند. یک مدل مزوسکوپیکی [۵۴-۵۷] سعی کرده است

¹ Boltzmann transport equation

که یک رابطه معقول مابین ویژگی‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی فراهم کند. این مدل نسبت به مدل‌های دیگر از لحاظ زمان محاسبات مطلوب‌تر است. همچنین با استفاده از این مدل رفتارهای غیر تعادلی را نیز می‌توان در حد مطلوبی توصیف کرد [۵۸-۶۴]. تعدادی از مدل‌ها علاوه بر برهم‌کنش لیزر با ماده چگونگی پخش توده مواد تبخیر شده را نیز مورد بررسی قرار داده‌اند. برخی از این مدل‌ها چگونگی پخش توده بخار را توسط معادلات هیدرودینامیکی [۶۵-۷۹، ۳۶-۲۳] توصیف می‌کنند. گروهی دیگر برای بررسی این پدیده از روش شبیه‌سازی مونت کارلو [۸۰-۹۰] و یا از ترکیبی از هر دو مدل [۹۱، ۹۲] استفاده می‌کنند. اکثر مدل‌های هیدرودینامیکی به موازات پخش توده بخار، شکل‌گیری پلازما را نیز بررسی می‌کنند [۷۵، ۷۴، ۷۲-۶۵، ۳۶-۲۷]. تعداد کمی از مدل‌ها بدون در نظر گرفتن فرآیند پخش، تنها بر روی شکل‌گیری پلازما متمرکز شده‌اند [۹۴، ۹۳، ۶۴] و تعداد محدودی نیز جذب انرژی توسط توده پلازما را بررسی کرده‌اند [۹۷-۹۵].

۱-۳- اساس فرآیند کندگی لیزری

فرآیند کندگی لیزری از قسمت‌های متعددی که به صورت غیر خطی به هم مربوط هستند تشکیل شده است. برهم‌کنش لیزر با ماده، کندگی ماده از سطح به شکل الکترون‌ها، یون‌ها، اتم‌ها، مولکول‌ها، خوشه‌ها و ذرات که هر یک از این بخش‌ها می‌بایست به صورت مجزا در زمان و مکان بررسی شود. چگونگی ارتباط مناسب بین هر یک از این بخش‌ها نیازمند یک بینش عمیق نسبت به فیزیک آن‌ها می‌باشد. فهم دقیق چگونگی برهم‌کنش لیزر با ماده در مرحله نخست این فرآیند، تاثیر بسیار زیادی در بررسی مراحل دیگر و بدست آوردن نتایج قابل قبول در ICP-MS و LIBS خواهد گذاشت.

فرآیند کندگی لیزری را می‌توان در سه بخش اصلی تعریف کرد:

- برهم‌کنش لیزر با ماده و کندگی ماده هدف
- پخش ذرات کنده شده در محیط (خلا یا گاز)
- تابش پلاسمای ناشی از برهم‌کنش لیزر با ماده

۱-۳-۱- بر هم کنش لیزر با ماده و کندگی ماده هدف

برای یک پالس لیزر نانو ثانیه با بیشترین شدت در حدود 10^9 W/cm^2 تبخیر حرارتی سطح بخش حائز اهمیت سیستم می‌باشد. در این مرحله دمای سطح افزایش می‌یابد و زمانی که به مقدار لازم افزایش یافت گذار فازی از جامد به مایع رخ می‌دهد. برای یک پالس لیزر پیکو ثانیه با بیشترین شدت در حدود $10^{13} - 10^{10} \text{ W/cm}^2$ علاوه بر پدیده‌های حرارتی، پدیده‌های غیر حرارتی مانند انفجار کولمب^۱ نیز صورت می‌گیرد و برای یک پالس لیزر فمتو ثانیه با بیشترین شدت در حدود 10^{13} W/cm^2 انفجار کولمب بخش حائز اهمیت سیستم می‌باشد.

هنگامی که پالس لیزر مورد استفاده، از نوع لیزرهای نانو ثانیه است، قسمت انتهایی پالس بوسیله پلاسمای ایجاد شده در بالای سطح هدف جذب خواهد شد (سپر پلاسمایی) و شدت لیزری که به سطح ماده می‌رسد کاهش می‌یابد. جذب لیزر توسط پلاسمای تاثیر قابل توجهی بر روی میزان کندگی هدف و ویژگی‌های توده پلاسمایی خواهد داشت. اما در حالتی که، از پالس لیزری فمتو ثانیه در کندگی لیزری استفاده شود، زمان تابش لیزر بسیار کوتاه تر از آن است که توسط پلاسمای ایجاد شده جذب شود

۱-۳-۲- پخش ذرات کننده شده در محیط (خلا یا گاز)

به محض آنکه کندگی ماده هدف آغاز شد، پخش توده پلاسمایی صورت می‌گیرد. چگونگی فرآیند پخش، یک عامل حاکم و تاثیر گذار بر روی ویژگی‌های اولیه (انتهای پالس لیزر) توده پلاسمای می‌باشد. ویژگی‌های پلاسمای اولیه همچون چگالی تعداد الکترون‌ها، دما و سرعت پخش توده به شدت وابسته به ویژگی‌های پالس لیزر می‌باشد. فرآیند پخش پلاسمای به مقدار جرم اولیه کننده شده و میزان انرژی توده بخار بستگی دارد. این فرآیند تقریباً تا ۱ میکرو ثانیه پس از آغاز تابش پالس لیزر، هم دما می‌باشد، اما پس از آن با افت شدید دما، میزان انرژی توده پلاسمای هم کاهش می‌یابد.

^۱ Coulomb

تقریباً تمام مدل‌هایی که تاکنون پدیده کندگی لیزری را بررسی کرده‌اند، به دنبال برهم‌کنش لیزر با ماده، فرآیند پخش توده بخار داخل خلا یا گاز کم فشار محیط (زیر ۱۰۰ پاسکال) را نیز مورد بررسی قرار داده‌اند. بخشی از آنها تاثیر گاز محیط بر روی پخش توده پلاسمایی را بوسیله مدل‌های هیدرودینامیکی [۶۷-۷۹، ۳۰-۲۵] بررسی کرده‌اند، اما در اکثر آنها فشار گاز محیط تقریباً کمتر از ۱۰۰ پاسکال در نظر گرفته شده است [۶۷-۷۳، ۳۰-۲۸]، تنها تعداد محدودی با فشار محیط ۱ اتمسفر [۷۴-۷۹، ۲۷-۲۵] کار خود را انجام داده‌اند. گاز محیط تاثیر بسزایی بر روی کاهش سرعت و حجم توده بخار می‌گذارد. همچنین بر اثر وجود گاز محیط، فرآیندهای دیگری همچون فشردگی موضعی توده بخار^۱ و عقب رفت مواد پخش شده، پدیدار می‌شوند [۲۹]. در اکثر موارد اثر گاز زمینه بدون در نظر گرفتن معادلات بقا یا پارامترهای اضافی که بر معادلات پخش توده حاکم می‌باشند، بررسی شده است. در حالی که این عوامل برای توصیف هر چه واقعی‌تر این پدیده به خصوص در حضور گاز زمینه ۱ اتمسفری ضروری می‌باشند. معادلات هیدرودینامیکی برخی از مدل‌ها، شامل یک سری پارامترهای پراکندگی هستند که بوسیله آنها انتقال اندازه حرکت، از توده پلاسما به گاز زمینه را محاسبه می‌کنند [۷۲-۷۰]. اما این مدل‌ها تنها برای فشارهای پایین تر از ۵۰ پاسکال در نظر گرفته شده‌اند. برخی دیگر از مدل‌ها، بر هم کنش بین دو گونه متفاوت (توده بخار و گاز محیط) را در نظر گرفته‌اند [۷۸-۷۶]. این مدل فرآیند پخش را در یک گاز زمینه ۱ اتمسفری ولی با یک پالس لیزری بلند (در حدود میلی ثانیه) و با شدت بسیار پایین ($10^4 - 10^5 \text{ W/cm}^2$) در نظر گرفته است. بنابراین در چنین مدلی بررسی پلاسما امکان پذیر نمی‌باشد. یک مدل مشابه برای پالس لیزری با شدت بالا طراحی شده بود ولی باز هم در آن شکل گیری پلاسما بررسی نشده است [۷۹]. سرانجام اثر گاز زمینه در چندین مدل شبیه سازی مونت کارلو [۸۶-۹۰] و یا به صورت ترکیبی از مدل‌های هیدرودینامیکی - مدل‌های مونت کارلو [۹۲، ۹۱] بررسی شد، اما مجدداً در آنها، فشار گاز زمینه پایین و در حدود ۱۰۰ پاسکال در نظر گرفته شده است. به هر حال در روش ICP محفظه آزمایش توسط گاز (عموماً هلیوم یا آرگون) در فشار ۱ اتمسفر پر می‌شود که این امر به انتقال مواد کنده شده به داخل ICP کمک می‌کند [۱۴]. همچنین در LIBS، پدیده کندگی در اکثر موارد در فشار ۱ اتمسفر [۹۸، ۹۴، ۷۴] صورت می‌گیرد. اگرچه روش LIBS

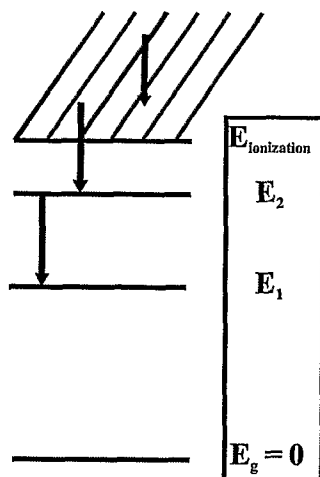
¹ shock wave

در یک محدوده وسیع از فشار گاز محیط ($10^{-5} - 1 \text{ atm}$) ممکن خواهد بود [۹۸، ۹۹]. به طور کلی آزمایشات مختلف [۱۰۰] نشان داده‌اند که فشار گاز محیط تاثیر بسزایی روی چگونگی پخش توده پلاسمایی دارد. همچنین آزمایشات دیگر [۱۰۱، ۱۰۲] نشان داده‌اند که فشار گاز محیط بر روی بازدهی کندگی لیزری بسیار تاثیر گذار است. بعلاوه وجود گاز محیط با یک پتانسیل یونیزاسیون بالا (He) باعث افزایش شدت تابش ICP خواهد شد. بنابراین برای بدست آوردن یک توصیف حقیقی از کندگی لیزری می‌بایست گاز زمینه را در نظر گرفت.

۱-۳-۳- تابش پلاسمای ناشی از برهم کنش لیزر با ماده

از آنجا که دمای مواد کنده شده از سطح بسیار بالاست، بخار حاصل از کندگی لیزری به صورت یونیزه خواهد بود. در این حالت در بالای سطح هدف یک پلاسما تشکیل می‌شود. بر اثر تعداد برخوردهای بسیار بالا مابین گونه‌های مختلف موجود در پلاسما (اتم‌ها، یون‌ها، الکترون‌ها و ذرات ختشی)، می‌توان پلاسما را در حالت تعادل حرارتی موضعی^۱ در نظر گرفت. پلاسمای ایجاد شده شامل سه نوع تابش می‌باشد. تابش ترمزی، باز ترکیبی و طیفی. در زمان‌های اولیه تشکیل پلاسما، میزان یونیزاسیون بسیار بالاست. به طوریکه باز ترکیب یون - الکترون افزایش می‌یابد، اتم‌های ختشی و سپس مولکول‌ها شکل می‌یابند. به موازات تابش طیفی، تابش ترمزی نیز یکی از تابش‌های حاصل از پلاسما می‌باشد، که در زمان‌های اولیه دارای شدت بیشتری نسبت به تابش طیفی می‌باشد ولی با گذشت زمان شدت آن بسیار سریعتر از شدت تابش طیفی افت می‌کند. تابش ترمزی و باز ترکیبی از انواع تابش‌های پیوسته می‌باشند. تابش‌های پیوسته پلاسما از گذار-های مابین ترازهای آزاد - آزاد (ترمزی) و آزاد - وابسته (باز ترکیبی) حاصل می‌شود. در فرآیند تابش ترمزی فوتون توسط یک الکترون که سرعت آن تغییر یافته است گسیل می‌شود. یک تابش باز ترکیبی بر اثر جذب یک الکترون آزاد بوسیله ترازهای انرژی اتمی یا یونی حاصل می‌شود. در این حالت الکترون، انرژی جنبشی خود را به صورت فوتون رها می‌کند. در شکل (۱-۱) انواع این تابش‌ها نشان داده شده است.

¹ Local Thermal Equilibrium - LTE



شکل (۱-۱): گذارهای تابشی موجود در اتم یا یون. به ترتیب از چپ به راست: وابسته - وابسته (طیفی)، آزاد - وابسته (باز ترکیبی)، آزاد - آزاد (ترمزی)

۱-۴- شکل گیری ذرات در فرآیند کندگی لیزری

باید به این نکته توجه داشت که توده بخار تشکیل شده در فرآیند کندگی لیزری علاوه بر اتم‌ها، شامل ذراتی است که یا مستقیماً از برهم‌کنش لیزر با ماده و یا بر اثر تراکم مواد کنده شده در توده حاصل شده‌اند. این ذرات موضوع‌های مورد بررسی در ^۱LA-ICP-MS و ^۲LA-ICP-OES می‌باشند.

امروزه چگونگی شکل‌گیری و انتقال ذرات داخل توده بخار در اکثر روش‌های آنالیز عنصری یک عامل تاثیر گذار به حساب می‌آید [۱۰۷، ۱۸]. مطالعات اخیر نشان می‌دهند که، ساختار گاز پخش شده مانند چگونگی توزیع اندازه ذرات در جداسازی عناصر تاثیر بسیار عمده‌ای دارد [۱۰۷-۱۰۳، ۱۸]. گاز پخش شده بر اثر برهم‌کنش لیزر با ماده، از نظر اندازه ذرات داخل آن را می‌توان به سه دسته اصلی تقسیم کرد: (۱) ذرات بزرگ که برای انتقال بسیار سنگین هستند، (۲) ذراتی با اندازه متوسط که می‌توان آنها را به داخل ICP انتقال داد ولی به طور کامل تبخیر نشده‌اند، (۳) بخار و ذرات ریزی که به طور کامل به داخل ICP انتقال می‌یابند و تبخیر می‌شوند. درجه جداسازی عناصر به نرخ این سه دسته بستگی دارد. اگر اکثر ذرات به اندازه کافی کوچک باشند جداسازی عنصری قابل توجه نخواهد بود. ولی اگر کسر ذرات با اندازه

^۱ Laser Ablation Inductively Coupled Plasma mass spectrometry

^۲ Laser Ablation Inductively Coupled Plasma Optical Emission Spectrometry

بزرگتر افزایش یابد، تعداد زیادی از ذرات انتقال نمی‌یابند و به طور کامل تبخیر نمی‌شوند. پس جداسازی عنصری آنها به طور قابل توجهی اهمیت می‌یابد. بنابراین کنترل توزیع اندازه ذرات در این گونه از روش-های آنالیز عنصری بیشترین اهمیت را داراست [۹۸، ۱۰۵].

با وجود مدل‌های متفاوتی که برای بررسی فرآیند کندگی لیزری مطرح شده‌است، تنها تعداد کمی از آنها به بحث شکل‌گیری ذرات پرداخته‌اند. با این وجود بحث شکل‌گیری ذرات نه تنها در روش ICP بلکه در بسیاری از کاربردهای دیگر کندگی لیزری بسیار حائز اهمیت می‌باشد. یکی از تاثیرات مهم ذرات موجود در توده بخار، پراکندگی نور لیزر و ایجاد یک سپر در مقابل سطح هدف می‌باشد که در بعضی از مدل‌ها این مسئله مورد بررسی قرار گرفته است [۱۰۸، ۷۵]. بعلاوه وجود نانوذرات، در کاهش کیفیت ساختمان میکروسکپی توده بخار ایجاد شده، تاثیر گذار است [۷۵]. به هر حال سنتز نانوذرات یکی از کاربردهای امیدوار کننده فرآیند کندگی لیزری می‌باشد [۱۱۳-۱۰۹، ۷۶].

بعضی از تحقیقات صورت گرفته ثابت کرده است که وجود گاز محیط نقش بسیار عمده‌ای در فرآیند شکل‌گیری ذرات ایفا می‌کند [۷۲]. گروهی دیگر با در نظر گرفتن نرخ برخوردی میان خوشه‌ها، اتم‌های بخار و گاز زمینه نتایج مشابهی را بدست آورده‌اند [۹۰]. برخی از محققان نشان داده‌اند که فشار بالای گاز زمینه و تعداد برخوردهای بالا میان گونه‌های مختلف موجود در توده بخار، در بازدهی مناسب شکل‌گیری ذرات تاثیر گذار می‌باشند [۱۱۴].

محدوده اندازه متوسط ذرات که در مدل‌های بالا بررسی شده‌اند تقریباً در بازه ۱ نانومتر [۷۹] تا ۱۰ نانومتر [۳۶، ۷۵] و در پاره‌ای از مواقع کمتر از چند صد نانومتر [۷۲، ۷۶، ۳۶] قرار دارد. ذرات بزرگ موجود در توده بخار به احتمال زیاد مستقیماً از سطح ماده کنده شده‌اند [۱۱۵، ۱۱۴]. وابسته به جنس ماده هدف و شدت پالس لیزری چگونگی کنده شدن خوشه‌ها از سطح ماده هدف متفاوت می‌باشد. در شدت‌های لیزری بالاتر از $2 \times 10^{10} \text{ W/cm}^2$ ، برای هدف‌هایی از جنس سیلیکون [۱۱۸-۱۱۶] و یا شدت‌هایی بالاتر از $5 \times 10^{10} \text{ W/cm}^2$ ، برای هدف‌هایی از جنس آلومینیوم [۱۱۹]، یا برای پالس‌های کوتاه [۱۱۳، ۵۳]، چگونگی