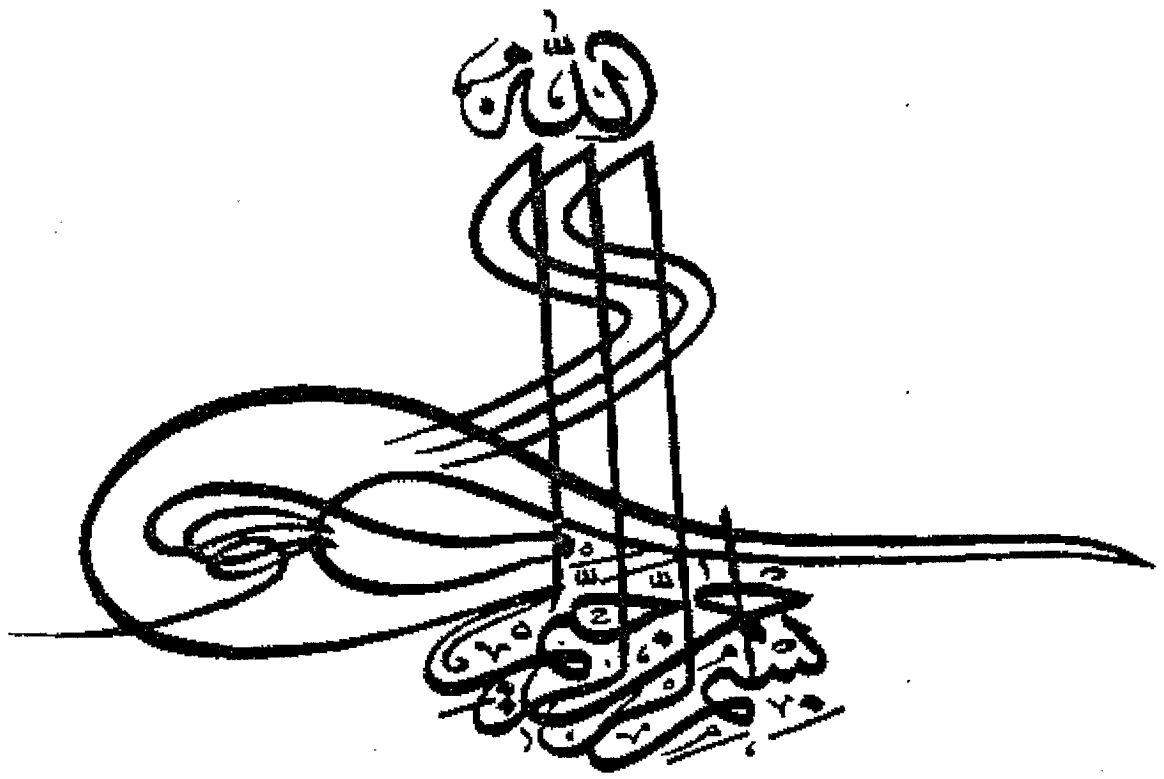


١٢٩٤٢٨

دانشگاه شهید بهشتی

پژوهشکدهٔ لیزر و پلاسما

پایان نامه

جهت اخذ درجهٔ کارشناسی ارشد فوتونیک

عنوان:

شبیه سازی دینامیک مولکولی پدیده های گرمایی و ترمومکانیکی در اندرکنش لیزر پیکو ثانیه ای با ماده

دانشجو:

شیوا داوری دولت ابادی

استاد راهنما:

دکتر بابک شکری

استاد مشاور:

دکتر کراسوس غفوری تبریزی

۱۳۸۸/۱۰/۲۷

تاریخ دفاع

۱۳۸۸/۷/۱۵

۱۲۹۴۲۸

دانشگاه شهید بهشتی

تاریخ .....
شماره .....
پیوست.....

تهران ۱۹۸۳۹۶۳۱۱۳ اوین
تلفن: ۲۹۹۰۱

بسمه تعالی

«صورتجلسه دفاع از پایان نامه دانشجویان دوره کارشناسی ارشد»

بازگشت به مجوز دفاع شماره ۹۵۲۲/د/۲۰۰ مورخ ۸۸/۶/۱۸ جلسه هیأت داوران ارزیابی پایان نامه خانم **شیوا داوری دولت آبادی** به شماره شناسنامه ۴۰۱۰ صادره از **اصفهان** متولد ۱۳۶۰ دانشجوی دوره کارشناسی ارشد ناپیوسته رشته **فوتونیک** با عنوان:

"شبیه سازی دینامیک مولکولی پدیده های گرمایی و ترمومکانیکی در اندرکنش لیزر پیکوثانیه ای با ماده"

به راهنمایی: دکتر بابک شکری

طبق دعوت قبلی در تاریخ ۸۸/۶/۲۵ تشکیل گردید و براساس رأی هیأت داوری و با عنایت به ماده ۲۰ آئین نامه کارشناسی ارشد مورخ ۷۵/۱۰/۲۵ پایان نامه مزبور با **نمره** ..... و **درجه** عالی مورد تصویب قرار گرفت.

۱- استاد راهنما: دکتر شکری

۲- استاد مشاور: کراسوس غفوری تبریزی

۱۳۸۸/۱۰/۲۷

۳- استاد داور داخل و نماینده تحصیلات تکمیلی: دکتر قناعت شعار

۴- استاد داور: دکتر فولادوند

به

شهین و حسین

چکیده

هدف کلی در اینجا مطالعه پدیده های گرمایی و ترمومکانیکی در اندر کنش لیـزر-مـاده بـا پهنـای لیزری از مرتبه پیکو ثانیه است.

میدان دمایی و موج ترموالاستیکی ایجاد شده توسط گرمایش لیـزر پالـسی فـوق کوتـاه در ارگـون جامد بررسی شده است. بدلیل پالس لیزری فوق کوتاه، اثرغیر فوریه ای و اثر جفت شـدگی بـرای توصیف دقیق تر پدیده های گرمایی و ترموالاستیکی در نظر گرفته شده اند.

در گرمایش لیزر پالسی فوق کوتاه، جذب حجمی انرژی پرتو لیزر در ماده ، در محاسـبات در نظـر گرفته شده است.

همچنین، اثر جفت شدگی میان دمای شبکه و نرخ کرنش در محاسبات بکار برده شـده اسـت کـه تغییر دمای شبکه در نقاط مختلف و تضعیف موج ترموالاستیکی را پیش بینی می کند.

هدف نهایی این کار، مطالعه پدیده های گرمایی و ترمومکانیکی در ماده تحت گرمایش لیزر پالسی فوق کوتاه با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی(MD) است. با شـبیه سـازی مـستقیم رفتـار دینامیکی اتمها یا مولکولها، این رهیافت جزئیات پدیـده هـای گرمـایی و ترمومکـانیکی اتمهـا یـا مولکول های تحت گرمایش لیزر پالسی فوق کوتاه را بدست می دهد.

فهرست مطالب

فصل اول : مقدمه

۱,۱) پدیده های گرمایی در اندرکنش لیزر-ماده ۲

۱,۱,۱) پدیده های گرمایی ایجاد شده توسط لیزر با پالس نانوثانیه ای یا بلندتر ۲

۲,۱,۱) پدیده های گرمایی دراندرکنش لیزر-ماده با گرمایش لیزری پالسی فوق کوتاه ۳

۱,۲,۱,۱) پدیده گرمایی با اثر غیر فوریه ای ٤

۲,۲,۱,۱) پدیده های گرمایی با مدل انتقال گرمای دو مرحله ای ٥

۲,۱) پدیده های ترمومکانیکی دراندرکنش لیزر-ماده ٦

۱,۲,۱) پدیده های ترمومکانیکی در اندرکنش لیزر-ماده با زمان گرمایش لیزری نانو ثانیه یا طولانی تر ۷

۲,۲,۱) پدیده های ترمومکانیکی در گرمایش لیزر پالسی فوق کوتاه ۷

فصل دوم : پدیده های گرمایی و ترموالاستیکی در گرمایش لیزری پالسی فوق کوتاه با اثر غیر فوریه ای

۱,۲) جواب امواج دمایی و ترموالاستیکی بدون در نظر گرفتن اثر جفت شدگی میان دما و نرخ کُرنش ۱۲

۲,۲) جواب موج دمایی و ترموالاستیکی با در نظر گرفتن اثر جفت شدگی میان دما و نرخ کُرنش ۱۷

فصل سوم : شبیه سازی دینامیک مولکولی

۱,۳) معادله های دیفرانسیلی حرکت ۲۲

۲,۳) شرایط مرزی دوره ای ۲۳

۳,۳) محاسبه نیروهای کوتاه برد ۲۷

۱,۳,۳) تقریب قطع مکعبی ۲۷

۲,۳,۳)تقریب قطع کروی ۲۸

۳,۳,۳) تقریب کنش با نزدیکترین همسایه یا تقریب برهم کنشهای تصویری کمینه ۲۸

٤,۳) جدول جستجوی پتانسیل ۲۹

٥,۳) سازماندهی شبیه سازی ۳۱

۱,٥,۳) ایجاد شرایط اولیه ۳۱

۲,٥,۳) ایجاد تعادل در شبیه سازی MD ۳۳

۳,٥,۳) انجام شبیه سازی و تولید نتایج ۳٤

٦,۳) کمیت های مهم در شبیه سازی ۳٤

۱,٦,۳) انرژی ۳٤

۲,٦,۳)دما ۳٤

۳,٦,۳)فشار ۳٥

٤,٦,۳)تنش ۳۷

۷,۳)شیوه اندازه گیری کمیت ها در MD ۳۹

۸,۳)دستگاه واحدهای کاهیده در MD ٤۰

۹,۳) ایجاد هنگردها در دینامیک مولکولی ٤۱

۱,۹,۳) تثبیت تعداد ذرات ٤۱

۲,۹,۳) تثبیت حجم دستگاه ٤۱

۳,۹,۳) تثبیت دما ٤۲

٤,۹,۳)تثبیت فشار ٤٦

۱۰,۳) محدوده کاربرد روشهای کلاسیک در دینامیک مولکولی ٤۷

۱۱,۳) پتانسیل لنارد – جونز (L-J) ٤۷

۱۱,۳) روشهای عددی حل معادلات دیفرانسیل ٥۰

۱,۱۱,۳) مقدمه ٥۰

۲,۱۱,۳)الگوریتم های رایج در حل عددی معادلات دیفرانسیل ٥۱

فصل چهارم : شبیه سازی دینامیک مولکولی پدیده های گرمایی و ترمومکانیکی در اندرکنش لیزر–ماده

۱,٤)مقدمه	۵۸
۲,٤) تئوری شبیه سازی MD	۵۸
۱,۲,٤)محاسبه تعادل گرمایی	٦٤
۲,۲,٤)محاسبه گرمایش ناشی از لیزر در سیستم	٦۹
۳,٤)نتایج	۷۲
۱,۳,٤) مقایسه میان نتایج شبیه سازی MD و حل تحلیلی در شار لیزری $۰,۱۲\ J/m^2$	۷۳
۲,۳,٤)نتایج شبیه سازی MD در شار لیزری $۰,۷\ J/m^2$	۷۹
مراجع	۹۹

فصل اول

مقدمه

پدیده های گرمایی و ترمومکانیکی در اندرکنش فوق سریع لیزر با ماده از اهمیت زیادی برای پردازش لیزری فوق سریع ماده و آشکارسازی غیر مخرب برخوردارند. در سالهای اخیر کارهای زیادی در این زمینه انجام گرفته است. بدلیل مدت زمان بسیار کوتاه گرمایش لیزری و در نتیجه آن گرمایش سریع و انتشار سریع تنش ،از لحاظ عملی برآورد و بررسی امواج ترمومکانیکی در داخل ماده مشکلات زیادی به همراه دارد.

در بررسیهای تحلیلی ، رهیافت پیوسته برای حل مسائل انتقال گرما و جفت شدگی گرمایی – مکانیکی در این شرایط خاص(یعنی مدت زمان بسیار کوتاه گرمایش لیزری)، میتواند غلط وغیر دقیق باشد.

شبیه سازی دینامیک مولکولی که حرکت اتمها یا مولکولها را بطور مستقیم بررسی می کند، توانایی توصیف سازوکار پدیده های گرمایی و ترمومکانیکی در اندرکنش لیزر فوق کوتاه با ماده را داراست. درگذشته چندین شبیه سازی MD،برای برهمکنش لیزر و ماده گزارش شده است. نتایج کمی مانند تغییر ساختار ماده هدف بدلیل گرمایش لیزری بدست آمده اند.

برای مثال هکینن ولندمن [۱] دینامیک تغییر فاز در مس که تحت گرمایش لیزری سطحی قرار گرفته است را بررسی کرده اند. کار انها بررسی دینامیک و ساختار فرایندهای فوق گرمایش سطحی و ذوب است. نمونه های دیگر کارهایی است که توسط کلوج و ری[۲] ،شوکاپا[۳] ، شیباهارا و کوتیک[٤,٥] ، پارینلو و سیلوسترلی [٦]و جشکه [۷]انجام گرفته است و در آنها تغییر ساختار سیستم های کوچک تحت گرمایش لیزر فوق سریع ، بررسی شده است.

جذب انرژی لیزر بصورت برانگیختگی انرژی پتانسیل اتمها[۸,۹] و یا با افزودن انرژی اضافی به انرژی جنبشی اتمها[۱۰,۱۱] و یا با برانگیختگی ارتعاش مولکولها[۱٤-۱۲] شبیه سازی شده است.

لیزر امواج ترمومکانیکی را القا می کند که در فلزات[۱٥] بوسیله تابع پتانسیل مورس[۱٦] ، در جامدات زنده توسط مدل کره تنفس کننده[۱۷] و در آرگون جامد بوسیله تابع پتانسیل لنارد–جونز [۱۱]بررسی می شود. در این کار شبیه سازی MD به بررسی پدیده هایی گرمایی و ترمومکانیکی در اندرکنش لیزر با آرگون جامد با استفاده از مدل جذب لیزر که در آن انرژی لیزر به انرژی جنبشی اتمها ، اضافه می شود، می پردازد.

در این تحقیق تحول و انتشار امواج دمایی و ترمومکانیکی در زمان گرمایش لیزری و پس از ان، بررسی شده است.

جفت شدگی گرمایی-مکانیکی منجر به تولید یک موج دمایی می شود، که از آنچه که بوسیله اثر غیرفوریه ای ایجاد می شود متمایز است.

۱,۱) پدیده های گرمایی در اندرکنش لیزر-ماده

وقتی سطح جامد تحت تابش یک پرتو لیزر قرار می گیرد، بخشی از پرتو لیزر فرودی جذب می شود و بخش باقی مانده پرتو لیزر بازتابیده می شود. اولین نتیجه اندرکنش لیزر-ماده، جذب فوتونها بوسیله فونون ها در مواد دی الکتریک یا بوسیله الکترونها در فلزات است. جذب فوتون ها منجر به افزایش دما بطور غیر یکنواخت نسبت به مکان می شود که ناشی از جذب غیر یکنواخت پرتو لیزر در جامد و ایجاد یک گرادیان دمایی در جامد است. در نتیجه انتقال انرژی از یک ناحیه با دمای بالاتر به ناحیه ای با دمای پائین تر رخ می دهد. این نوع از انتقال گرما در جامد، رسانش نامیده می شود و از برخورد فونون ها(که ارتعاشات اتمها یا مولکولها را نشان می دهند)در مواد دی الکتریک ویا از برخورد الکترون های آزاد در فلزات نشات می گیرد.

۱,۱,۱) پدیده های گرمایی ایجاد شده توسط لیزر با پالس نانوثانیه ای یا بلندتر

در گرمایش بوسیله لیزر با پالس های نانو ثانیه ای یا بلند تر، قانون فوریه بطور گسترده برای توصیف رسانش گرمایی مورد استفاده قرار می گیرد. در قانون فوریه، شار گرمایی دریک محل برابر است با حاصلضرب رسانش گرمایی ماده در گرادیان دما در ان محل.

این قانون سرعت انتشار گرما را نامتناهی پیش بینی می کند زیرا در ان، زمان واهلش گرمایی متناهی حامل های میکروسکوپی انرژی نادیده گرفته شده است. برای گرمایش لیزرهای پالسی نانو ثانیه ای یا بلند تر ، توزیع دما و رسانش گرما می تواند بطور دقیقی بر پایه قانون فوریه پیش بینی شود زیرا زمان واهلش.گرمایی حامل های انرژی که از مرتبه پیکو ثانیه است در مقایسه با زمان گرمایش لیزری (که از مرتبه نانو ثانیه یا طولانی تر است) قابل صرف نظر کردن است.

روش های اندازه گیری بسیاری بر پایه پدیده ای گرمایی ناشی از اندرکنش لیزر با ماده که قانون فوریه برای پیش بینی دما مناسب آن است، بنانهاده شده است. نمونه ای از آن روش فلاش لیزری [۱۸,۱۹]است که در آن سطح جلویی یک نمونه کوچک تحت گرمایش لیزر پالسی با زمان نوردهی از مرتبه میکروثانیه، قرار می گیرد.منحنی منتجه افزایشی دمای سطح پشتی به ضخامت و پخش

گرمایی نمونه بستگی دارد و برای اندازه گیری پخش گرمایی نمونه با دانستن ضخامت ماده مورد استفاده قرار می گیرد.

وقتی سطح جامد تحت تابش پرتو لیزر قرار می گیرد، گاز نزدیک سطح از طریق رسانش گرما از جامد گرم می شود و یک گرادیان ضریب شکست در گاز نزدیک سطح جامد تشکیل می شود. با اندازه گیری میزان انحراف پرتو نمونه، رسانش گرمایی جامد را می توان بدست آورد[۲۰].

در پردازش ماده به کمک لیزر با پالس های نانو ثانیه ای یا بلندتر، قانون فوریه برای مطالعه پدیده های گرمایی در اندرکنش لیزر–ماده بکار می رود. برای نمونه، در خمش لیزری ،یک موج پیوسته یا یک پرتو لیزر پالسی بر سطح هدف کانونی می شود و در امتداد یک خط مستقیم حرکت می کند. بدلیل گرادیان دمایی ایجاد شده در جهت ضخامت ماده هدف انبساط گرمایی نا متقارن رخ می دهد و تغیر شکل نرم در ماده ایجاد می شود به گونه ای که ماده در جهت دلخواه خم می شود[۲۱].

درMicroMachining لیزری ، یک پرتو لیزری بشدت کانونی شده سطح هدف را ذوب می کند و یک شار سطحی ایجاد می شود بگونه ای که تغیر شکل سطحی نهایی را ایجاد می کند[۲۲].

۲,۱,۱) پدیده های گرمایی دراندرکنش لیزر–ماده با گرمایش لیزری پالسی فوق کوتاه

با وجود آنکه لیزر ها در اواسط ۱۹۰۰ بوجود آمدند، تکنولوژی لیزری هنوز بسرعت در حال تغییر است. بیشتر کارها به گسترش و توسعه لیزرهایی با پهنای پالس فوق کوتاه تا مرتبه فمتوثانیه اختصاص داده شده است. لیزرهای پالسی فوق کوتاه بطور گسترده در مطالعات بنیادی انتقال گرما [۲۳]و MicroMachining بوسیله لیزر[۲٤] بکار می روند. وقتی پالس لیزری از مرتبه پیکو یا فمتوثانیه باشد،زمان واهلش گرمایی فونون ها در مواد دی الکتریک یا زمان واهلش گرمایی میان الکترونها و ذرات شبکه در فلزات قابل مقایسه با زمان گرمایش لیزری است، بگونه ای که نظریه رسانش گرمایی فوریه دیگر بکار نمی آید.

تعمیم بر نظریه رسانش گرمایی فوریه،یعنی اثر غیر فوریه ای به طور خاص، بایستی میدان دمایی در مواد دی الکتریک تحت تابش لیزر پالسی فوق کوتاه را پیش بینی کند.

برای فلزات تحت تابش لیزر پالسی فوق کوتاه ، مدل انتقال گرمای دو مرحله ای یا دوگامی برای پیش بینی میدان دمایی مورد استفاده قرار می گیرد.

اثر غیر فوریه ای یا مدل انتقال گرمای دو مرحله ای برای به حساب آوردن تاثیر زمان آزاد میانگین (یا زمان واهلش گرمایی) در فرایند برخورد حامل های انرژی ،مورد استفاده قرار گرفته است به گونه ای که همچنین پارادوکس سرعت نامتناهی انتشار گرما را برطرف می کند[۲۵,۲۶].
تحول این دو مدل در زیر آمده است.

۱,۲,۱,۱) پدیده گرمایی با اثر غیر فوریه ای

همانطور که در بالا بحث شد، در اندرکنش لیزر پالسی فوق کوتاه با ماده، اثر غیر فوریه ای برای پیش بینی میدان دمایی درنظر گرفته می شود. اثر غیر فوریه ای پارادوکس سرعت نامتناهی انتشار گرما را برطرف می سازد.
وقتی زمان گرمایش قابل مقایسه با زمان واهلش گرمایی (که زمان آزاد میانگین حامل های انرژی است و با تقسیم مسیر آزاد میانگین بر سرعت حامل های انرژی بدست می آید) باشد، یک موج دمایی (موج صوتی دوم) تشکیل می شود.
مطالعات نظری و تجربی بر اثر غیر فوریه ای بطور خلاصه در ذیل آمده است.
برای مطالعه نظری مربوط به پیش بینی میدان دمایی در گرمایش لیزر پالسی فوق کوتاه، اثر غیر فوریه ای را در نظر می گیریم. کاتانیو،[۲۷]نظریه ریاضی مشخصی در این زمینه ارائه داد و معادلاتش بطور گسترده برای پیش بینی افزایش دما در گرمایش لیزر پالسی فوق کوتاه مورد استفاده قرار گرفته است.
کلمن[۲۸,۲۹] نشان داد که معادلات کاتانیو با قانون دوم ترمودینامیک مغایرت دارد و یک مجموعه معادلات تعمیم یافته برای توصیف رسانش تحت گرمایش با زمان فوق کوتاه ارائه داد. با استفاده از تعمیم کلمن بر اثر غیر فوریه ای، بای و لاوین،[۳۰]میدان دمایی در یک جامد که دو طرفش تحت تغییر دما قرار گرفته است را بدست آوردند. آنها نشان دادند که نظریه غیر فوریه ای قرار دادی تحت شرایط(Extreme) جواب غلط می دهد. خوشبختانه برای بیشتر مسائل اندرکنش لیزر پالسی فوق کوتاه با ماده، اثر غیر فوریه ای به اندازه کافی دقیق است و جواب های فیزیکی قابل قبول ارائه می دهد.
میدان دمایی ایجاد شده توسط گرمایش لیزر های مختلف با در نظرگرفتن اثر غیر فوریه ای بطور کامل بررسی شده است.
کر،[۳۱]میدان دمایی ایجاد شده بوسیله لیزر پالسی خیلی کوتاه را بدست آورد.
اثر غیر فوریه ای تغییر تدریجی ناپیوسته میدان دمایی را که در آن موج گرمایی به پشت و جلو با یک سرعت انتشار متناهی حرکت میکند، پیش بینی می کند.

تیزو،[۳۲,۳۳]رابطه ای میان بردار شار گرما و گرادیان دما پیشنهاد کرد تا رفتار موجی، پخشی و اندرکنش الکترون- فونون را پوشش دهد.

تنگ و اراکی،[۳٤,۳۵]برای یک محیط متناهی تحت اختلال گرمایی سطحی دوره ای،پاسخ دمایی در محیط را بدست آوردند

مشخص ترین جنبه میدانهای دمایی که در آن کار معین شد، رفتار موجی رسانش گرمایی و افزایش دمای بالاتر در سطح بود.

بموازات کارهای نظری در زمینه اثر غیر فوریه ای، مطالعات تجربی نیز در این زمینه انجام شده است. با وجود آنکه مدل ریاضی اثر غیر فوریه ای بوسیله کاتانیو در ۱۹٤۸ ارائه شد، اولین بار در ۱۹٦٦ امواج گرمایی بوسیله اکرمن،[۳٦] مشاهده شدند که این خود ارزش نظریه اثر غیر فوریه ای را بیان می کند. او در نزدیک دمای صفر مطلق، در پشت سطح بلورHe که سطح جلویی اش تحت گرمایش پالسی الکتریکی بود، پاسخ دمایی را اندازه گیری گرد.یک جبهه موج گرمایی واضح در آزمایش مشاهده شد که ناشی از اثر غیر فوریه ای در رسانش گرمایی است. بعدا" ، اکرمن و گویر در ۱۹٦۸ ،[۳۷] برای امواج گرمایی در بلور هلیوم داده های تجربی گزارش کردند که حاوی مقادیری از رسانش گرمایی بود که با اندازه گیری های حالت پایا و سرعت انتشار موج در توافق بود. اکرمن و اورتون در ۱۹٦۹،[۳۸] سرعت امواج گرمایی درHe جامد را اندازه گیری کردند.

مک ملی،[۳۹]داده هایی برای بلورهای NaF ، NaI و LiF با بیشترین درجه خلوص شیمیایی گزارش کرد که رفتار امواج گرمایی را نشان می دهد. داینس،[٤۰] در ۱۹۷۲ سرعت امواج دمایی را در دماهای پائین را اندازه گیری کرد.

۲,۲,۱,۱) پدیده های گرمایی با مدل انتقال گرمای دو مرحله ای

برای فلزاتی که تحت تابش لیزر پالسی فوق کوتاه قرار می گیرند و زمان گرمایش قابل مقایسه با زمان تعادل گرمایی میان الکترون های ازاد و شبکه است، مدل انتقال گرمایی دو مرحله ای برای پیش بینی افزایش دما بکار می رود.

مدل انتقال گرمای دو مرحله ای، گرمایش فلزات را در دو مرحله توصیف می کند. ابتدا الکترونها بوسیله جذب حجمی انرژی پرتو لیزر گرم می شوند وسپس انرژی از الکترونها به ذرات شبکه منتقل می شود.

نسخه نخست مدل دو مرحله ای (مدل اندرکنش فونون- الکترون) توسط کاگانف در ۱۹۵۷،[٤۱] ارائه شد. حدود چهار دهه بعد توسط کیو وتین در ۱۹٦۳،[٤۲] مدل دو مرحله ای بر پایه مکانیک کوانتومی و مکانیک آماری بیان شد.

پس از تبیین مدل دو مرحله ای، بررسی های زیادیٔ در زمینه بدست آوردن و آزمودن دمای الکترونها و شبکه در یک فلز تحت گرمایش های سطحی مختلف انجام گرفت. تیزو در ۱۹۹٤ ، [٤٣]دمای غیر تعادلی شبکه فلزی را تحت تغیرات زمانی دمای سطحی، بررسی کرد. او دریافت که جبهه موج تیز دمای شبکه بوسیله پراکندگی قوی ناشی از اندرکنش الکترون- فونون از بین می رود. با استفاده از مدل دو مرحله ای، مارسیک در ۱۹٦٥ ،[٤٤] دمای الکترون و شبکه را در یک فلز که تحت تابش پالس لیزری است بدست آورد و رفتار موجی دمای الکترون و شبکه مشاهده شد و مشخص شد که مدل انتقال گرمای دو مرحله ای با مطالعات تجربی افزایش دمای یک فلز که تحت تابش یک لیزر پالسی فوق کوتاه قرار گرفته است، مطابقت دارد.

۲,۱) پدیده های ترمومکانیکی دراندرکنش لیزر-ماده

همانطور که قبلا" ذکر شد همراه با پدیده های گرمایی در اندرکنش لیزر-ماده پدیده های ترمومکانیکی بطور همزمان اتفاق می افتد که مشتمل بر تولید موج اکوستیکی(صوتی) در گاز، (ناشی از افزایش فشار گاز مجاور سطح جامد است که پدیده فوتواکوستیکی(PA)نامیده می شود) و نیز تولید موج الاستیکی در جامد (که در اثر انبساط گرمایی جامد تولید می شود و موج ترمو الاستیکی نامیده می شود)است.

موج(PA) در گاز و موج ترموالاستیکی در جامد با پهنای پالس لیزر(بدلیل پدیده های گرمایی مختلف مربوط به زمان گرمایش مختلف) تغییر می کند.

وقتی پهنای پالس لیزر نسبتا" بلند است مثلا از مرتبه نانو ثانیه و یا بلندتر، نظریه رسانش گرمایی فوریه برای پیش بینی افزایش دما در جامد و گاز به اندازه کافی دقیق است.

موج ترموالاستیکی در جامد بدون کندوپاش، بدلیل تغیرات آرام و کم انبساط گرمایی در ان قابل اغماض است و موج(PA) در گاز معمولا" دامنه قابل ملاحظه ای دارد زیرا گرمایش طولانی مدت گاز بوسیله سطح جامد در زمان گرمایش لیزری انجام میشود.

در گرمایش لیزر پالسی فوق کوتاه، گرمایش بی نهایت سریع جامد سبب انبساط گرمایی می شود که بسرعت رخ می دهد و منجر به تولید یک موج ترموالاستیکی در جامد می شود که بسیار قوی تر از موج(PA) در گاز است. همچنین موج ترموالاستیکی در جامد نرخ کرنش بی نهایت بالایی دارد که ایجاد جفت شدگی قوی میان دما و نرخ کرنش می کند.این اثر جفت شدگی قوی موج ترموالاستیکی را در زمان انتشارش تضعیف می کند.

در ۲۰ سال گذشته امواج ترموالاستیکی با استفاده از مدلهای فیزیکی مختلف و شرایط مرزی متفاوت مورد مطالعه قرار گرفته اند که بطور خلاصه در ذیل امده است.

۱,۲,۱) پدیده های ترمومکانیکی در اندرکنش لیزر-ماده با زمان گرمایش لیزری نانو ثانیه یا طولانی تر

همانطور که در بالا بحث شد دراندرکش لیزر-ماده با زمان گرمایش طولانی ،موج (PA) در گاز بدلیل رسانش طولانی مدت گرما از جامد قوی است و نیز موج ترموالاستیکی در جامد بدلیل انبساط گرمایی کند و آرام، قابل چشم پوشی است. بنابراین بحث را پیرامون پدیده(PA) متمرکز می کنیم.

پدیده(PA) در بیشتر از دو دهه مورد مطالعه قرار گرفته است و در اشکار سازی غیر مخرب ماده و اندازه گیری خواص ترمو فیزیکی بکار رفته است.

مشاهدات کمی از اثر(PA) اولین بار توسط روزنویگ در ۱۹۷٦،[٤٥]ارائه شد که بعنوان مدل(RG) شناخته شد.کاربردهای زیادی از مدل(RG) اساسا" در دو جهت گسترش یافته است.

یکی بررسی بیشتر مکانیسم اصلی اثر(PA) با در نظر گرفتن ارتعاشات مکانیکی سطح هدف توسط مک دونالد در ۱۹۷۸،[٤٦] است که در آن از مدل پیستون ترکیبی استفاده کردند و علی الخصوص برای مایعات بدلیل انبساط گرمایی بالایشان بکار می رود.

تلاش دیگر تعمیم کار روزنویگ به نمونه های چند لایه ای بدلیل اهمیت این مواد بخصوص در صنعت میکروالکترونیک است. عمده این بررسی ها محدود به نمونه های دو و سه لایه ای است. راه حل برای سیستم های چند لایه ای برای مواد خیلی خاص یا با این فرض که نور فرودی بطور کامل در سطح نمونه جذب می شود به دست آمده است. در سالهای اخیر کال و مک گاهان ،[٤٧] یک راه حل کلی برای توزیع دمای سیستم چند لایه ای بدست آوردند. برای استفاده از این راه حل برای محاسبه میدان دمایی انتگرال گیری عددی لازم است.

۲,۲,۱) پدیده های ترمومکانیکی در گرمایش لیزر پالسی فوق کوتاه

همانطور که گفته شد موج ترموالاستیکی در جامد در گرمایش لیزر پالسی فوق کوتاه از آنجایی که انبساط گرمایی در جامد در بازه زمانی بی نهایت کوتاهی رخ می دهد با اهمیت تر است و موج(PA) در گاز در مقایسه با موج ترموالاستیکی در جامد قابل چشم پوشی است. بنابراین بحث را بر موج ترموالاستیکی در جامد متمرکز می کنیم.

تولید امواج ترموالاستیکی با گرمایش لیزری پالسی فوق کوتاه فرایند پیچیده ای است که مشتمل بر جذب اپتیکی ، رسانش گرمایی و اندرکنش گرمایی-مکانیکی است. در دو دهه اخیر مطالعات نظری برای شناخت امواج ترموالاستیکی با و بدون در نظر گرفتن اثر غیر فوریه ای و یا اثر جفت

شدگی میان نرخ کرنش و دما انجام شده است و مدلهای مختلفی ارائه شده است.ساده ترین رهیافت بدست اوردن امواج ترموالاستیکی بدون در نظر گرفتن اثر غیر فوریه ای و اثر جفت شدگی میان دما و نرخ کرنش است. با استفاده از این مدل وایت،[٤٨]در سال ١٩٦٣ امواج ترموالاستیکی را در یک نمونه نیمه متناهی که تحت گرمایش های سطحی مختلف قرار گرفته بود، بررسی کرد. بوشنل و مک کلوزی،[٤٩]جذب حجمی انرژی در ماده را در نظر گرفتند و موج ترموالاستیکی ایجاد شده بوسیله انرژی ورودی پالسی را بدست آوردند اما در مدل آنها از رسانش گرمایی صرف نظر شد ولش در ١٩٨٨،[٥٠]تنش گرمایی دو بعدی را در یک نیم فضا که تحت پرتو کانونی شده گاوسی در ناحیه نزدیک سطح بودز بدست اورد. انتشار امواج تنش و رسانش گرمایی در جامد در آن راه حل نادیده گرفته شد.

کارهای زیادی برای حل مسئله امواج ترموالاستیکی با در نظر گرفتن جفت شدگی میان دما و نرخ کرنش انجام شده است.بولی و تولینز در ١٩٦٢،[٥١] با استفاده از تبدیلات فوریه ای موج تنش را در یک نیم فضا تحت تغیرات زمانی کرنش و دما بررسی کردند.

بدلیل پیچیدگی تبدیلات فوریه ای وارون فقط توصیف تحلیلی موج ترموالاستیکی در شروع و خیلی پس از تغییر در سطح آزاد داده شد.

تبدیلات لاپلاس برای بدست آوردن جواب تحلیلی موج ترموالاستیکی در یک نیم فضا که تحت گرمایش مرزی قرار گرفته است، استفاده شده است. [٥٢]

تلاشهایی برای استفاده از تبدیلات لاپلاس برای حل معادلات امواج ترموالاستیکی ناشی از گرمایش حجمی انجام شده است.[٥٣] بدلیل دشواری در یافتن توابع گرین تحلیلی فقط فرم ()توابع گرین بکار برده شده است و بنابراین جواب فقط برای مکانهای خیلی دور از سطح مناسب است .

بررسی هایی نیز برای حل مسائل موج ترموالاستیکی با در نظر گرفتن اثر غیر فوریه ای در انتقال گرما بجای اثر جفت شدگی انجام شده است [٥٤].

با استفاده از تبدیلات لاپلاس و هنکل موج ترموالاستیکی در فلزات که تحت گرمایش سطحی پرتو لیزری گاوسی قرار گرفته است، بررسی شده است. نتایج ،اهمیت پخش گرمایی بر تولید امواج ترموالاستیکی را نشان می دهد [٥٥].

با استفاده از تبدیلات لاپلاس برای حل موج ترموالاستیکی ایجاد شده بوسیله جذب حجمی پرتو لیزر، آثار عمق نفوذ اپتیکی و دوره زمانی پالس لیزری بر امواج طولی اکوستیکی تولید شده، مشاهده شدند.[٥٦]

با استفاده از تبدیل زمانی لاپلاس برای زمان و تبدیلات دو بعدی فضایی فوریه ای برای مختصات x1 و x2 و حل معادلات به ازای x3 ، امواج ترموالاستیکی سه بعدی در یک محیط که تحت جذب حجمی پرتو لیزر است ، بدست آمده است[۵۷].

برای حل امواج ترموالاستیکی ایجاد شده بوسیله گرمایش لیزری پالسی کاملترین رهیافت آن است که هم اثر غیر فوریه ای و هم تمام آثار جفت شدگی در نظر گرفته شود.

لرد و شولمن در ۱۹۶۷[۵۸] هر دو اثر را برای حل امواج تنش در یک نیم فضا با شرایط مرزی در نظر گرفتند.

فصل دوم

پدیده های گرمایی و ترموالاستیکی در گرمایش لیزری پالسی فوق کوتاه با اثر غیر فوریه ای

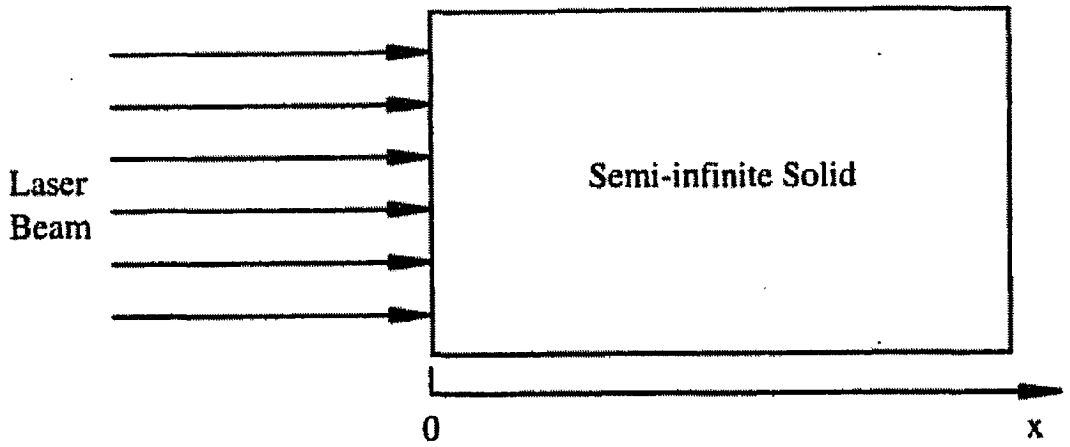
در این فصل، پدیده های گرمایی و ترموالاستیکی در برهم کنش لیزر پالسی فوق کوتاه با ماده با در نظر گرفتن اثر غیرفوریه ای مورد بررسی قرار می گیرد.

موج PA در گاز قابل صرف نظر کردن است ،زیرا گرمای منتقل شده به گاز از جامد در زمان گرمایش فوق العاده کوتاه ناچیز است. یک جواب کلی برای موج دمایی و موج ترموالاستیکی که در یک جامد نیمه متناهی به وسیله گرمایش لیزری پالسی ایجاد شده است به شکل سریهای فوریه فرمول بندی می شود،در این جواب اثر غیر فوریه ای در رسانش گرمایی، اثر جفت شدگی میان دما و نرخ کُرنش و جذب حجمی انرژی پرتو لیزر در نظر گرفته شده است و این امکان فراهم می شود که تصویر واقعی تر و با جزئیات بیشتر از امواج ترموالاستیکی ایجاد شده به وسیله گرمایش لیزری پالسی داشته باشیم.

در قسمت اول، جواب کلی برای امواج دمایی و ترموالاستیکی ایجاد شده در اثر گرمایش لیزری پالسی بدون در نظر گرفتن اثر جفت شدگی اورده شده است. جواب برای امواج دمایی و ترموالاستیکی با در نظر گرفتن اثر جفت شدگی در قسمت دوم ارائه شده است. بر پایه این جواب ها، محاسبات با و بدون در نظر گرفتن اثر جفت شدگی ارائه شده اند.

۱,۲) جواب امواج دمایی و ترموالاستیکی بدون در نظر گرفتن اثر جفت شدگی میان دما و نرخ کُرنش

در این بخش جواب موج ترموالاستیکی ایجاد شده به وسیله گرمایش لیزری پالسی بدون در نظر گرفتن اثر جفت شدگی بیان خواهد شد. در فرآیند حل مسئله، ابتدا انرژی لیزر پالسی به وسیله سریهای فوریه ارائه شده و موج ترموالاستیکی ایجاد شده توسط هر جمله در سری فوریه معلوم می شود. جمع مؤلفه های فوریه موج ترموالاستیکی ایجاد شده به وسیله گرمایش لیزری پالسی را نشان می دهد.



شکل (۱,۲)

شکل (۱,۲) نمودار شماتیکی برای یک جامد همگن همسانگرد با سطحی که تحت گرمایش لیزر پالسی قرار گرفته است را نشان می دهد. معادلات یک بعدی حاکم برای میدان دمایی (T) و جابجایی (U) شامل دو معادله جفت شده است.

بدون در نظر گرفتن اثر جفت شدگی میان دما و نرخ کُرنش معادلات حاکم به فرم زیرند[۵۸,۵۹]:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial q''}{\partial x} + \beta I(t) e^{-\beta X} \qquad (a.1,2)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = (B + \frac{4}{3}G)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - B\beta_T \frac{\partial T}{\partial x} \qquad (b.1,2)$$

وقتی اثر غیر فوریه ای در نظر گرفته می شود شارش گرما (q'') به شکل زیر بیان می شود[۵۸]:

$$q'' + \tau_q \frac{\partial q''}{\partial t} = -k \frac{\partial T}{\partial x} \qquad (c.1,2)$$

در روابط فوق I(t) شدت پرتو لیزر، α پخش گرمایی، k رسانش گرمایی، ρ چگالی، β ضریب جذب اپتیکی، B مدول حجمی کشسانی (که معیاری از تراکم پذیری ماده است و میزان کرنش ماده در حجم یعنی کاهش نسبی حجم ماده، نسبت به تنش عمودی وارد بر ماده را نشان می دهد)و G مدول برشی کشسانی(که میزان کرنش ماده رانسبت به تنش برشی وارد بر ماده نشان می دهد)، β_T ضریب انبساط گرمایی حجمی و T_0 دمای اولیه هدف است.

τ_q زمان واهلش گرمایی است که همان زمان آزاد میانگین در فرآیند برخورد فونونی است و از تقسیم مسیر آزاد میانگین مؤثر فونونی بر سرعت میانگین فونونی بدست می آید[۶۰].

رابطه (a.1,2) را می توان به فرم زیر نوشت:

$$\frac{\partial q''}{\partial x} = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \beta I(t) e^{-\beta x} \qquad (d.1,2)$$

مشتق رابطه (c.۱,۲) نسبت به x به صورت زیر است:

$$(1+\tau_q \frac{\partial}{\partial t})\frac{\partial q''}{\partial x} = -k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \qquad \text{(e.۱,۲)}$$

با جایگذاری معادله (d.۱,۲) در معادله (e.۱,۲) بدست می آوریم:

$$\frac{\tau_q}{\alpha}\frac{\partial^2 T}{\partial t^2}+\frac{1}{\alpha}\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\beta}{k}(I(t)+\tau_q \dot{I}(t))e^{-\beta x} \qquad \text{(f.۱,۲)}$$

در رابطه (f.۱,۲) جمله اثر غیر فوریه ای یعنی جمله اول سمت چپ همراه با اولین جمله در سمت راست، رفتار موجی دما در رسانش گرمایی را نشان می دهد.

جمله سوم در سمت راست این رابطه، یک چشمهٔ اضافی است که در نتیجه اثر غیر فوریه ای ایجاد شده است و فقط بر توزیع دمایی، بدون تغییر در انرژی کلی وارد شده به هدف، تأثیر می گذارد زیرا انتگرال آن در کل زمان گرمایش صفر است.

در شروع، فرض شده است که هدف دمای یکنواختی دارد و هیچ جابجایی و تنشی وجود ندارد. همچنین مشتق اول دما و جابجایی نسبت به زمان صفر است زیرا شار لیزر در ابتدا صفر است.

$$T=T_0 \qquad t=0,\ x\geq 0 \qquad \text{(a.۲,۲)}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}=0 \qquad t=0,\ x\geq 0 \qquad \text{(b.۲,۲)}$$

$$u=0 \qquad t=0,\ x\geq 0 \qquad \text{(c.۲,۲)}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}=0 \qquad t=0,\ x\geq 0 \qquad \text{(d.۲,۲)}$$

فرض شده است که نمونه هدف از لحاظ گرمایی ایزوله است و سطوح بدون تنش هستند که به این صورت بیان شود:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(B+\frac{4}{3}G)-B\beta_T(T-T_0)=0 \qquad x=0,t>0 \qquad \text{(e.۲,۲)}$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}=0 \qquad x=0,t>0 \qquad \text{(f.۲,۲)}$$

در $x\to\infty$ ، فرض شده است که هدف هیچ افزایش دما و تنشی ندارد. با معرفی

$$\theta = T-T_0$$
$$\gamma = \beta / k$$
$$v = -B\beta_T / (B+4/3G)$$
$$c_e = \sqrt{(B+4/3G)/\rho}$$