

MODÉLISATION DE L'INTERACTION D'UN LASER IMPULSIONNEL AVEC UNE CIBLE DE TITANE

F. HAMADI¹, E.H. AMARA¹, S. AGGOUNE¹ et D. MEZAOUI²

¹ Centre de Développement des Technologies Avancées, Division des Milieux Ionisés & Laser,

Équipe : Traitement des Matériaux par Laser, B.P. 17, Baba-Hassen, 16303 Alger

²Laboratoire Science des Matériaux, Faculté de Chimie, U.S.T.H.B.,

B.P. 32, El-Alia, Bab-Ezzouar, Alger

E-mail : fhamadi@cda.dz

RÉSUMÉ : La modélisation numérique de l'interaction d'un laser pulsé nanoseconde avec une cible de titane est décrite. On utilise pour la discrétisation des équations algébriques la méthode des volumes finis mise en œuvre par le logiciel de dynamique des fluides « Fluent ». Dans un premier temps, nous nous intéressons aux phénomènes physiques se produisant au début de l'interaction laser-matière, en utilisant des formulations enthalpiques pour le traitement du changement de phase liquide-solide, par la résolution de l'équation de la chaleur modifiée. Par la suite, nous nous intéressons à la modélisation de la dynamique du plasma ou de la vapeur métallique sous atmosphère de gaz d'Argon neutre. L'écoulement bidimensionnel, axisymétrique, et instationnaire est étudié par la résolution des équations de Navier-Stokes. La distribution des vitesses, de la température et de la densité du plasma sont calculées.

MOTS-CLÉS : plasma, modélisation, titane

1. Introduction

Le dépôt de couche mince est aujourd'hui une technologie clé pour de multiples applications industrielles, comme dans la fabrication de composés électroniques, et dans l'élaboration de cellules photovoltaïques pour améliorer leurs propriétés isolante ou conductrice. Elle est également utilisée dans la fabrication d'outils coupants en améliorant leurs propriétés mécanique et de résistance à l'usure et à la corrosion. Les propriétés optiques d'un matériau peuvent être également modifiées par dépôt de couches minces sous forme de revêtements décoratif ou anti-reflet.

Les processus physiques intervenant lors de l'ablation laser pour le dépôt de couches minces sont souvent complexes et encore mal compris. L'amélioration de nos connaissances notamment dans les domaines de l'hydrodynamique et de la cinétique des plasmas passe bien entendu par l'étude expérimentale des processus d'ablation mais aussi par le développement de modèles numériques performants. Ces modèles sont encore relativement simples, souvent unidimensionnel 1-D et basés sur les équations d'Euler qui ne permettent pas de traiter l'ensemble des phénomènes observés lors de l'ablation laser. Pour tenir compte à la fois des deux étapes successives et interdépendantes d'interaction laser matière précédemment décrites, le développement de modèles 2-D est nécessaire.

Dans le présent travail, la symétrie cylindrique que présente l'expansion du plasma permet de réduire l'étude à une approche en 2-D suivant les directions radiale et axiale (r,z) tel que montré sur la figure (1).

Le modèle développé basé sur la résolution numérique des équations de Navier-Stokes, permet l'étude d'un écoulement bidimensionnel et instationnaire.

Nous étudions d'abord l'irradiation d'une cible en titane par un faisceau laser de longueur d'onde $\lambda = 248$ nm, de durée d'impulsion $\tau = 25$ ns, et une densité d'énergie surfacique comprise

entre 4 et 16 J/cm². Puis en seconde étape, nous développons une modélisation numérique de l'expansion durant et après le pulse laser.

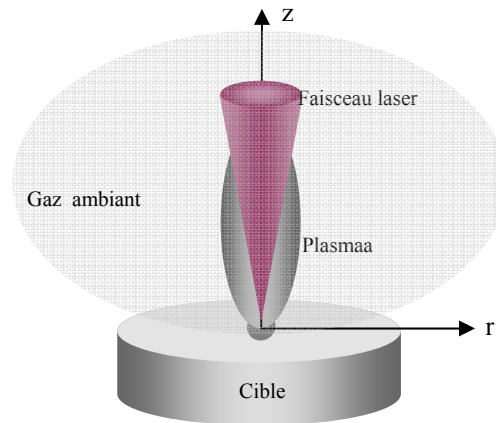


Figure 1: Représentation du problème traité

2. Modèle Mathématique

Un faisceau laser de distribution gaussienne irradie une cible métallique à l'instant $t=0$, provoquant tout d'abord l'absorption des photons et un chauffage rapide suivi d'une ablation à la surface de la cible sous forme de vapeur métallique

La propagation de la chaleur dans la cible solide est décrite par la théorie linéaire de la conduction de chaleur qui est proportionnel au gradient de la température. L'évolution spatio-temporelle de la température est obtenue par la résolution de l'équation de diffusion de la chaleur dans le solide telle que :

$$(\rho C_p)(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (K(T) \nabla T) + S(r, z, t)$$

ρ , C_p et K représentent respectivement la densité, la capacité calorifique et la conductivité thermique du matériau cible. S représente le terme source correspondant à un apport externe de chaleur, qui dans notre cas est l'énergie laser. La quantité d'énergie laser incidente déposée sur la cible est directement liée aux propriétés d'absorption et de réflexion R du rayonnement pour la longueur d'onde et le matériau considérés. L'expression de S dépend de l'intensité du rayonnement qui décroît en fonction de la profondeur z selon une loi de transport classique de Beer-Lambert :

$$dI = -\alpha(\lambda) I dz$$

La source d'énergie, par unité de volume et de temps, prend la forme suivante :

$$S(r, z, t) = (1 - R) \alpha I(r, z, t)$$

2.1. Modélisation 2-D de la distribution de température

Le modèle numérique développée permet de déterminer l'évolution dynamique du champ de température $T(r, z, t)$ ainsi que les dimensions du domaine fondu dans une cible de Titane soumise à une impulsion laser focalisée. Le domaine de calcul et son maillage sont représentés sur la figure (2) ci-dessous.

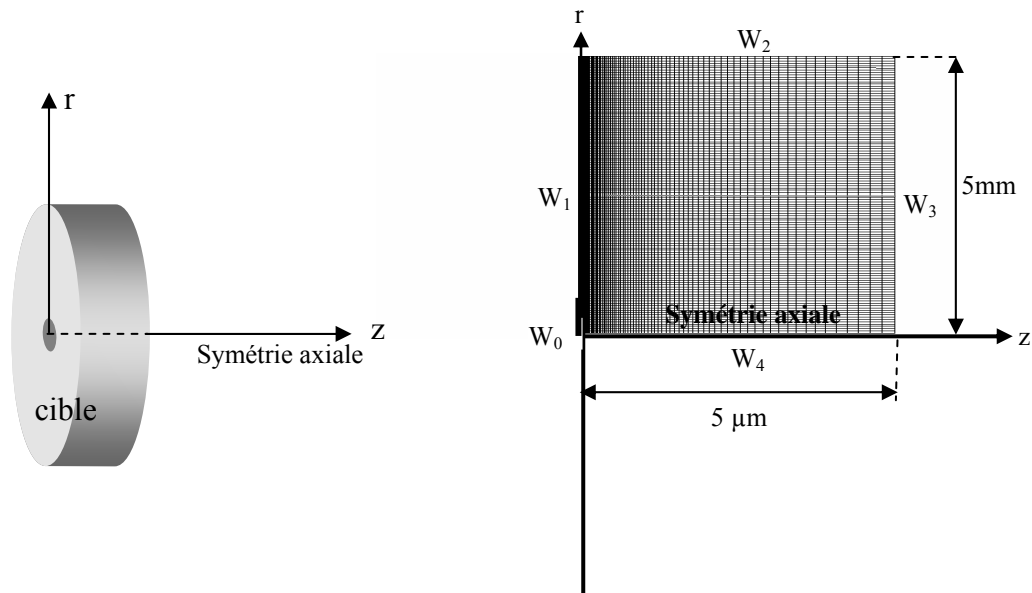


Figure 2: Schéma d'une cible cylindrique avec au centre l'impact laser.

Pour raison de symétrie, on restreint le domaine de calcul à une coupe de ce cylindre dans sa longueur, représentée par le rectangle maillé incluant les frontières du domaine W_1 , W_2 , W_3 et W_4

Les frontières du domaine W_1 , W_2 et W_3 représentent les parois du matériau cible utilisé (Titane), on impose sur tout le domaine à l'instant initial une température de 300 K. Sur l'axe z , axe de symétrie, on impose une condition donnant un flux nul.

Sur la surface notée W_0 , la valeur de l'intensité laser est appliquée. On considère une distribution gaussienne donnée par :

$$I(r) = I_0 \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right)$$

D'autre part, la distribution d'intensité est modulée dans le temps telle que :

$$\frac{dI(r, z, t)}{dt} = \alpha(\lambda) I(r, z, t)$$

On associe à l'équation de la chaleur les conditions aux limites et initiale suivantes :

$$T(t=0) = T_{\text{amb}} \quad (\text{a})$$

$$T(z \rightarrow \infty) = T_{\text{amb}} \quad (\text{b})$$

$$\left. \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0 \quad (\text{c})$$

La condition (a) signifie que la température initiale est égale à la température ambiante $T_{\text{amb}} = 300$ K sur toute la profondeur. La température de la couche la plus profonde reste constante à T_{amb} pendant toute la durée de l'interaction laser matière (b). En négligeant les pertes de chaleur par radiation et par convection, le flux de chaleur à travers la surface est nul (c). Cette dernière condition n'est satisfaite qu'en absence de vaporisation. En introduisant la chaleur latente de vaporisation comme un terme de perte de chaleur. La source de chaleur secondaire induite dans le volume du matériau est finalement donnée par l'expression:

$$S(r, z, t) = (1 - R(\lambda)) \alpha(\lambda) I(r, z, t)$$

Le changement d'état solide liquide s'accompagne d'une variation des propriétés thermique et physique du Ti. La température dépend de l'absorption du rayonnement, du transport de la chaleur dans le matériau, et de l'enthalpie de changement de phase du Ti. L'équation de la chaleur peut-être écrite dans un système de coordonnées centré sur le faisceau laser

$$\rho(T) C_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (K(T) \nabla T) + S(r, z, t) + L(T_{\text{int}})$$

2.2. Modélisation de la formation et la dynamique du plasma

Dans la seconde partie de la modélisation, nous décrivons par une approche hydrodynamique, basée sur les équations de Navier-Stokes, l'évaporation de la matière, la formation et l'expansion du plasma durant et après le pulse laser. Lorsque la température à la surface devient très élevée, l'évaporation devient significative. Au cours de l'impulsion laser, et au moment où la température de surface devient égale à la température d'ébullition, le flux des particules évaporées quittant la surface est exprimé par :

$$N_{at} = \frac{\beta p_0}{\sqrt{2\pi m_{at} RT}} e^{\left(\frac{\Delta H_{lv}(T-T_v)}{RT_s}\right)}$$

En supposant que la vapeur se comporte comme un gaz parfait, la pression de vapeur saturée en fonction de la température P_{vap} est calculé à partir de la température de surface T_s utilisant

la relation de Clausius- Clapeyron: $P_{sat}(T_s) = P_0 \exp\left(\frac{\Delta H_{lv}}{RT_s T_b}\right)$

P_0 étant la pression ambiante, T_v est la température de vaporisation à la pression ambiante, et ΔH_{lv} est l'enthalpie de vaporisation du matériau.

La forme temporelle de la température de surface durant et après l'impulsion laser de type rectangulaire est donnée par les expressions suivantes :

$$\begin{cases} T_s = \frac{A}{\rho C_p \sqrt{\kappa\pi}} 2 I_0 \sqrt{t} & t \leq \tau_l \\ T_s = \frac{A}{\rho C_p \sqrt{\kappa\pi}} 2 I_0 (\sqrt{t} - \sqrt{t - \tau_l}) & t \geq \tau_l \end{cases}$$

A: absorptivité

ρ : densité (Kg/m^3)

C_p : capacité calorifique ($J/Kg.K$)

κ : diffusivité thermique (m^2/s)

I_0 : intensité maximale de l'impulsion laser (W/m^2)

τ_l : durée d'impulsion (s)

La densité de vapeur à la surface $\rho_{sat}(T_s)$ est calculée à partir de la loi des gaz parfait:

$$\rho_{sat}(T_s) = \frac{p_{sat}(T_s)}{k T_s}$$

La vitesse des atomes de vapeur quittant la surface $v_{vap,s}$ est exprimée par:

$$v_{sat}(T_s) = \sqrt{\frac{2kT_s}{\pi m}}$$

La densité $\rho_{sat}(T_s)$, la vitesse $v_{sat}(T_s)$ et la température T_s de la vapeur à la surface du matériau sont utilisés comme conditions aux limites dans l'étude de l'expansion du plasma.

La vapeur métallique éjectée à partir de la surface liquide est modélisée comme gaz idéal. Pour une géométrie axisymétrique 2-D Les équations de conservation axiale et radiale de masse, de la quantité de mouvement et d'énergie sont :

a) L'équation de continuité (conservation de masse)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho V) = 0$$

ρ et V sont la densité de masse du milieu et la vitesse

b) L'équation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial(\rho V)}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho V V) = -\bar{\nabla}(\tau)$$

τ un tenseur de quantité de mouvement.

c) L'équation de conservation de l'énergie.

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho V H) = \bar{\nabla} \left[\frac{K}{C_p} \text{grad}(H) \right]$$

Où C_p , K et H sont, respectivement, la chaleur spécifique à la pression constante, la conductivité thermique et l'enthalpie.

d) L'équation de conservation d'une espèce chimique. Le plasma métallique se mélange avec le gaz ambiant par diffusion et convection.

$$\frac{\partial(\rho X_{Ti})}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho V X_{Ti}) = \bar{\nabla} [\rho D_{Ti} \text{grad}(X_{Ti})]$$

Où le X_{Ti} et D_{Ti} sont la fraction de masse du métal et le coefficient de diffusion global du métal, respectivement, dans le gaz ambiant. Le degré d'ionisation et les fractions des espèces ioniques ou neutres présentes dans le plasma pour une température et une densité totale données, sont obtenus par la résolution de l'équation de Saha-Eggert :

$$\frac{N_e N(Z)}{N(Z-1)} = 6.1 \times 10^{21} \frac{g_l^Z}{g_n^{Z-1}} T_e^{3/2} \exp\left(-\frac{E_\infty^Z(n,l)}{T_e}\right) \quad \text{cm}^{-3}$$

N_e , T_e sont respectivement la densité et la température électroniques

$N(Z-1)$ est la densité ionique à l'état de charge (Z-1)

g_n^{Z-1} est le poids statistique du niveau n à l'état de charge (Z-1)

g_l^Z est le poids statistique du niveau l à l'état de charge Z

$E_\infty^Z(n,l)$ est l'énergie d'ionisation

2.3. Géométrie du problème et résolution des équations

On représente sur la figure (3) le maillage et la géométrie traitant de l'expansion du plasma, qui est considéré comme étant formé à la fin du pulse laser, et se situe entre 0.5 et 1 mm.

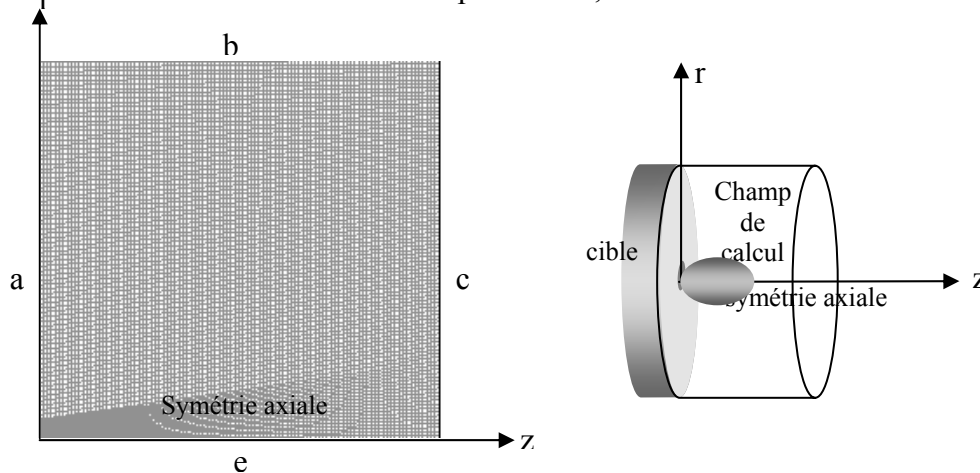


Figure 3: Représentation schématique de la cible et du champ de calcul utilisés dans la simulation

Le côté 'a' représente la face avant de l'échantillon, face sur laquelle a lieu l'impact de l'impulsion laser. La face 'b', 'c' et 'd' constitue les bords de la chambre à cible supposée de forme cylindrique, et 'e' représente l'axe de symétrie. La condition aux limites sur 'a', 'b', et 'c', est la température du milieu extérieur $T=T_{ext}$. Sur le côté 'e', une condition de flux nul $K \cdot \bar{\nabla}(T) \cdot \vec{n} = 0$, est appliquée. \vec{n} est le vecteur unitaire donnant la normale extérieure au côté considéré.

3. Résultats

Un des principaux résultats de cette première partie est montré sur la figure (4), où le comportement temporel de la température à la surface de la cible de Titane pour différentes valeurs de fluence durant et après le pulse laser est présenté

On remarque sur ces courbes (figure (4)), des variations très rapides lors de la phase de chauffage ou de refroidissement. Dès que la température de changement de phase est atteinte, il apparaît un plateau sur la courbe d'évolution. Ce dernier est dû à l'absorption ou au dégagement de chaleur provoqué par l'enthalpie de changement de phase au point de fusion.

On observe sur la figure (5), la partie fondue de la surface du matériau au bout d'une durée de 30 nanosecondes après le début de l'impulsion laser. La dimension et la forme (largeur) évoluent dans le temps.

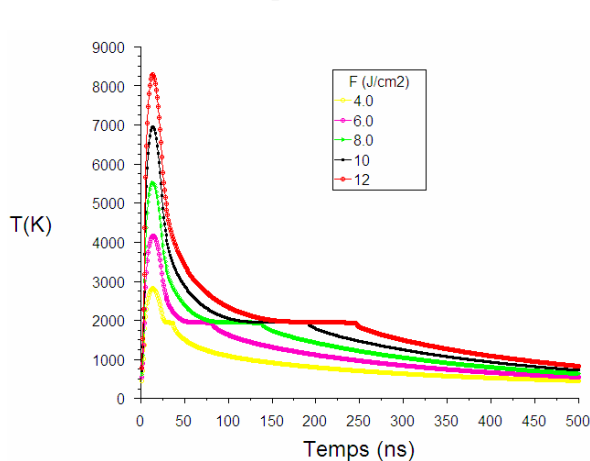


Figure 4: Comportement temporel de la température de surface du Ti pour différentes valeurs de fluence

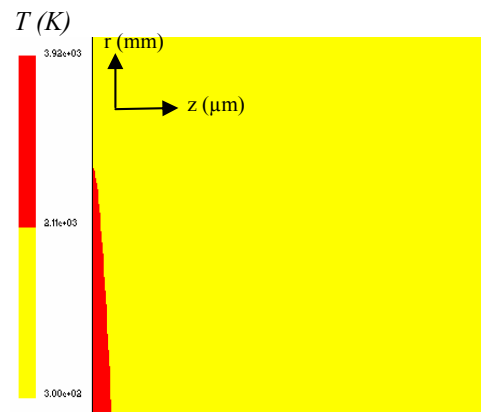


Figure 5: Représentation de la zone fondue dans la cible de Titane

On remarque sur ces courbes (figure (4)), des variations très rapides lors de la phase de chauffage ou de refroidissement. Dès que la température de changement de phase est atteinte, il apparaît un plateau sur la courbe d'évolution. Ce dernier est dû à l'absorption ou au dégagement de chaleur provoqué par l'enthalpie de changement de phase au point de fusion.

On donne dans ce qui suit les résultats de notre modélisation appliquée à l'expansion d'un plasma de Titane dans un environnement d'argon. Les séquences de la distribution des espèces jusqu'à 1 µs dans l'argon pour deux différentes pression, 100 mTorr (a) et 500 mTorr (b) ont été réalisées pour différents délais après le tir laser sont présentés dans la figure (6). On remarque que pour la pression élevée un confinement des particules se produit au cours de l'évolution, ce qui est en conformité avec les observations expérimentales.

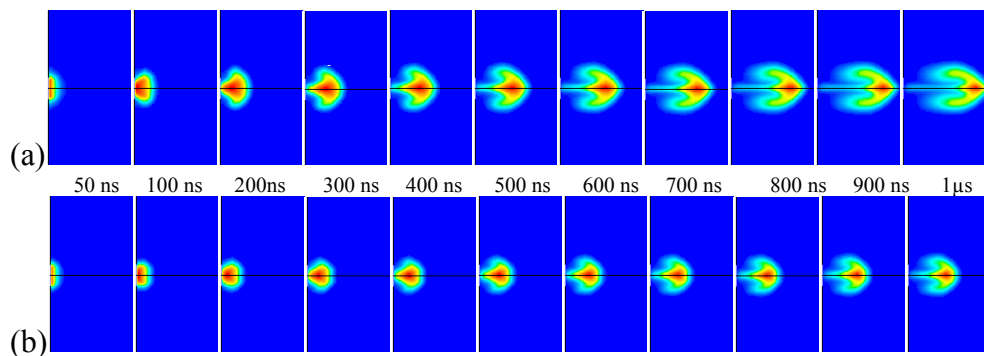


Figure 6: Chronologie de la distribution de la fraction massique du Titane

Sur la figure (7), on trace l'évolution de la position du front de la plume au cours du temps et les modèles décrivant la dynamique de l'expansion du plasma pour différentes pressions du gaz. A des pressions (≤ 200 mTorr), l'expansion est linéaire pour des temps inférieurs à 50 ns, et est décrite par le modèle d'onde de choc pour des temps supérieurs (courbes en pointillés). Pour une pression d'argon de 500 mTorr, la dynamique du plasma est décrite par le modèle d'onde de choc, la position R du front de l'onde de choc en fonction du temps s'écrit:

$$R = C \left(\frac{E}{\rho} \right)^{1/5} t^{2/5}, \quad C \text{ est une constante, } E \text{ est l'énergie laser dans la plume de vapeur et } \rho \text{ est la densité}$$

du gaz ambiant. Pour une pression de l'ordre de 2 Torr les trois modèles décrivant la dynamique des plasmas dans le gaz ambiant sont appliqués. Pour des temps supérieurs à 1500 ns, l'expansion est décrite par le modèle de force de viscosité donné par : $R = \chi_f [1 - \exp(-\beta t)]$

χ_f est la distance d'arrêt de la plume et β est le coefficient de freinage défini par : $\beta = \frac{v}{\chi_f}$

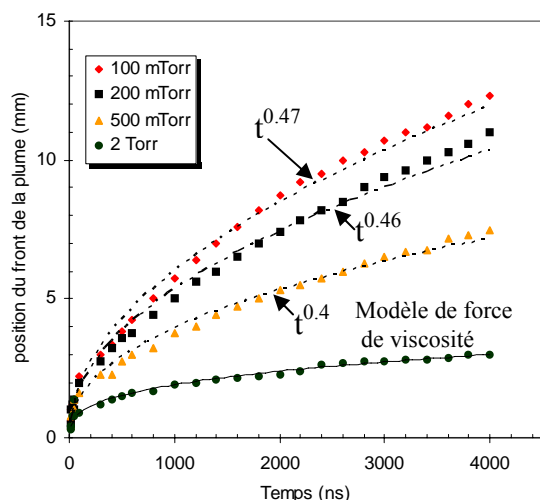


Figure 7: Evolution du front de la plume au cours du Temps Pour différentes pressions de l'argon

La figure (8) présente, l'évolution temporelle de la température des particules du plasma de Titane pour une densité d'énergie laser égale à 12 J/cm^2 et pour une pression d'Argon de 5 Torr. Aux premiers instants, la température augmente rapidement, elle varie entre 1000 et 35000 K. La valeur maximale est atteinte durant le pulse laser

La figure (9) représente l'évolution spatiale de la densité des particules de Titane dans la plume. Aux premiers instants, et au voisinage de la cible la densité est plus importante, cette densité décroît en cours d'expansion, ce qui permet au gaz ambiant de diffuser dans la plume.

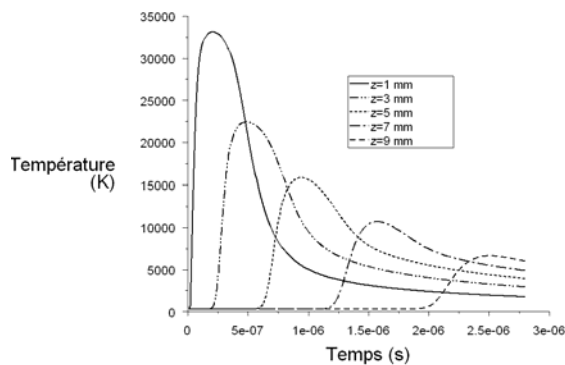


Figure 8: Evolution temporelle de la température du plasma pour différentes distances de la cible.

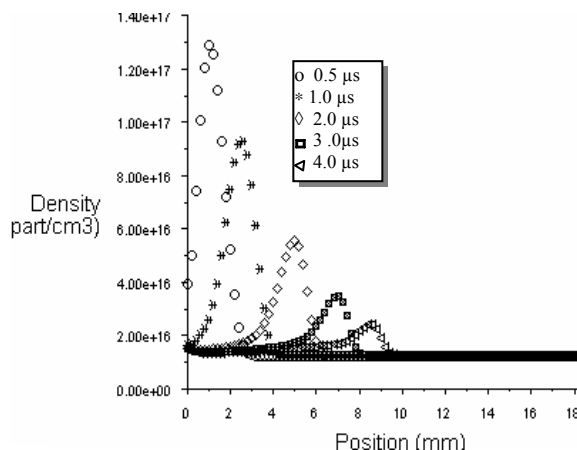


Figure 9: Distribution spatiale de la densité

4. Conclusion

Un modèle numérique a été développé pour l'étude de l'ablation laser en régime nanoseconde d'une cible de Titane dans le vide et en présence d'Argon. On utilise le logiciel de dynamique des fluides « Fluent » pour la résolution numérique, par la méthode des volumes finis, des équations gouvernantes. En première partie, on s'est intéressé aux transferts de chaleur lors de l'interaction laser-cible solide et du changement de phase solide-liquide. En seconde partie nous avons développé une approche pour étudier l'influence du gaz ambiant sur la dynamique de l'expansion de la plume obtenue lors de l'ablation d'une cible de Titane en présence d'Argon. On a démontré que quand la pression du gaz est modérée, la compression de la plume par le gaz est faible et le processus est gouverné par le mélange diffusif. A pression plus élevée, l'interaction est déterminée par les effets conjugués des pressions fortes de la plume et du gaz. Le front de la plume est alors fortement comprimé, ce qui est en conformité avec les observations expérimentales

Références

- [1] S.V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Series in Computational methods in Mechanics and Thermal Sciences (1980).
- [2] www.fluent.com.
- [3] A. Katz, *J. Appl. Phys.*, 71, p. 993 (1992)..
- [4] H. M. Smith and A. F. Turner, *Applied Optics*, 4, pp.147-148 (1965)
- [5] *Handbook of Chemistry and Physics*, 84th Ed, CRC Press, 2003-2004
- [6] C. Vivien: « *Etude des plasmas produit par laser pour l'élaboration de couches minces par ablation laser reactive* » Thèse de Doctorat, Université d'Orléans (1998).
- [7] C. J. Knight, *AIAA Journal*, vol.17, no.5, pp. 519-523 (1979).
- [8] F. Vidal & al, *Spectrochimica Acta B* **56** (2001) pp. 973-986
- [9] S. S. Harilal & al, *Journal of Physics B* **34**, 3717-3726 (2001).
- [10] M.L. Sentis & al, *J. Phys. IV France* **9** (1999) 139.
- [11] M. Capitelli & al, *Spectrochimica Acta Part B* 59 (2004) 271–289.