



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
(Δ.Π.Μ.Σ.) «ΕΠΙΣΤΗΜΗ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΥΛΙΚΩΝ»

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ
ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ**

*Material Removal via a Beam of Laser Rays: Experimental Study and Modeling using the
Molecular Dynamics Method*

ΓΕΩΡΓΙΟΣ Χ. ΚΥΡΙΑΚΑΚΗΣ

Διπλωματούχος Μηχανολόγος Μηχανικός Ε.Μ.Π.

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ: ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ, Δ.Ε. ΜΑΝΩΛΑΚΟΣ

Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών, Τομέας Τεχνολογίας των Κατεργασιών

ΑΘΗΝΑ, ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 2013



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
(Δ.Π.Μ.Σ.) «ΕΠΙΣΤΗΜΗ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΥΛΙΚΩΝ»

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ
ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

*Material Removal via a Beam of Laser Rays: Experimental Study and Modeling using the
Molecular Dynamics Method*

ΓΕΩΡΓΙΟΣ Χ. ΚΥΡΙΑΚΑΚΗΣ

Διπλωματούχος Μηχανολόγος Μηχανικός Ε.Μ.Π.

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ: ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ, Δ.Ε. ΜΑΝΩΛΑΚΟΣ

Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών, Τομέας Τεχνολογίας των Κατεργασιών

ΑΘΗΝΑ, ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 2013

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ.....	4
ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	6
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1	12
1. ΑΚΤΙΝΕΣ LASER ΚΑΙ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ ΑΥΤΩΝ ΜΕ ΤΗΝ ΥΛΗ: ΒΑΣΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ – ΕΜΦΑΣΗ ΣΤΗΝ ΠΕΡΙΟΧΗ ΤΩΝ ΜΕΤΑΛΛΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ	12
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2	49
2. ΦΩΤΟΑΠΟΔΟΜΗΣΗ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER (LASER ABLATION): ΒΑΣΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ – ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ – ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΙ.....	49
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3	118
3. Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ (MOLECULAR DYNAMICS – MD): ΒΑΣΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ – ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ – ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ ΓΙΑ ΦΩΤΟΑΠΟΔΟΜΗΣΗ ΜΕ LASER.....	118
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4	179
4. ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΦΩΤΟΑΠΟΔΟΜΗΣΗΣ ΜΕ LASER	179
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5	230
5. ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΚΩΔΙΚΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΤΗΣ ΦΩΤΟΑΠΟΔΟΜΗΣΗΣ ΜΕ LASER ΣΤΗ ΓΛΩΣΣΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΥ MATLAB	230
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6	254
6. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΗΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ ΤΩΝ ΠΕΙΡΑΜΑΤΩΝ ΦΩΤΟΑΠΟΔΟΜΗΣΗΣ	254
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7	355
7. ΑΝΑΛΥΣΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΚΑΙ ΠΑΡΑΘΕΣΗ ΣΥΓΚΡΙΣΕΩΝ ΜΕ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ.....	355
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8	408
8. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΠΕΡΑΙΤΕΡΩ ΜΕΛΕΤΗ	408
ΠΗΓΕΣ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑΣ.....	416
ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ (CURRICULUM VITAE).....	430

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Στα πλαίσια της εκπόνησης της παρούσας Μεταπτυχιακής Διπλωματικής Εργασίας, θα ήθελα να ευχαριστήσω καταρχήν τον Επιβλέποντα Καθηγητή μου Δρ. Δημήτριο Ε. Μανωλάκο, Καθηγητή του Τομέα Τεχνολογίας των Κατεργασιών της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου (Ε.Μ.Π.), για την αμέριστη συμπαράσταση και βοήθεια που μου προσέφερε σε όλα τα στάδια προετοιμασίας, ανάπτυξης και συγγραφής της Εργασίας, παίζοντας πολύ σημαντικό ρόλο στην προσπάθειά μου να αντιμετωπίσω επιτυχώς τις όποιες δυσκολίες παρουσιάστηκαν στο υπόψη χρονικό διάστημα.

Κατά δεύτερον, θα ήθελα να απευθύνω τις θερμές μου ευχαριστίες στην Υποψήφια Διδάκτορα Ε.Μ.Π. Παναγιώτα Κοράλλη, η οποία με βοήθησε σε πολύ σημαντικό βαθμό σε πολλά και ποικίλα θέματα που έχουν να κάνουν με την Εργασία, όπως είναι η διερεύνηση της βιβλιογραφίας, η ανάλυση και αξιολόγηση των πειραματικών αποτελεσμάτων αλλά και η εξοικείωση με στοιχεία που αφορούν την ανάπτυξη του υπολογιστικού κώδικα προσομοίωσης των υπό μελέτη φαινομένων και διεργασιών.

Στη συνέχεια, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον κ. Μιχάλη Κομίτσα, Διευθυντή Ερευνών στο Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών (ΕΙΕ), ο οποίος βοήθησε τα μέγιστα στη βέλτιστη δυνατή προετοιμασία και ρύθμιση της πειραματικής διάταξης που απαιτήθηκε για την καλύτερη δυνατή και ανεμπόδιστη διεκπεραίωση των πειραμάτων που ελήφθησαν υπόψη στην Εργασία.

Επίσης, δε θα μπορούσα να παραλείψω και τη συνδρομή των Καθηγητών και Διδασκόντων των οποίων τα μαθήματα παρακολούθησα κατά τη διάρκεια της επταετούς φοίτησής μου στο Ε.Μ.Π. (πέντε (5) χρόνια ως Προπτυχιακός Φοιτητής της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών και δύο (2) ως Μεταπτυχιακός Φοιτητής του Διατμηματικού Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών (Δ.Π.Μ.Σ.) «Επιστήμη και Τεχνολογία Υλικών»), με κυριότερους τον κ. Κωνσταντίνο Χαριτίδη, Καθηγητή της Σχολής Χημικών Μηχανικών (Τομέας Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών) και τον κ. Κωνσταντίνο Κυριακόπουλο, Καθηγητή της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών (Τομέας Μηχανολογικών Κατασκευών και Αυτομάτου Ελέγχου), των οποίων οι διαλέξεις και παραδόσεις μαθημάτων σε Κατεργασίες Υλικών με Δέσμες Υψηλής Ενέργειας και Προγραμματισμό σε MATLAB αντίστοιχα, αποδείχθηκαν πολύ χρήσιμες στην προσπάθεια ολοκλήρωσης της υπό εκπόνηση μελέτης.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Τέλος, θα ήθελα να πω ένα πολύ μεγάλο ευχαριστώ στην οικογένειά μου, η οποία με στήριξε από την πρώτη στιγμή που ανέλαβα την Εργασία, με ενθάρρυνε να πετύχω το καλύτερο δυνατό αποτέλεσμα στη δουλειά μου, και μου προσέφερε το μέγιστο βαθμό βοήθειας όποτε τη χρειάστηκα.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα εργασία εκπονήθηκε στα πλαίσια της απόκτησης του Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης (Μ.Δ.Ε.) στην Επιστήμη και Τεχνολογία Υλικών, από το αντίστοιχο Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών (Δ.Π.Μ.Σ.) του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου (Ε.Μ.Π.). Σκοπός αυτής είναι η μελέτη και ανάλυση του μηχανισμού φωτοαποδόμησης μεταλλικών υλικών, λόγω της αλληλεπίδρασής τους με την ακτινοβολία Laser. Η ανάλυση αυτή γίνεται τόσο σε πειραματικό όσο και σε θεωρητικό (υπολογιστικό) επίπεδο, με σκοπό την όσο το δυνατό πληρέστερη και πιο λεπτομερή διερεύνηση διαφόρων πτυχών του υπόψη φαινομένου.

Η αφαίρεση υλικού με χρήση ακτινοβολίας Laser είναι μία πολύ σημαντική και ενδιαφέρουσα διεργασία, στην οποία αξίζει να δοθεί ιδιαίτερη προσοχή στα πλαίσια της μελέτης των μικρο- και νανοκατεργασιών των μεταλλικών υλικών. Πρόκειται για μία διεργασία που, κατά τα τελευταία χρόνια, βρίσκει σπουδαία εφαρμογή σε ένα μεγάλο εύρος από εργαστηριακές και βιομηχανικές εφαρμογές. Πολλές είναι οι κατεργασίες των οποίων η ολοκλήρωση βασίζεται σε σημαντικό βαθμό στην αλληλεπίδραση του υλικού με μία δέσμη Laser και την αποβολή του λόγω της παραπάνω αλληλεπίδρασης, όπως είναι η εγχάραξη (scribing), η μικρο-διάτρηση (micro-drilling) αλλά και η παλμική εναπόθεση με Laser (Pulsed Laser Deposition – PLD). Η αφαίρεση υλικού με Laser έχει τη δυνατότητα να επιτύχει πολύ υψηλή ακρίβεια κοπής και να οδηγήσει σε επιφάνειες με άκρως ικανοποιητικά χαρακτηριστικά όσον αφορά την ποιότητά τους, έχει όμως ως εμφανές μειονέκτημα τη μερική αλλοίωση της δομής και των ιδιοτήτων του υλικού, οδηγώντας με αυτό τον τρόπο σε προϊόντα κατεργασίας με διαφορετικά χαρακτηριστικά από τα επιθυμητά. Η συγκέντρωση μεγάλων ποσών πυκνότητας ενέργειας της ακτινοβολίας Laser πάνω στο υλικό προκαλεί την ταχύτατη θέρμανσή του, με αποτέλεσμα την τήξη και εξάχνωση ατόμων του υλικού, αλλά και τη δημιουργία θερμικά επηρεασμένων ζωνών (Heat-Affected Zones - HAZ), τόσο λόγω της αύξησης της θερμοκρασίας αυτής καθαυτής, όσο και λόγω διάχυσης θερμότητας διαμέσου του υλικού. Η διαδικασία που ακολουθείται από την πρόσπτωση της ακτινοβολίας Laser πάνω στο υλικό έως και την τελική αφαίρεσή του, απαντάται στη βιβλιογραφία με τον όρο *φωτοαποδόμηση*, ο οποίος θα χρησιμοποιηθεί σε μεγάλη έκταση και εδώ.

Με σκοπό την αξιόπιστη και αποτελεσματική μελέτη του φαινομένου της φωτοαποδόμησης πάνω σε μέταλλα, διεξάγεται αρχικά η πειραματική πραγματοποίησή του πάνω σε πραγματικά μεταλλικά δοκίμια, ενώ στη συνέχεια καταστρώνεται ένας υπολογιστικός κώδικας στο λογισμικό προγραμματισμού με H/Y

MATLAB, ώστε να γίνει εμβάθυνση στο φαινόμενο και σύγκριση, όπου είναι δυνατό, με τα πειραματικά αποτελέσματα. Ο κώδικας που αναπτύχθηκε είναι βασισμένος πάνω στην υπολογιστική μέθοδο της *Μοριακής Δυναμικής* (Molecular Dynamics – MD). Πρόκειται για μία αιτιοκρατική μέθοδο προσομοίωσης, που στηρίζεται στην επίλυση του δεύτερου νόμου του Νεύτωνα, με σκοπό την παρακολούθηση της κίνησης των ατόμων ενός συστήματος (π.χ. μίας κρυσταλλικής δομής) μέσα σε αυτό. Τα μοντέλα Μοριακής Δυναμικής έχουν τη δυνατότητα να υπολογίσουν, εκτός από τα κινηματικά χαρακτηριστικά των ατόμων, τις ενέργειες και τις θερμοκρασίες που αυτά αποκτούν, ως αποτέλεσμα των αλληλεπιδράσεων τόσο μεταξύ τους, όσο και με τη δέσμη του Laser, κατά κύριο λόγο. Με λίγα λόγια, ολόκληρη η συμπεριφορά των ακτινοβολούμενων σωματιδίων μπορεί να προσομοιωθεί με ένα επαρκές και προσεκτικά καταστρωμένο μοντέλο MD. Χάρη στην υψηλή ικανότητα εξαγωγής αποτελεσμάτων που παρουσιάζει αυτή η μέθοδος, έχουμε τη δυνατότητα να υπολογίσουμε πολύ σημαντικές ποσότητες που σχετίζονται με το υπό μελέτη φαινόμενο, όπως είναι ο αριθμός των απορροφούμενων φωτονίων από το υλικό, η θερμοκρασία που αυτό αποκτά, η κατανομή αυτής στο χώρο (τόσο στην κυρίως ακτινοβολούμενη περιοχή όσο και στις θερμικά επηρεασμένες ζώνες), αλλά και το βάθος φωτοαποδόμησης που προκαλείται από την προσπίπτουσα ακτινοβολία. Στα πλαίσια της ανάλυσης μας, θα δώσουμε έμφαση στην ακτινοβόληση μεταλλικών υλικών με βραχείς παλμούς Laser, των οποίων η διάρκεια κυμαίνεται στην περιοχή των μερικών nanosecond (ns), ή δισεκατομμυριστών του δευτερολέπτου.

Το βασικότερο συμπέρασμα που εξάγεται μέσα από την παρούσα Εργασία είναι ότι τόσο ο μηχανισμός αφαίρεσης υλικού, όσο και το τελικώς επιτεύξιμο βάθος φωτοαποδόμησης, εξαρτώνται έντονα από την πυκνότητα ενέργειας του παλμού που προσπίπτει πάνω στο υλικό. Μέσα από τα αποτελέσματα που τελικώς λαμβάνονται, μπορούν να προβλεφθούν ορισμένα σημαντικά χαρακτηριστικά του φαινομένου, αλλά και να χρησιμοποιηθούν ως βάση για μελλοντικές προσπάθειες βελτιστοποίησης της διαδικασίας υπολογιστικής μοντελοποίησής του.

Στο Κεφάλαιο 1, γίνεται μία πρώτη αναφορά και συνοπτική ανάλυση διαφόρων εννοιών και βασικών στοιχείων που έχουν να κάνουν με την ακτινοβολία Laser και τις κατεργασίες που μπορούν να πραγματοποιηθούν με τη βοήθειά της.

Το Κεφάλαιο 2 εμβαθύνει περισσότερο στην έννοια της φωτοαποδόμησης με χρήση Laser (Laser Ablation) και στους μηχανισμούς με τους οποίους αυτή σχετίζεται. Παρατίθεται μία σειρά από

μαθηματικές σχέσεις και μοντέλα που έχουν χρησιμοποιηθεί στη διεθνή βιβλιογραφία για την ενδεδειγμένη περιγραφή και κατανόηση του φαινομένου.

Το Κεφάλαιο 3 αναφέρεται αρχικά σε διάφορες μεθόδους προσομοίωσης φαινομένων και πειραματικών διαδικασιών, ενώ εστιάζει κατά βάθος στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής, τα χαρακτηριστικά της, τις εφαρμογές της και επιλεγμένα παραδείγματα χρήσης της σε παρελθοντικές μελέτες.

Το Κεφάλαιο 4 ασχολείται με τη βήμα-βήμα ανάπτυξη ενός αξιόπιστου και ταυτόχρονα πλήρους υπολογιστικού κώδικα Μοριακής Δυναμικής, ικανού να περιγράψει τη διαδικασία της φωτοαποδόμησης και να χρησιμοποιηθεί από μελλοντικούς μελετητές στο προγραμματιστικό περιβάλλον που τους ενδιαφέρει.

Το Κεφάλαιο 5 βασίζεται πάνω στην ανάλυση του προηγούμενου Κεφαλαίου, προκειμένου να καταστρωθεί ο προαναφερθείς υπολογιστικός κώδικας στη MATLAB, ώστε η εκτέλεσή του να μας δώσει τα αποτελέσματα που επιθυμούμε.

Το Κεφάλαιο 6 παρουσιάζει και σχολιάζει την πειραματική διαδικασία που ακολουθήθηκε στο Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών (ΕΙΕ), πάνω σε λεπτά μεταλλικά υμένια, στα οποία μελετήθηκαν τα χαρακτηριστικά που σχετίζονται με τη φωτοαποδόμησή τους, έπειτα από την εφαρμογή παλμών μονοχρωματικής δέσμης Laser πάνω σε αυτά.

Στο Κεφάλαιο 7, γίνεται παράθεση και εξέταση των αποτελεσμάτων που έχουν προκύψει από την εκτέλεση του υπολογιστικού κώδικα που αναπτύχθηκε στο Κεφάλαιο 5, και διεξάγει, όπου αυτό είναι εφικτό, συγκρίσεις με τα πειραματικά δεδομένα. Από τα παραπάνω αποτελέσματα, θα ληφθούν στοιχεία ικανά να μας βοηθήσουν να μελετήσουμε τους μηχανισμούς που οδηγούν στη φωτοαποδόμηση των μεταλλικών υλικών.

Τέλος, το Κεφάλαιο 8 είναι αφιερωμένο στην εξαγωγή γενικών συμπερασμάτων για την παρούσα ανάλυση αλλά και στην παράθεση προτάσεων για περαιτέρω μελέτη και βελτιστοποίηση της πειραματικής και θεωρητικής διερεύνησης του φαινομένου στο μέλλον.

ABSTRACT

The present paper has been written with concern to the acquisition of the Postgraduate Specialization Diploma (MSc Taught) in Materials Science and Technology, from the respective Interdepartmental Postgraduate Study Program of the National Technical University of Athens (NTUA). Its aim is to study and analyze the mechanism of Laser Ablation in metals, as a result of their interaction with Laser radiation. This analysis is undertaken both experimentally and theoretically (computationally), in an attempt to investigate, in the fullest and most detailed possible manner, various aspects of the phenomenon in discussion.

Material removal using Laser radiation is a very important and interesting process, which deserves special attention when it comes to the study of micro- and nano-machining of metallic materials. It is a process that has been greatly applied in a broad spectrum of laboratory and industrial applications. Numerous are the manufacturing processes whose completion is principally based on the interaction of a material with a Laser beam, and its removal due to the aforementioned interaction, including scribing, micro-drilling and pulsed Laser deposition (PLD) just to mention a few. The removal of material using Laser radiation has the possibility of leading to high cutting precision and form surfaces that possess rather satisfactory characteristics with regards to their quality; however, its apparent disadvantage is the partial distortion of the material's properties and structure, making the manufacturing products possess different features than the ones desired. The concentration of large amounts of Laser radiation on the material causes its extremely fast heating, something that leads to the fusion and sublimation of certain atoms of the material, as well as the formation of heat-affected zones (HAZ), both because of the temperature increase itself and the diffusion of heat across the material. The procedure that is being followed from the incidence of Laser radiation on the material to its eventual removal, is found in bibliographical sources under the term *Laser Ablation*, which is also going to be used very frequently in our current analysis.

In order to reliably and efficiently study the Laser ablation phenomenon on metals, its experimental realization on actual metallic specimens is initially carried out, followed by the construction of a computational code using the MATLAB computer programming software, so that a deep insight is performed into this phenomenon and a comparison is done with experimental results, where this is possible. The code that has been developed is based on the computational *Molecular Dynamics* (MD)

method. This term refers to a deterministic simulation method, established on Newton's second law and aiming to monitor the movement of a system's atoms (e.g. a crystalline structure) inside the system itself. Molecular Dynamics models have the ability to compute, besides the kinematic characteristics of atoms, the energies and temperatures they acquire, as a consequence of both their in-between interactions, but also of their interactions mainly with the Laser beam. In a nutshell, the entire behavior of the irradiated particles can be simulated using a sufficient and carefully planned MD model. Thanks to the method's high capability of producing results, it is possible for us to calculate very important quantities related to the phenomenon under investigation, such as the number of absorbed photons from the material, the temperature it acquires, its distribution in space (both inside the mainly irradiated area and across the heat-affected zones), and the ablation depth caused by the incident radiation. In terms of our analysis, we are going to emphasize on the irradiation of metallic materials with short Laser pulses, whose duration is equal to a few nanoseconds (ns), or billionths of a second.

The major conclusion that is being drawn from within the present paper is that both the mechanism of material removal and the ablation depth that is finally attained, are strongly dependent on the *fluence* (energy density) of the incident Laser pulse on the material. Through the results that are finally obtained, various characteristics of the phenomenon can be predicted and used as a basis for future endeavors in optimizing the procedure of its computational modeling.

In Chapter 1, a first reference and brief analysis of diverse definitions and basic elements related to Laser radiation is being made, combined with the manufacturing processes that can be carried out with its help.

Chapter 2 presents, in greater depth, the concept of Laser Ablation and its relevant mechanisms. A series of mathematical relations and models used in international bibliographical sources of the past is also introduced, for a more thorough description and comprehension of the phenomenon.

Chapter 3 initially refers to various simulation methods for phenomena and experimental procedures, while principally focusing on the Molecular Dynamics method, its characteristics, its applications and selected examples of its use in past studies.

Chapter 4 has to do with the step-by-step development of a reliable and simultaneously complete computational Molecular Dynamics code, which is capable of describing the process of Laser Ablation and being used by future analysts in the programming environment of their interest.

Chapter 5 is based on the analysis of the previous Chapter, in an attempt to build the aforementioned computational code on MATLAB, so that its execution can lead to the desired results.

Chapter 6 presents and comments on the experimental procedure followed inside the Institute of Theoretical Physics and Chemistry of the Greek National Research Foundation, on thin metallic films, on which their ablation-related characteristics have been studied, after the application of monochromatic Laser beam pulses on them.

Chapter 7 comprises the presentation and investigation of the results that derive from the execution of the computational code that has been developed in Chapter 5, and performs, where applicable, comparisons with the experimental data. The above results may serve as bases from which we can extract several elements that are capable of helping us study the mechanisms that lead to the ablation of metallic materials.

Finally, Chapter 8 is devoted to drawing general conclusions for our present analysis, as well as the presentation of proposals for further study and optimization of the phenomenon's experimental and theoretical investigation in the future.

1. ΑΚΤΙΝΕΣ LASER ΚΑΙ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ ΑΥΤΩΝ ΜΕ ΤΗΝ ΥΛΗ: ΒΑΣΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ – ΕΜΦΑΣΗ ΣΤΗΝ ΠΕΡΙΟΧΗ ΤΩΝ ΜΕΤΑΛΛΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

1.1. Η χρησιμότητα των ακτίνων Laser σε διάφορες κατεργασίες και εφαρμογές

Κατά τα γνωστά από τη θεωρία των Κατεργασιών με Δέσμες Μεγάλης Ενέργειας [21][28][E1], ο όρος **LASER** αποτελεί ακρωνύμιο για τη φράση **Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation**, ένας όρος που καθιερώθηκε από τον Gordon Gould το 1959 και ο οποίος αποδίδεται στα ελληνικά ως *ενίσχυση φωτός με εξαναγκασμένη εκπομπή ακτινοβολίας*. Πρόκειται για ακτίνες φωτός που παράγονται μέσω μιας διαδικασίας οπτικής ενίσχυσης που βασίζεται στην εξαναγκασμένη εκπομπή φωτονίων. Οι ακτίνες αυτές χαρακτηρίζονται από διάφορα μήκη κύματος που δεν περιορίζονται μόνο στην περιοχή του ορατού φωτός (390-750 nm) περίπου, αλλά μπορούν να βρίσκονται και σε περιοχές μικρότερου (υπεριώδεις ακτίνες, ακτίνες-X κλπ.) ή και μεγαλύτερου (υπέρυθρες ακτίνες, μικροκύματα, ραδιοκύματα κλπ.) μήκους κύματος. Οι ακτίνες αυτές μπορούν είτε να εστιάζονται σε πολύ μικρές επιφάνειες, προκαλώντας με αυτό τον τρόπο έντονη ακτινοβολία, είτε μπορούν να ενσωματωθούν σε δέσμες χαμηλής απόκλισης ώστε να επιτευχθεί συγκέντρωση ισχύος σε μεγαλύτερη επιφάνεια.

Οι λέξεις που περιγράφουν το ακρωνύμιο LASER μάς οδηγούν στη διαπίστωση ότι, όταν ένα υλικό με συγκεκριμένο μοτίβο ενεργειακών σταθμών κλείνεται μέσα σε μία συντονιζόμενη κοιλότητα, η ακτινοβολία που προσπίπτει σε αυτό ενισχύεται επαρκώς μέσω μιας διαδικασίας εξαναγκασμένης αντίδρασης, και παρουσιάζει ορισμένες σαφώς διαφορετικές και ενδιαφέρουσες ιδιότητες από τις συμβατικές δέσμες φωτός, όπως τονίζεται στη βιβλιογραφία [41].

Στα πλαίσια ενός μεγάλου εύρους εφαρμογών στη σύγχρονη βιομηχανία, η χρήση των ακτίνων Laser, αλλά και των κατεργασιών που τις ενσωματώνουν, γίνεται ολοένα και δημοφιλέστερη στις μέρες μας. Χάρη στα Laser μπορούμε να επεξεργαστούμε διάφορα υλικά όπως μέταλλα, κεραμικά, γυαλιά, πλαστικά και σύνθετα υλικά, επεμβαίνοντας αποτελεσματικά σε διάφορα χαρακτηριστικά τους (π.χ. γεωμετρία, διαστάσεις, τραχύτητα και ποιότητα επιφάνειας κ.ο.κ.).

Οι κατεργασίες με χρήση Laser μπορούν να καταταγούν σε τρεις κατηγορίες, ανάλογα με το μηχανισμό που διέπει την αλληλεπίδραση της δέσμης με το υλικό:

- Κατεργασίες *συνένωσης* ή *πρόσθεσης* υλικού [29][30],
- Κατεργασίες *τροποποίησης* των ιδιοτήτων ενός υλικού [31]-[34],
- Κατεργασίες *αφαίρεσης* ή *αποβολής* υλικού [35]-[40].

Στα πλαίσια της παρούσας μελέτης μας, θα δώσουμε έμφαση στις κατεργασίες με Laser που έχουν ως σκοπό την αποβολή υλικού. Στην περίπτωση των Laser, αντίθετα με τις *συμβατικές* κατεργασίες αποβολής υλικού, δεν εμφανίζονται διάφορα προβλήματα όπως η φθορά και η θραύση των εργαλείων, οι παραμορφώσεις στις εργαλειομηχανές και οι δονήσεις κατά τη διάρκεια της κατεργασίας. Αυτά τα προβλήματα ενδέχεται να έχουν πολύ αρνητική επίδραση σε ολόκληρη την κατεργασία και να μην επιφέρουν τα επιθυμητά αποτελέσματα. Η χρήση Laser για τις κατεργασίες επιτρέπει την αποφυγή τέτοιου είδους προβλημάτων, ενώ ταυτόχρονα μεγιστοποιεί το ποσοστό αφαίρεσης υλικού και εξασφαλίζει βέλτιστη ποιότητα επιφάνειας και ακρίβεια στα χαρακτηριστικά που θέλουμε να προσδώσουμε στο υλικό. Επιπλέον, οι κατεργασίες με χρήση Laser πλεονεκτούν έναντι των συμβατικών στο ότι χαρακτηρίζονται από πολύ καλύτερη σχέση κόστους – απόδοσης, λόγω της δυνατότητας παραγωγής εξαρτημάτων και προϊόντων υψηλής ποιότητας με σχετικά χαμηλό κόστος. Μάλιστα, καθώς η τεχνολογία των πηγών Laser μικρού κόστους σταδιακά αναπτύσσεται, επηρεάζεται συνακόλουθα η βιομηχανική χρήση διαφόρων από τις αντίστοιχες κατεργασίες. Κάτι τέτοιο έχει σαν θετική συνέπεια την περαιτέρω βελτίωση της σχέσης κόστους – απόδοσης στις κατεργασίες με Laser.

Με τη βοήθεια μιας δέσμης Laser μπορούμε να προκαλέσουμε διάτρηση, κοπή, χάραξη, συγκόλληση και θερμική επεξεργασία σε ένα υλικό χρησιμοποιώντας κατά βάση την ίδια διάταξη Laser και ακολουθώντας την ίδια ακριβώς προετοιμασία (setup) πάνω σε αυτή. Αυτό προφανώς δε σημαίνει ότι δε χρειάζεται να γίνουν παρεμβάσεις στα παραπάνω για κάθε διαφορετική διεργασία. Παρ'όλα αυτά, οι παρεμβάσεις που θα πραγματοποιηθούν είναι εν γένει μικρής έκτασης και περιορίζονται απλά στη μεταβολή κάποιων κοινών παραμέτρων.

Οι κατεργασίες αποβολής υλικού με χρήση Laser μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε ένα πλήθος βιομηχανικών και επιστημονικών πεδίων, όπως αυτά της εμβιομηχανικής, της χειρουργικής και της μικροεπεξεργασίας. Επίσης, χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία τρισδιάστατων μορφών. Πάντως, δεν είναι όλες οι παραπάνω εφαρμογές εξίσου ανεπτυγμένες και δημοφιλείς στη βιομηχανία, κάτι που συμβαίνει για δύο πιθανούς λόγους: είτε επειδή τα πλεονεκτήματά τους σε σχέση με ανταγωνιστικές διεργασίες είναι περιορισμένα, είτε επειδή βρίσκονται σε πειραματικό στάδιο και δεν έχουν θεμελιωθεί επαρκώς για βιομηχανική χρήση.

Οι κατεργασίες αποβολής υλικού με χρήση Laser αποτελούν από μόνες τους μία καθιερωμένη οικογένεια κατεργασιών. Η δέσμη που χρησιμοποιείται για την ακτινοβολήση της επιφάνειας – στόχου μπορεί να είναι είτε συνεχούς κύματος είτε παλμική, ενώ το μήκος κύματος της δέσμης αυτής μπορεί να κυμανθεί από κλάσματα του μm έως και δεκάδες μm. Καθώς η δέσμη αυτή επιδρά στο υλικό, ορισμένη ποσότητα της ενέργειας που ακτινοβολείται απορροφάται από το υλικό με τη μορφή φωτονίων, κάτι που οδηγεί στην έντονη αύξηση της θερμοκρασίας στο υλικό-στόχο, κοντά στην περιοχή του στίγματος που αφήνει η δέσμη. Σε αυτή την περιοχή, η οποία παίζει το ρόλο *θερμικά επηρεασμένης ζώνης* (Heat-Affected Zone, HAZ), ή ακριβέστερα *ζώνης επηρεασμένης από τη δέσμη Laser* (Laser-Affected Zone, LAZ), οι μηχανικές ιδιότητες του υλικού εξασθενούν, ενώ μέρος του υλικού μπορεί να υποστεί τήξη ή ακόμα και εξάχνωση.

Τα αποτελέσματα που προκαλεί η δέσμη Laser στο υλικό μπορούν να ταξινομηθούν, σύμφωνα με τη βιβλιογραφία [25], [26], [27], σε τρεις διαφορετικές κατηγορίες. Η κατηγορία στην οποία κατατάσσεται το κάθε αποτέλεσμα προσδιορίζεται με βάση το υλικό που θα υποβληθεί σε επεξεργασία, την ισχύ της δέσμης Laser, το μέγεθος του στίγματος της δέσμης και την ταχύτητα ανίχνευσης, σε περίπτωση που υπάρχει σχετική κίνηση μεταξύ της δέσμης Laser και του υλικού-στόχου. Έτσι έχουμε τα εξής:

- **Μηχανικά αποτελέσματα.** Όταν η ένταση της δέσμης Laser λαμβάνει μικρές ή μεσαίες τιμές και η ταχύτητα ανίχνευσης είναι υψηλή, η θερμοκρασία στην επεξεργαζόμενη επιφάνεια ανεβαίνει μέχρι μία τιμή χαμηλότερη από το σημείο τήξης του υλικού. Κατά συνέπεια λαμβάνει χώρα τοπική θέρμανση στο επεξεργαζόμενο τμήμα, προκαλώντας έτσι εξασθένηση στους δεσμούς των μορίων του υλικού.
- **Αποτελέσματα αλλαγής φάσης:** Για υψηλές εντάσεις Laser, η θερμοκρασία της επεξεργαζόμενης επιφάνειας του υλικού μπορεί να αυξηθεί πάνω από το σημείο τήξης του υλικού, ή ακόμα και πάνω από το σημείο εξάχνωσής του.
- **Φυσικές-χημικές αλληλεπιδράσεις:** Αυτές πραγματοποιούνται μεταξύ του τμήματος που υπόκειται σε επεξεργασία και του βοηθητικού υλικού που χρησιμοποιείται κατά περίπτωση και το οποίο την επηρεάζει ανά πάσα στιγμή. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές μπορούν να ενεργοποιήσουν φαινόμενα όπως η πυράκτωση, η πυροσυσσωμάτωση, η συγκόλληση και η ανάμιξη.

Κατά τα τελευταία 20 χρόνια, η ανάπτυξη της τεχνολογίας των Laser έχει επικεντρωθεί κατά βάση στον τομέα των *μικρο-κατεργασιών*. Χάρη στα Laser, έχει διευκολυνθεί σημαντικά η παραγωγή μικρότερων εξαρτημάτων, καθώς επίσης και η βελτίωση των χαρακτηριστικών τους. Οι μικρο-κατεργασίες με Laser βρίσκουν εφαρμογή σε διάφορους βιομηχανικούς τομείς, με κυριότερους την Αεροπορική και Αμυντική βιομηχανία, αλλά και την Αυτοκινητοβιομηχανία, τη Βιοϊατρική και την Ηλεκτρονική. Μάλιστα, αναφέρουμε χαρακτηριστικά ότι η τεχνολογία Laser στις μικροκατεργασίες

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

μπορεί να εφαρμοστεί στη μικροκλίμακα (ανάλυση 1μm) απλά χρησιμοποιώντας στοιχειώδη εξοπλισμό και εφαρμόζοντας βασικές μεθόδους κατεργασίας υλικών [22]. Το παραπάνω καταδεικνύει ότι, χάρη στην εξελισσόμενη τεχνολογία, μπορούμε με πιο σύνθετες διατάξεις να πετύχουμε ακρίβεια έως και μερικών nm στην εκάστοτε μικρο-κατεργασία.

Ο παρακάτω Πίνακας 1.1. παρουσιάζει συνοπτικά διάφορες εφαρμογές στις οποίες χρησιμοποιούνται οι μικρο-κατεργασίες με Laser:

A. Αεροπορική / Αμυντική βιομηχανία <ul style="list-style-type: none"> ➤ Ψύξη τμημάτων στροβίλων ➤ Σιγαστήρες κινητήρων ➤ Συστήματα καθοδήγησης πυραύλων 	B. Αυτοκινητοβιομηχανία <ul style="list-style-type: none"> ➤ Ακροφύσια εγχυτήρων καυσίμου ➤ Φίλτρα καυσίμου ➤ Αισθητήρες φρένων ➤ Λίπανση διωστήρων
Γ. Βιοϊατρική <ul style="list-style-type: none"> ➤ Αισθητήρες καθετήρων ➤ Δειγματοληψία DNA ➤ Προετοιμασία / Παραγωγή εμβολίων 	Δ. Ηλεκτρονική / Μικροηλεκτρονική <ul style="list-style-type: none"> ➤ Ακροφύσια εκτυπωτών ➤ Τυπωμένα κυκλώματα / Πλακέτες PBC ➤ Ψύξη σε PBC ➤ Οπτικοί διακόπτες
Ε. Περιβάλλον <ul style="list-style-type: none"> ➤ Αισθητήρες τοξικών αερίων ➤ Τεχνολογία ηλιακών κυψελών ➤ Ενεργειακές κυψέλες ➤ Εξειδικευμένα φίλτρα 	ΣΤ. Άλλες χρήσεις / εφαρμογές <ul style="list-style-type: none"> ➤ Συσκευασία τροφίμων ➤ Διάτρηση πολύτιμων λίθων ➤ Ψηφιακά αποτυπώματα

Πίνακας 1.1. Βασικές εφαρμογές των μικρο-κατεργασιών με Laser.

Ειδικά στην περίπτωση των Laser βραχέων παλμών (*Short Pulse Lasers*), χρησιμοποιούνται σε ένα μεγάλο εύρος εφαρμογών της βιομηχανίας και της καθημερινής ζωής [3][12][58]. Συγκεκριμένα, συναντάμε τα Laser βραχέων παλμών στις εξής εφαρμογές:

- Κατεργασίες σε προηγμένα υλικά.
- Κατεργασίες κοπής / μικροκοπής και διάτρησης / μικροδιάτρησης.
- Διαμόρφωση της μικροδομής και / ή της νανοδομής επιφανειών.
- Εφαρμογές νανοτεχνολογίας (π.χ. δημιουργία νανο-συμπλεγμάτων αδάμαντος και νανοσωλήνων άνθρακα).

- Παλμική εναπόθεση με Laser (Pulsed Laser Deposition – PLD) λεπτών υμενίων και επικαλύψεων.
- Χειρουργικές επεμβάσεις με χρήση Laser.
- Αναστήλωση έργων τέχνης.

Επιπλέον, τα Laser βραχέων παλμών μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη διερεύνηση των συνθηκών κάτω από τις οποίες μπορεί να λάβει χώρα το φαινόμενο της τήξης αδρανειακού εγκλεισμού (inertial confinement fusion). Για τον παραπάνω σκοπό έχει γίνει χρήση ενός πανίσχυρου συστήματος Laser που κατασκευάστηκε στο Εθνικό Εργαστήριο Lawrence Livermore στις ΗΠΑ.

Επίσης, ειδικά στην περίπτωση των κατεργασιών με Laser σε *μεταλλικά υλικά*, οι αρχές αλληλεπίδρασης μετάλλων και Laser, όπως θα τις δούμε σε επόμενη Υποενότητα, παίζουν εξέχοντα ρόλο σε εφαρμογές κατεργασιών όπως η παραγωγή κραμάτων, η διάτρηση και οι συγκολλήσεις, όπως επίσης και στην απόκτηση θερμοφυσικών δεδομένων σε υψηλές θερμοκρασίες.

Ιδιαίτερα διαδεδομένη, σε εφαρμογές όπως αυτές που αναφέρθηκαν παραπάνω, είναι η χρήση των Laser *υπερβραχέων παλμών* (*Ultrashort Pulse Lasers*), δηλαδή των διατάξεων Laser που απαιτούν διάρκεια παλμού κατά βάση τάξης μεγέθους *femtoseconds* ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$), ίσως και μερικών *picoseconds* ($1 \text{ ps} = 10^{-12} \text{ s}$) για την παραγωγή ενός κύματος. Εκτενέστερη αναφορά για τα Laser υπερβραχέων παλμών θα γίνει σε επόμενη υποενότητα του Κεφαλαίου. Αυτό που μπορούμε να αναφέρουμε επί του παρόντος, το οποίο τονίζεται και στη βιβλιογραφία [3][42][43], είναι το ότι τα Laser υπερβραχέων παλμών παρουσιάζουν σημαντικά πλεονεκτήματα έναντι των Laser με διάρκεια παλμού της τάξης των *nanoseconds* ($1 \text{ ns} = 10^{-9} \text{ s}$):

- Εξασφαλίζουν την ελαχιστοποίηση του τηγμένου υλικού κατά τη διεργασία της φωτοαποδόμησης (Laser Ablation, βλ. παρακάτω), κατά την οποία λαμβάνει χώρα ένας συνδυασμός εξάχνωσης, εξάτμισης και τήξης του υλικού. Η ελαχιστοποίηση του τήγματος βελτιστοποιεί την ποιότητα της κατεργασίας.
- Παρουσιάζουν αποδοτική εναπόθεση ενέργειας και εξασφαλίζουν την ελαχιστοποίηση της μεταφοράς θερμότητας και της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ) στην περιοχή του υλικού περιμετρικά του χωρίου όπου εφαρμόζεται η ακτίνα Laser.
- Εμφανίζουν υψηλή χωρική συγκέντρωση θερμότητας, με αποτέλεσμα την απομάκρυνση μικρότερου όγκου υλικού, ενισχύοντας με αυτό τον τρόπο την ακρίβεια στις κατεργασίες όπου χρησιμοποιούνται.

Τα παραπάνω πλεονεκτήματα επιτρέπουν την άρση των περιορισμών που διέπονται από τις συμβατικές μεθόδους κατεργασιών και μικροκατεργασιών, καθώς επίσης και να προσφέρουν τα προϊόντα που απαιτούνται από τις σύγχρονες βιομηχανίες.

1.2. Βασικά στοιχεία της μικρομοριακής δομής των υλικών

Προκειμένου να κατανοήσουμε καλύτερα τις βασικές αρχές κάτω από τις οποίες λαμβάνει χώρα η αλληλεπίδραση μεταξύ της ακτινοβολίας Laser και των διαφόρων υλικών, είναι σημαντικό να κάνουμε μία συνοπτική περιγραφή των βασικών στοιχείων που σχετίζονται με τη μικρομοριακή δομή των υλικών, καθώς αυτά τα στοιχεία είναι πολύ σημαντικό να ληφθούν υπόψη κατά τη μελέτη της συμπεριφοράς των υλικών όταν προσπίπτει η ακτινοβολία. Ιδιαίτερη έμφαση θα δοθεί στο πεδίο των μετάλλων, καθώς η παρούσα μελέτη των κατεργασιών με Laser ειδικεύεται ως επί το πλείστον στην υπόψη κατηγορία υλικών.

Όπως γνωρίζουμε από τη θεωρία της Χημείας Στερεάς Κατάστασης, η ταξινόμηση των στερεών υλικών μπορεί να γίνει με βάση την κανονικότητα με την οποία κάθε άτομο ή ιόν είναι τοποθετημένο σε σχέση με το άλλο. Με βάση αυτή την ταξινόμηση, όλα τα μέταλλα, όπως και ορισμένα κεραμικά και πολυμερή υλικά, ανήκουν στην κατηγορία των *κρυσταλλικών* υλικών, όταν βεβαίως στερεοποιούνται υπό κανονικές συνθήκες (όσον αφορά τη θερμοκρασία, την πίεση και την υγρασία του περιβάλλοντος). Ως *κρυσταλλικό* ορίζεται το υλικό εκείνο στο οποίο τα άτομα ή τα ιόντα έχουν τοποθετηθεί με περιοδικότητα σε μεγάλες αποστάσεις μεταξύ τους, με σκοπό, κατά τη στερεοποίησή τους, να αποτελούν ένα επαναλαμβανόμενο τρισδιάστατο πρότυπο στο οποίο κάθε ένα συνδέεται με τα γειτονικά του. Τα κρυσταλλικά υλικά, άρα και τα μέταλλα, χαρακτηρίζονται από ιδιότητες που εξαρτώνται από την κρυσταλλική δομή του υλικού, δηλαδή τον τρόπο με τον οποίο τα άτομα, τα μόρια ή τα ιόντα είναι διατεταγμένα στο χώρο. Συνήθως κάθε άτομο, μόριο ή ιόν απέχει από το διπλανό του κατά μία μεγάλη απόσταση, ενώ στην κατηγορία των κρυσταλλικών υλικών απαντώνται πολλές διαφορετικές κρυσταλλικές δομές. Οι κρυσταλλικές δομές των μετάλλων είναι εν γένει σχετικά απλές, ενώ όσον αφορά τα κεραμικά και τα πολυμερή αυξάνεται η πολυπλοκότητα στη δομή.

Κατά την περιγραφή των διαφόρων κρυσταλλικών δομών, κάνουμε την παραδοχή ότι τα άτομα ή τα ιόντα είναι στέρεες σφαίρες ορισμένης διαμέτρου. Πρόκειται για το *πρότυπο των σκληρών σφαιρών* (hard sphere model), όπου υπάρχει επαφή μεταξύ των δύο γειτονικών σφαιρών που μοντελοποιούν τους *πλησιέστερους γείτονες* (nearest neighbors) όσον αφορά τα άτομα.

Σημειώνουμε τέλος ότι ο όρος *πλέγμα* (lattice) μπορεί μερικές φορές να χρησιμοποιηθεί ως όρος συναφής με την κρυσταλλική δομή.

1.2.1. Κρυσταλλικά πλέγματα Bravais και κρυσταλλικές κυψελίδες (κρυσταλλικά κύτταρα)

Θα μπορούσε κάποιος να υποστηρίξει ότι στη φύση δεν απαντώνται άπειροι κρύσταλλοι και τέλειες κρυσταλλικές δομές. Όμως, όσον αφορά τους πραγματικούς κρυστάλλους, οι οποίοι συνήθως περιλαμβάνουν πλήθος ατόμων τάξης μεγέθους των 10^{23} , η προσέγγιση του άπειρου κρυστάλλου θα μπορούσε να θεωρηθεί επαρκής. Το μοναδικό μειονέκτημα μιας τέτοιας προσέγγισης είναι το γεγονός ότι αμελούνται πιθανές ατέλειες στο υλικό ή αταξίες στην κρυσταλλική δομή. Οι ατέλειες μπορούν να ληφθούν υπόψη ως διατάραξη της τάξης σε ένα σύστημα, ενώ η συμπερίληψη των αταξιών στην ανάλυσή μας είναι απαραίτητη για τη μελέτη άλλων φαινομένων, όπως είναι η υαλώδης συμπεριφορά των υλικών. Όμως, όσον αφορά το υπό μελέτη φαινόμενο της φωτοαποδόμησης με Laser (Laser Ablation), οι παραπάνω επιδράσεις (ατέλειες / αταξίες) δεν παίζουν σημαντικό ρόλο και επομένως θεωρούνται αμελητέες.

Όσον αφορά τον τέλειο κρύσταλλο, είναι σημαντικό να ορίσουμε ένα πλέγμα Bravais. Το πλέγμα Bravais καθορίζει τις διάφορες δομές που χαρακτηρίζουν τη βάση του κρυστάλλου. Η βάση μπορεί να έχει το χαρακτήρα απλού ατόμου, ατομικών ομάδων, ιόντων ή μορίων. Ένα πλέγμα Bravais με m διαστάσεις περιλαμβάνει όλα τα διανύσματα \vec{R}_i που ορίζονται από την παρακάτω σχέση (1.1):

$$\vec{R}_i = \sum_{j=1}^m n_{ij} \vec{a}_j \quad (1.1)$$

όπου \vec{a}_j είναι τα βασικά διανύσματα του πλέγματος ($i = 1, 2, \dots, m$) και n_{ij} ακέραιοι αριθμοί. Το απλούστερο πλέγμα ονομάζεται αρχέγονο (primitive) και σε ένα τέτοιο πλέγμα τοποθετείται το ίδιο ακριβώς άτομο πάνω σε κάθε σημείο \vec{R}_i του πλέγματος Bravais. Η μετατόπιση του αρχέγονου πλέγματος κατά οποιοδήποτε διάνυσμα \vec{R}_i θα έχει ως αποτέλεσμα τη συγκρότηση του ίδιου άπειρου πλέγματος. Η μετατόπιση $T_{\vec{R}_i}$ ορίζεται μέσω ενός τελεστή ο οποίος δρα πάνω σε μία αυθαίρετη συνάρτηση $f(\vec{r})$, όπως π.χ. η συνάρτηση πυκνότητας ή η κυματική συνάρτηση για ένα ηλεκτρόνιο, $f(\vec{r})$, με το διάνυσμα \vec{r} να αντικαθίσταται από το $\vec{r} + \vec{R}_i$, δηλαδή:

$$T_{\vec{R}_i} : f(\vec{r}) \rightarrow f(\vec{r} + \vec{R}_i) \quad (1.2)$$

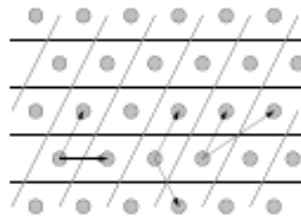
Σε ορισμένα προβλήματα δεν επαρκεί η θεώρηση ενός τόσο απλού κρυσταλλικού πλέγματος. Για την περιγραφή περίπλοκων κρυσταλλικών δομών, θα πρέπει να εισαχθεί ένα πλέγμα που να περιλαμβάνει κάποια βάση. Οι j διαφορετικοί πυρήνες ομαδοποιούνται γύρω από τα βασικά διανύσματα \vec{r}_j που

σχετίζονται με τα σημεία του πλέγματος Bravais, δηλαδή στη διανυσματική θέση $\vec{R}_i + \vec{r}_j$. Προκειμένου για την πλήρωση ολόκληρου του διαστήματος, χωρίς την ύπαρξη κενού ή επικάλυψης, εισάγουμε εδώ την έννοια της μοναδιαίας κυψελίδας (*Unit Cell*), η οποία μπορεί εναλλακτικά να αποδοθεί ως κρυσταλλικό κύτταρο. Πρόκειται για μία μικρή οντότητα, η επανάληψη της οποίας οδηγεί στη συγκρότηση της κρυσταλλικής δομής. Το μοντέλο των κρυσταλλικών κυψελίδων είναι γενικά αποδεκτό για την περιγραφή κρυσταλλικών δομών.

Για τις περισσότερες κρυσταλλικές δομές, οι μοναδιαίες κυψελίδες είναι παραλληλεπίπεδες ή πρίσματα με τρεις ομάδες παράλληλων επιφανειών. Η μοναδιαία κυψελίδα επιλέγεται για την αναπαράσταση της συμμετρίας της κρυσταλλικής δομής, με τις ατομικές θέσεις στον κρύσταλλο να δημιουργούνται από μετατοπίσεις αυτού, σύμφωνα με την παραπάνω περιγραφή και λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις (2.1) και (2.2).

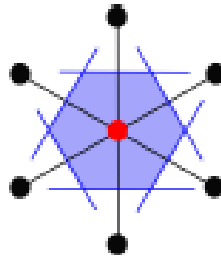
Η κατασκευή μιας μοναδιαίας κυψελίδας (ενός στοιχειώδους κρυσταλλικού κυττάρου) μπορεί να λάβει χώρα με πολλούς τρόπους, από τους οποίους θα αναφέρουμε ενδεικτικά τους εξής:

- *Παραλληλεπίπεδη διάταξη*, η οποία δημιουργείται από τα βασικά διανύσματα του πλέγματος Bravais, βλ. Σχήμα 1.1.:



Σχήμα 1.1. Μια πιθανή μοναδιαία κυψελίδα, μαζί με διαφορετικά διανύσματα – βάσεις.

- *Κυψελίδα Wigner-Seitz για το πλέγμα.* Ορίζεται ως η ομάδα σημείων στο χώρο που βρίσκονται πλησιέστερα στο δοθέν σημείο του πλέγματος από ό,τι σε οποιοδήποτε άλλο σημείο πάνω στο πλέγμα. Από γεωμετρικής άποψης, αυτή η κυψελίδα συγκροτείται σχεδιάζοντας τα κάθετα επίπεδα διχοτόμησης των διανυσμάτων μετατόπισης από το ένα σημείο του πλέγματος προς τους πλησιέστερους γείτονές του (Σχήμα 1.2.). Ο όγκος που αναπαρίσταται στο Σχήμα με μπλε χρώμα μοιράζεται τη συμμετρία του υποφαινόμενου πλέγματος.



Σχήμα 1.2. Το κρυσταλλικό κύτταρο Wigner-Seitz για ένα δισδιάστατο πλέγμα με εξαπλή συμμετρία.

Προκειμένου για την απλούστευση της ανάλυσής μας, μπορούμε να παραδεχτούμε ότι οι παραλληλεπίπεδες γωνίες και τα κέντρα των ατόμων συμπίπτουν. Επίσης, μία συγκεκριμένη κρυσταλλική δομή μπορεί να συγκροτηθεί με περισσότερες από μία μοναδιαίες κυψελίδες. Βεβαίως, τις περισσότερες περιπτώσεις, η μοναδιαία κυψελίδα χρησιμοποιείται με τη μέγιστη δυνατή γεωμετρική συμμετρία.

Μπορούμε εδώ να αναφέρουμε ότι η ιδέα του στοιχειώδους κρυσταλλικού κυττάρου αποκτά μεγαλύτερο ενδιαφέρον όταν εξετάζεται στον *αντίστροφο χώρο* από ό,τι στον ευθύ. Στον αντίστροφο χώρο το κύτταρο αποτελεί την *πρώτη ζώνη Brillouin* και περιέχει όλων των ειδών τις πληροφορίες για ένα υλικό όσον αφορά την αγωγιμότητά του, αν δηλαδή είναι αγωγός, ημιαγωγός ή μονωτής.

1.2.2. Κρυσταλλικές δομές των υλικών – Έμφαση στα μέταλλα

Μέσα σε ένα μεταλλικό υλικό, τα άτομα που περιλαμβάνει συνδέονται μεταξύ τους μέσω ενός ατομικού δεσμού ο οποίος ονομάζεται *μεταλλικός δεσμός*. Ο δεσμός αυτός έχει το πλεονέκτημα της μη ύπαρξης προσανατολισμού (ουδέτερο άθροισμα ιδιοπεριστροφών – spin), σε αντίθεση με τους ομοιοπολικούς δεσμούς όπου συμβαίνει το αντίθετο. Εκλαμβάνουμε το παραπάνω χαρακτηριστικό ως πλεονέκτημα, επειδή χάρη σε αυτό δεν υπάρχουν περιορισμοί ούτε ως προς τον αριθμό των πλησιέστερων γειτονικών ατόμων (nearest neighbors) ως προς τυχόν άτομο, αλλά ούτε και ως προς τη θέση τους. Όπως μαρτυρά και το όνομά του, ο μεταλλικός δεσμός απαντάται μόνο στα χημικά στοιχεία που χαρακτηρίζονται ως *μεταλλικά*, δηλαδή σε αυτά που περιλαμβάνουν μόνο μικρό αριθμό ηλεκτρονίων (π.χ. 1 για τα αλκάλια, 2 για τις αλκαλικές γαίες) στην εξωτερική τους στιβάδα.

Η ερμηνεία του μεταλλικού δεσμού μπορεί να γίνει μέσω διαφόρων θεωριών, αλλά αυτή που έχει επικρατήσει είναι αυτή των *ελεύθερων ηλεκτρονίων*. Σύμφωνα με την παραπάνω θεωρία, τα ηλεκτρόνια δεν αποτελούν τμήμα ενός μόνο ατόμου αλλά ολόκληρου του κρυστάλλου. Σε όλη την έκταση του κρυστάλλου, η κίνηση των ηλεκτρονίων λαμβάνει χώρα με τη μορφή του *ηλεκτρονιακού νέφους*. Το κρυσταλλικό πλέγμα του μετάλλου χαρακτηρίζεται από μία κανονική διάταξη κατιόντων (θετικά

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

φορτισμένων ατόμων) και αποσπασθέντων ηλεκτρονίων, τα οποία διασκορπίζονται και κινούνται ελεύθερα ανάμεσα στα άτομα. Η αλληλεπίδραση κατιόντων – ηλεκτρονίων σε μία τέτοια διάταξη έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία δυνάμεων ηλεκτροστατικής φύσης. Στην ύπαρξη των ελεύθερων ηλεκτρονίων οφείλεται η υψηλή θερμική και ηλεκτρική αγωγιμότητα που παρουσιάζουν τα μέταλλα. Αυτό συμβαίνει επειδή τα ελεύθερα ηλεκτρόνια μπορούν να προσανατολίζονται και να κινούνται εύκολα, υπό την επίδραση ενός θερμικού ή ηλεκτρικού πεδίου. Στην ύπαρξη των ελεύθερων ηλεκτρονίων, αλλά και στη μη ύπαρξη προσανατολισμού, οφείλεται η τάση ενός ατόμου μέσα στο μεταλλικό δεσμό να ενώνεται με όσο το δυνατόν περισσότερα άτομα, έχοντας ως συνέπεια την πυκνή δόμηση της ύλης. Ως αποτέλεσμα των παραπάνω, οι περισσότερες μεταλλικές δομές χαρακτηρίζονται από μεγάλους αριθμούς γειτόνων και πυκνών ατομικών σχηματισμών. Με βάση τα όσα ειπώθηκαν, συμπεραίνουμε ότι το στερεό διατηρείται ενιαίο χάρη στις αλληλεπιδράσεις Coulomb μεταξύ των συνιστωσών του.

Μία άλλη θεωρία ερμηνείας των μεταλλικών δεσμών, η οποία όμως χρησιμοποιείται σαφώς λιγότερο σε σχέση με αυτή των ελεύθερων ηλεκτρονίων, είναι το *μοντέλο σκληρών σφαιρών*, σύμφωνα με το οποίο κάθε σφαίρα αναπαριστά έναν πυρήνα ιόντος.

Στην παρούσα Υποενότητα θα επικεντρωθούμε στις τρεις σχετικά απλές κρυσταλλικές δομές, οι οποίες χαρακτηρίζουν τη μεγάλη πλειοψηφία των κοινών μετάλλων. Ο παρακάτω Πίνακας 1.1. εμφανίζει βασικά χαρακτηριστικά διαφόρων κοινών μετάλλων, δηλαδή την κρυσταλλική τους δομή, την ατομική τους ακτίνα και την ακμή του κρυστάλλου.

Μέταλλο	Κρυσταλλική δομή	Ατομική ακτίνα (nm)	Ακμή κρυστάλλου (nm)
Al – Αργίλιο	fcc	0.1431	0.405
Cd – Κάδμιο	hcp	0.1490	-
Cr – Χρώμιο	bcc	0.1249	0.288
Co – Κοβάλτιο	hcp	0.1253	-
Cu – Χαλκός	fcc	0.1278	0.361
Au – Χρυσός	fcc	0.1442	0.408
α-Fe – Σίδηρος (α)	bcc	0.1241	0.286
Pd – Μόλυβδος	fcc	0.1750	0.494
Mo – Μολυβδαίνιο	bcc	0.1363	0.315
Ni – Νικέλιο	fcc	0.1246	0.352
Pt – Λευκόχρυσος	fcc	0.1387	0.392
Ag – Άργυρος	fcc	0.1445	0.409

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Ta – Ταντάλιο	bcc	0.1430	0.330
α-Ti – Τιτάνιο (α)	hcp	0.1445	-
W – Βολφράμιο	bcc	0.1371	0.317
Zn – Ψευδάργυρος	hcp	0.1332	-

Πίνακας 1.1. Βασικά χαρακτηριστικά 16 κοινών μετάλλων.

Όσον αφορά τον παραπάνω Πίνακα, οι συντομογραφίες *fcc*, *bcc* και *hcp*, οι οποίες αντιπροσωπεύουν τις διάφορες κρυσταλλικές δομές, αποδίδονται ως εξής:

- **fcc** → **Face Centered Cubic**, κυβικό εδροκεντρωμένο πλέγμα
- **bcc** → **Body Centered Cubic**, κυβικό χωροκεντρωμένο πλέγμα
- **hcp** → **Hexagonal Close Packed**, εξαγωνικό πλέγμα μέγιστης πυκνότητας

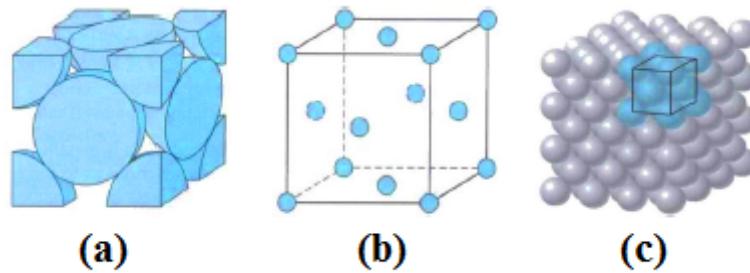
Παρακάτω αναφέρουμε ακόμα δύο σημαντικά χαρακτηριστικά των κρυσταλλικών δομών:

- **Αριθμός Συνδιάταξης** (Coordination Number): Ο αριθμός πλησιέστερων γειτονικών ατόμων για κάθε τυχόν άτομο που περιλαμβάνεται στη δομή. Για τα μέταλλα ο αριθμός συνδιάταξης είναι ο ίδιος από άτομο σε άτομο.
- **Παράγοντας Ατομικής Στοιβάξης** (Atomic Packing Factor, APF): Ο λόγος του όγκου μιας συμπαγούς σφαίρας σε μια κρυσταλλική κυψελίδα, με βάση το μοντέλο σκληρών σφαιρών που αναφέρθηκε παραπάνω. Συνεπώς, ο APF υπολογίζεται με τη βοήθεια της σχέσης (1.3). Τα μέταλλα έχουν συνήθως υψηλό APF, με σκοπό τη μεγιστοποίηση της προστασίας που παρέχει το νέφος των ελεύθερων ηλεκτρονίων.

$$APF = \frac{[\text{όγκος ατόμων κυττάρου}]}{[\text{ολικός όγκος κυττάρου}]} \quad (1.3)$$

1.2.2.1. Εδροκεντρωμένη κυβικά κρυσταλλική δομή (Face-Centered Cubic, fcc)

Η δομή *fcc*, η οποία εμφανίζεται σε πολλά μέταλλα, αποτελεί μια κυψελίδα κυβικής γεωμετρίας, όπου τα άτομα είναι τοποθετημένα σε κάθε μία από τις κορυφές αλλά και στα κέντρα όλων των εδρών του κύβου. Ο χαλκός (Cu), το αργίλιο (Al), ο χρυσός (Au) και ο άργυρος (Ag) χαρακτηρίζονται από αυτή τη δομή.



Σχήμα 1.3. Οπτικά μοντέλα για την κυβικά εδροκεντρωμένη (fcc) κρυσταλλική δομή:

(α) Μοντέλο σκληρών σφαιρών για μια κυψελίδα.

(β) Απλοποιημένο μοντέλο μοναδιαίου κρυστάλλου.

(γ) Συστοιχία πολλών ατόμων και τακτοποίησή τους πάνω στο κυβικό πλέγμα.

Στο Σχήμα 1.3[a] εμφανίζεται το μοντέλο σκληρών σφαιρών για μια εδροκεντρωμένη κυψελίδα. Σε αυτό το μοντέλο, προκειμένου να έχουμε μία καλή αντίληψη των θέσεων των ατόμων, κάθε άτομο απεικονίζεται με τη μορφή συμπαγούς σφαίρας. Στο απλοποιημένο μοντέλο μοναδιαίου κρυστάλλου (Σχήμα 1.3[b]), τα άτομα απεικονίζονται ως μικρές δισδιάστατες σφαίρες, τοποθετημένα στις κορυφές αλλά και στα κέντρα των εδρών του κύβου. Το Σχήμα 1.3[c] παριστάνει την τομή ενός κρυστάλλου που αποτελείται από πολλά fcc κύτταρα. Όπως φαίνεται από το Σχήμα, οι σφαίρες αυτές (ιονισμένοι πυρήνες) εφάπτονται μεταξύ τους στη διαγώνιο έδρα.

Έστω a η ακμή του κύβου και r η ατομική ακτίνα. Σε αυτή την περίπτωση, η εξίσωση που συνδέει τα a και r σε μία διάταξη fcc είναι η εξής:

$$a = 2r\sqrt{2} \quad (1.4)$$

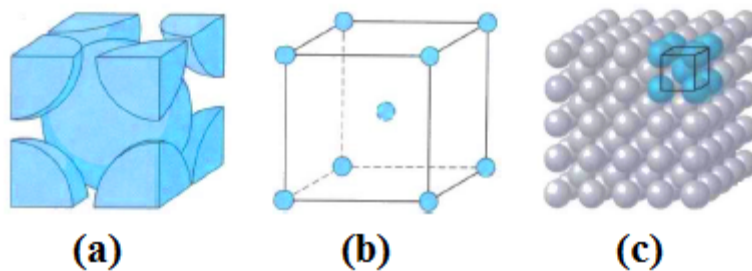
Στη δομή fcc, κάθε άτομο που βρίσκεται σε μία από τις κορυφές μοιράζεται μεταξύ οκτώ κυψελίδων, ενώ τα άτομα που βρίσκονται στα κέντρα των εδρών μοιράζονται μεταξύ δύο. Κατά συνέπεια, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 1.3[a], μια κυψελίδα προσδιορίζεται από 1/8 από κάθε ένα από τα 8 άτομα των κορυφών και 1/2 από κάθε ένα από τα 6 άτομα που βρίσκονται στα ισάριθμα κέντρα των εδρών, δηλαδή ο προσδιορισμός του κυττάρου γίνεται από 4 (τέσσερα) άτομα.

Το κύτταρο περιέχει τον όγκο του κύβου, ο οποίος δημιουργείται από τα κέντρα των ατόμων. Επειδή οι γωνιακές και οι πλευρικές θέσεις του κύβου είναι ισοδύναμες, η μεταφορά των γωνιών του κύβου στο κέντρο ενός ατόμου δεν αλλάζει τη δομή του κυττάρου. Ο αριθμός συνδιάταξης είναι ίσος με 12, επειδή, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 1.3[a], το άτομο που στην εικόνα βρίσκεται μπροστά, περιβάλλεται από τέσσερα γειτονικά, τέσσερα από την πίσω πλευρά (με τα οποία είναι σε επαφή) και τέσσερα ισοδύναμα άτομα του εμπρόσθιου κυττάρου, που όμως δεν εμφανίζεται στην εικόνα. Τέλος, ο παράγοντας ατομικής

στοίβαξης (APF) για τη δομή fcc είναι 0.74, που είναι και ο μέγιστος δυνατός για σφαίρες της ίδιας διαμέτρου, άρα και για μονοατομικούς κρυστάλλους.

1.2.2.2. Χωροκεντρωμένη κυβικά κρυσταλλική δομή (Body-Centered Cubic, bcc)

Η δομή bcc ανήκει και αυτή στις συνηθισμένες κρυσταλλικές δομές των κοινών μετάλλων. Η δομή του κυττάρου είναι και αυτή κυβική, όπως και στην περίπτωση της fcc. Όμως, σε αντίθεση με την προηγούμενη δομή, τα άτομα είναι τοποθετημένα στις οκτώ κορυφές του κύβου και στο κέντρο αυτού (όχι δηλαδή στα κέντρα των εδρών).



Σχήμα 1.4. Οπτικά μοντέλα για την κυβικά χωροκεντρωμένη (bcc) κρυσταλλική δομή:

(α) Μοντέλο σκληρών σφαιρών για ένα κύτταρο.

(β) Απλοποιημένο μοντέλο μοναδιαίου κρυστάλλου.

(γ) Συστοιχία πολλών ατόμων και τακτοποίησή τους πάνω στο κυβικό πλέγμα.

Κατά μήκος της διαγωνίου του κύβου, το κεντρικό και τα γωνιακά άτομα έρχονται σε επαφή μεταξύ τους. Κατά συνέπεια, η εξίσωση που συνδέει τα a (μήκος κυττάρου) και R (ατομική ακτίνα) είναι η ακόλουθη:

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} \quad (1.5)$$

Στη δομή bcc, κάθε κυψελίδα συνδέεται με:

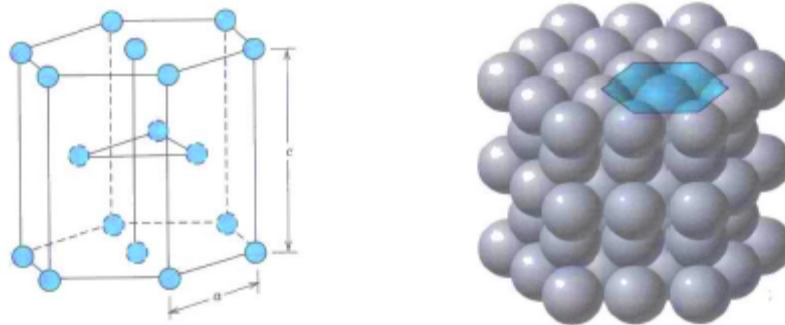
- το ισοδύναμο του ενός ατόμου από τις 8 κορυφές του κύβου, κάθε ένα από τα οποία μοιράζεται ανάμεσα σε οκτώ κύτταρα, και
- το μοναδικό άτομο που βρίσκεται στο κέντρο του κύβου.

Σύμφωνα με τα παραπάνω, κάθε κυψελίδα bcc προσδιορίζεται από δύο (2) άτομα, αντίθετα με τα τέσσερα (4) που χαρακτηρίζουν τη δομή fcc. Επίσης, κάθε κεντρικό άτομο έχει ως πλησιέστερους

γείτονές του τα 8 γειτονικά άτομα, άρα 8 είναι και ο αριθμός συνδιάταξης για τον κρύσταλλο bcc. Ο αριθμός αυτός είναι μικρότερος σε σχέση με τον fcc κρύσταλλο, άρα και ο παράγοντας ατομικής στοίβαξης (APF) θα είναι επίσης μικρότερος, και πιο συγκεκριμένα $APF = 0.68$ για το bcc κρύσταλλο. Χαρακτηριστικά μέταλλα που παρουσιάζουν κρυσταλλική δομή bcc είναι το χρώμιο (Cr), το βολφράμιο (W) και ο σίδηρος (Fe).

1.2.2.3. Κρυσταλλική δομή εξαγωνικού πλέγματος μέγιστης πυκνότητας (Hexagonal Close Packed, hcp)

Πρόκειται για μία δομή που δεν απαντάται τόσο συχνά στα μέταλλα όσο οι δομές bcc και fcc. Τη συναντάμε σε μέταλλα όπως ο ψευδάργυρος (Zn), το μαγνήσιο (Mg), το κάδμιο (Cd) και το τιτάνιο (Ti). Στο παρακάτω Σχήμα 1.5. εμφανίζονται χαρακτηριστικά δύο οπτικά μοντέλα για την υπόψη κρυσταλλική δομή:



Σχήμα 1.5. Οπτικά μοντέλα για την κρυσταλλική δομή εξαγωνικού πλέγματος μέγιστης πυκνότητας (hcp):

(a) Απλοποιημένο μοντέλο μοναδιαίου κρυστάλλου. Με a συμβολίζεται η μικρή διάσταση της κυψελίδας και με c η μεγάλη.

(b) Συστοιχία πολλών ατόμων και τακτοποίησή τους πάνω στο εξαγωνικό πλέγμα.

Όπως φαίνεται από το παραπάνω Σχήμα, η κορυφή και η βάση της κυψελίδας αποτελείται από έξι άτομα, τα οποία σχηματίζουν κανονικά εξάγωνα. Στο κέντρο καθενός από αυτά τα εξάγωνα είναι τοποθετημένο ένα άτομο. Επίσης, ανάμεσα στο επίπεδο της κορυφής και της βάσης υπάρχει ακόμα ένα επίπεδο, το οποίο περιλαμβάνει τρία άτομα. Σε αυτό το επίπεδο, τα τρία αυτά άτομα έχουν ως πλησιέστερους γείτονες τα παρακείμενα άτομα από τα επίπεδα βάσης και κορυφής. Η περιγραφή μιας μοναδιαίας κυψελίδας hcp γίνεται από έξι (6) άτομα:

- Το 1/6 από κάθε ένα από τα 12 άτομα στις γωνίες της κορυφής και της βάσης.

- Το 1/2 από κάθε ένα από τα δύο κεντρικά άτομα.
- Ολόκληρα τα τρία άτομα του ενδιάμεσου επιπέδου.

Έστω a η μικρή διάσταση της κανονικής εξαγωνικής κυψελίδας και c η μεγάλη. Από τη γεωμετρία της κυψελίδας συμπεραίνουμε ότι ο λόγος $\frac{c}{a}$ θα έπρεπε να είναι ίσος με 1.633 (ιδανική τιμή). Όμως, σε ορισμένα μέταλλα δομής hcp εμφανίζεται κάποια απόκλιση από αυτό το λόγο. Η δομή hcp και η δομή fcc παρουσιάζουν ίδιους αριθμούς συνδιάταξης (12) και ίδιους παράγοντες ατομικής στοιβαξης (APF = 0.74).

1.2.3. Μοντέλο Αερίου Ελεύθερων Ηλεκτρονίων

Το μοντέλο του Αερίου Ελεύθερων Ηλεκτρονίων (Free Electron Gas Model) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την κατανόηση πολλών φυσικών ποσοτήτων. Με βάση αυτή τη θεωρία, τα ασθενώς συνδεδεμένα ηλεκτρόνια μπορούν να κινούνται ελεύθερα διαμέσου του κρυσταλλικού πλέγματος. Σε αυτή την περίπτωση, τα ηλεκτρόνια σθένους μεταπίπτουν στη ζώνη αγωγιμότητας. Χρόνια πριν την ανακάλυψη της Κβαντομηχανικής, πολλές από τις ιδιότητες των μετάλλων, αλλά και άλλων υλικών, μπορούσαν να εξηγηθούν με τη βοήθεια του παραπάνω μοντέλου. Μέσω της κλασσικής θεωρίας ήταν εφικτή η απόδειξη της ισχύος του νόμου του Ohm, αλλά και η σύνδεση μεταξύ της ηλεκτρικής και της θερμικής αγωγιμότητας ενός υλικού, με βάση το νόμο Wiedemann-Franz. Παρ'όλα αυτά, η θεωρία αυτή δεν είναι ικανή να εξηγήσει ιδιότητες όπως η μαγνητική ευαισθησία των αγωγίων ηλεκτρονίων ή η θερμοχωρητικότητα.

1.2.3.1. Ενεργειακές στάθμες του Αερίου Ελεύθερων Ηλεκτρονίων

Για ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο τριών διαστάσεων, θα πρέπει να επιλυθεί, ως προς μία ροϊκή συνάρτηση Ψ , η παρακάτω εξίσωση Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi_{\vec{r}}(\vec{r}) = E_{\vec{r}} \Psi_{\vec{r}}(\vec{r}) \quad (1.6)$$

όπου m η μάζα του ηλεκτρονίου, \hbar η σταθερά του Planck, $E_{\vec{r}}$ η ενέργεια που αντιστοιχεί σε ένα κυματόνισμα \vec{k} , και \vec{r} το διάνυσμα θέσης. Οριοθετώντας την παραπάνω εξίσωση σε ένα κυλινδρικό κυτίο μήκους L και θεωρώντας ως αφετηρία το ένα άκρο του, η επίλυση της εξίσωσης θα έχει σαν αποτέλεσμα την ακόλουθη γενική λύση, η οποία αντιπροσωπεύει μία σειρά από στάσιμα κύματα:

$$\Psi_n(x, y, z) = A \sin\left(\frac{\pi n_x}{L} x\right) \sin\left(\frac{\pi n_y}{L} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_z}{L} z\right) \quad (1.7)$$

Όπου n_x, n_y, n_z θετικές σταθερές. Είναι βολικό να θεωρήσουμε ότι η ροϊκή συνάρτηση Ψ παρουσιάζει περιοδικότητα L κατά μήκος της διάστασης x (μήκος του κυτίου), δηλαδή: $\Psi(x+L, y, z) = \Psi(x, y, z)$, αλλά και των διαστάσεων y και z . Οι κυματικές συναρτήσεις που χαρακτηρίζονται από την περιοδικότητα που αναφέραμε παραπάνω, αλλά επίσης αποτελούν και λύσεις της εξίσωσης (1.6) ονομάζονται *επίπεδα κύματα* και αναπαριστώνται με τη βοήθεια της παρακάτω ροϊκής συνάρτησης:

$$\Psi_k(r) = e^{i(k \cdot r)} \quad (1.8)$$

Οι συνιστώσες, στους άξονες x, y, z του κυματανύσματος \vec{k} θα πρέπει να ικανοποιούν την παρακάτω συνθήκη:

$$k_{x,y,z} = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots \quad (1.9)$$

Αυτό δηλαδή σημαίνει ότι κάθε συνιστώσα του κυματανύσματος \vec{k} φέρει τη μορφή $\frac{2\pi n}{L}$, όπου n θετικός ακέραιος. Για την εύρεση της ενέργειας που αντιστοιχεί στο κυμαάνυσμα k , αλλά και στον προσανατολισμό spin m_s , θα χρησιμοποιήσουμε την παρακάτω εξίσωση (1.10), η οποία προκύπτει από συνδυασμό των εξισώσεων (1.6) και (1.8):

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (1.10)$$

Ο κυματάρηθος $k = |\vec{k}|$ και το μήκος κύματος λ συνδέονται μέσω της σχέσης:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.11)$$

Λαμβάνοντας τη θεμελιώδη κατάσταση των N ελεύθερων ηλεκτρονίων, τα τροχιακά μπορούν να εκληφθούν ως σημεία μέσα σε μία σφαίρα, στο χώρο \vec{k} . Η ενέργεια στην επιφάνεια της σφαίρας, με ακτίνα έστω k_F , ονομάζεται *ενέργεια Fermi* και ορίζεται ως εξής:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \quad (1.12)$$

Μέσα στη σφαίρα Fermi, η οποία έχει οριστεί παραπάνω, ο αριθμός των ενεργειακών σταθμών N ευρίσκεται μέσω της ακόλουθης σχέσης, η οποία εισάγει και τον όγκο της σφαίρας Fermi, V :

$$N = 2 \cdot \frac{4\pi k_F^3 / 3}{(2\pi/L)^3} = \frac{V}{2\pi^2} k_F^3 \quad (1.13)$$

Στην αρχή του δεύτερου μέλους της (1.13), ο παράγοντας 2 προκύπτει από τις δύο πιθανές τιμές του κβαντικού αριθμού ιδιοπεριστροφής (spin), m_s , για κάθε τιμή του κυματανύσματος k . Κατά συνέπεια, η ακτίνα Fermi αποτελεί συνάρτηση μόνο της πυκνότητας ηλεκτρονίων, δηλαδή τον αριθμό ενεργειακών σταθμών ανά μονάδα όγκου:

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \quad (1.14)$$

Μαζί με την εξίσωση (1.12), η ενέργεια Fermi μπορεί να εκφραστεί ως συνάρτηση της ηλεκτρονιακής πυκνότητας, N/V , αλλά και της μάζας m του ηλεκτρονίου:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} \quad (1.15)$$

Η πυκνότητα καταστάσεων, $D(E)$, ορίζεται ως η πρώτη παράγωγος του αριθμού των ενεργειακών σταθμών ως προς την ενέργεια E :

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad (1.16)$$

1.2.3.2. Θερμοχωρητικότητα του Αερίου Ελεύθερων Ηλεκτρονίων

Σύμφωνα με την κλασική θεωρία, η συνεισφορά του αερίου ελεύθερων ηλεκτρονίων στη θερμοχωρητικότητα ισούται με $\frac{3}{2} Nk_B$ (όπου k_B η σταθερά του Boltzmann), όπως συμβαίνει με ένα μονοατομικό ιδανικό αέριο. Μετρήσεις δείχνουν ότι, σε θερμοκρασία δωματίου, η πραγματική συνεισφορά των ηλεκτρονίων είναι λιγότερο από 1% της αναμενόμενης τιμής. Η ορθή εξίσωση διατυπώθηκε εντέλει από το Fermi [43], με τον ίδιο να αναφέρει ενδεικτικά ότι μπορούν να διαπιστωθούν τα εξής:

- Η ειδική θερμότητα εξαφανίζεται στη θερμοκρασία του απόλυτου μηδέν (0 K).
- Σε χαμηλές θερμοκρασίες, η ειδική θερμότητα είναι ανάλογη με την απόλυτη θερμοκρασία T (σε βαθμούς Kelvin).

Κατά τη θέρμανση ενός δείγματος από τη θερμοκρασία του απολύτου μηδενός, δεν κερδίζουν όλα τα ηλεκτρόνια την ίδια ποσότητα ενέργειας, τάξης μεγέθους $k_B T$. Πιο συγκεκριμένα, μόνο τα ηλεκτρόνια που βρίσκονται μέσα σε μία μικρή περιοχή, $k_B T$, γύρω από την ενέργεια Fermi, ενεργοποιούνται θερμικά. Σε ένα σύστημα που περιλαμβάνει N ηλεκτρόνια, μόνο ένα μικρό μέρος αυτών, τάξης μεγέθους T/T_F (όπου T_F η θερμοκρασία Fermi), ενεργοποιούνται θερμικά. Μόνο τα ηλεκτρόνια που παραμένουν μέσα σε ένα μικρό τμήμα γύρω από την ενέργεια Fermi κερδίζουν θερμική ενέργεια μέτρου $k_B T$. Κάθε ένα από αυτά τα $N \cdot T/T_F$ ηλεκτρόνια χαρακτηρίζεται από θερμική ενέργεια $k_B T$. Η συνολική εσωτερική ενέργεια του αερίου ελεύθερων ηλεκτρονίων δίνεται προσεγγιστικά από την ακόλουθη σχέση:

$$U \approx \frac{NT}{T_F} k_B T \quad (1.17)$$

Λόγω των ηλεκτρονίων, προστίθεται μόνο ένα μικρό τμήμα στην ειδική θερμότητα, ανάλογο του T :

$$C_{\eta\lambda} = \frac{dU}{dT} \approx \frac{Nk_B T}{T_F} \quad (1.18)$$

με την παραπάνω σχέση να δίνει αποτελέσματα πολύ κοντά στα πειραματικά. Η ειδική θερμότητα των ηλεκτρονίων μπορεί να δοθεί εναλλακτικά από την ακόλουθη εξίσωση [43], η οποία δίνει ακριβέστερα αποτελέσματα από την (1.18):

$$C_{\eta\lambda} = \frac{1}{3} \pi^2 D(E_F) k_B^2 T = \frac{1}{2} \pi^2 N \frac{k_B T}{T_F} \quad (1.19)$$

Αυτή η εξάρτηση του $C_{\eta\lambda}$ από τη θερμοκρασία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την απλοποίηση των εξισώσεων του *Μοντέλου Δύο Θερμοκρασιών* (Two-Temperature Model / TTM) που θα περιγραφεί σε επόμενο Κεφάλαιο.

1.2.3.3. Θερμική αγωγιμότητα των μετάλλων

Έστω C η ειδική θερμότητα ανά μονάδα όγκου, l η μέση ελεύθερη διαδρομή και v η ταχύτητα με την οποία κινείται ένα σωματίδιο. Σε αυτή την περίπτωση, η θερμική αγωγιμότητα k του σωματιδίου ισούται με:

$$k = \frac{C \cdot v \cdot L}{3} \quad (1.20)$$

Λαμβάνοντας υπόψη και την εξίσωση (1.19), η θερμική αγωγιμότητα του αερίου Fermi δίνεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$k_{\eta\lambda} = \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{nk_B^2 T}{m\nu_F^2} \cdot \nu_F \cdot l = \frac{\pi^2 nk_B^2 T \cdot \tau}{3m} \quad (1.21)$$

Όπου n η πυκνότητα ηλεκτρονίων, τ ο χρόνος χαλάρωσης των ηλεκτρονίων και $l = \nu_F \cdot \tau$. Για καθαρά μέταλλα, το μεγαλύτερο μέρος της ροής θερμότητας προέρχεται από τα ηλεκτρόνια και όχι από τα φωνόνια. Αντίθετα, σε μέταλλα με προσμίξεις ή κράματα, η συνεισφορά των φωνονίων στη ροή θερμότητας μπορεί να γίνει συγκρίσιμη με αυτή των ηλεκτρονίων.

1.3. Ανάλυση και μαθηματική μοντελοποίηση της ακτινοβολίας Laser

Η αφετηρία από την οποία θα ξεκινήσουμε την ανάλυση της ακτινοβολίας Laser είναι οι εξισώσεις του *Maxwell*, οι οποίες χρησιμοποιούνται στην προσπάθεια ενοποίησης των εξισώσεων ηλεκτρισμού και μαγνητισμού. Ο Σκωτσέζος Μαθηματικός και Φυσικός *James Clerk Maxwell* εισήγαγε, στις εξισώσεις που περιγράφουν το ηλεκτρικό πεδίο E και το μαγνητικό πεδίο H , έναν επιπλέον όρο. Η φυσική σημασία του όρου αυτού είναι η εξής: ένα μέρος του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου θα πρέπει να παρουσιάζει ρυθμό απόσβεσης μικρότερο από το τετράγωνο της απόστασης. Το σύνολο των φαινομένων που σχετίζονται με αυτό τον εισαχθέντα όρο καλείται *ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία*. Σημειώνουμε εδώ ότι, με βάση τη θεωρία Μεταφοράς Θερμότητας, η ακτινοβολία είναι ένας τρόπος μετάδοσης ενέργειας που δεν απαιτεί την ύπαρξη κάποιου συνεχούς μέσου, κάτι που σημαίνει δηλαδή ότι η ακτινοβολία μπορεί να διαδοθεί και στο κενό.

Η παρακάτω σχέση (1.22) περιγράφει το ηλεκτρικό πεδίο E . Ο τρίτος όρος από αυτούς που βρίσκονται εντός της αγκύλης είναι ένας εμπειρικός όρος που πρότεινε ο Feynman το 1964, για τη διατύπωση του νόμου της ακτινοβολίας:

$$E = -\frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{e_r}{r^2} + \frac{r}{c} \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{e_r}{r^2} \right) + \frac{1}{c^2} \frac{d^2}{dt^2} e_r \right] \quad (1.22)$$

Στη σχέση αυτή, q είναι το φορτίο του σωματιδίου που βρίσκεται σε απόσταση r από το ηλεκτρόνιο φορτίου e_r , c είναι η ταχύτητα του φωτός στο κενό και ϵ_0 η διηλεκτρική σταθερά στο κενό. Ο τρόπος με τον οποίο διαδίδεται η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία μπορεί να προσδιοριστεί επιλύοντας τις εξισώσεις του Maxwell.

Ένα ηλεκτρομαγνητικό πεδίο χαρακτηρίζεται από δύο επιμέρους *διανυσματικά* πεδία, εξαρτώμενα από το διάνυσμα θέσης \vec{r} και το χρόνο t :

- **Ηλεκτρικό πεδίο:** $\vec{E} = \vec{E}(\vec{r}, t)$

- **Μαγνητικό πεδίο:** $\vec{H} = \vec{H}(r, t)$

Χαρακτηριστικά μεγέθη σε ένα ηλεκτρομαγνητικό πεδίο είναι το *φορτίο* και η *ένταση* του ρεύματος. Τα μεγέθη αυτή χαρακτηρίζονται από άλλα δύο πεδία:

- **Πυκνότητα φορτίου:** Βαθμωτό μέγεθος, $\rho = \rho(r, t)$
- **Πυκνότητα ρεύματος:** Διανυσματικό μέγεθος, $\vec{j} = \vec{j}(r, t)$

Συσχετίζοντας τη ροή του διανυσματικού πεδίου με την απόκλιση του, για τα δύο διανυσματικά πεδία που περιγράφουν ηλεκτρομαγνητικά φαινόμενα (ηλεκτρικό και μαγνητικό), προκύπτουν οι εξισώσεις του Maxwell. Χρησιμοποιώντας τις Gaussian μονάδες $\nabla \cdot A \hat{=} \text{grad}A$ και $\nabla \times A \hat{=} \text{div}A$ για το τυχόν μέγεθος A , μπορούμε να εκφράσουμε τις εξισώσεις Maxwell, συναρτήσει των E, H, ρ και j , ως εξής:

$$\left. \begin{aligned} \text{(M1): } \nabla \cdot E &= 4\pi\rho \\ \text{(M2): } \nabla \times E &= -\frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial t} \\ \text{(M3): } \nabla \cdot H &= 0 \\ \text{(M4): } \nabla \times H &= \frac{1}{c} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi j}{c} \end{aligned} \right\} \quad (1.23)$$

Στην περίπτωση κατά την οποία το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο βρίσκεται υπό την παρουσία ενός μέσου με διηλεκτρικές και μαγνητικές ιδιότητες, θα εισαγάγουμε ακόμα δύο διανυσματικά πεδία, τα οποία περιγράφουν αντίστοιχα την ηλεκτρική και τη μαγνητική ροπή ανά μονάδα όγκου:

- Ηλεκτρική ροπή ανά μονάδα όγκου: $\vec{P} = \vec{P}(r, t)$
- Μαγνητική ροπή ανά μονάδα όγκου: $\vec{M} = \vec{M}(r, t)$

Εναλλακτικά, μπορούμε να εισαγάγουμε ακόμα δύο διανυσματικά πεδία:

- Ηλεκτρική μετατόπιση: $\vec{D} = \vec{D}(r, t)$
- Μαγνητική επαγωγή: $\vec{B} = \vec{B}(r, t)$

Για τα παραπάνω μεγέθη ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις συσχετισμού:

$$\left. \begin{aligned} D &= E + 4\pi P \\ B &= H + 4\pi M \end{aligned} \right\} \quad (1.24)$$

Τα διάφορα πεδία για τα οποία έγινε λόγος παραπάνω μπορούν επίσης να συσχετιστούν με τη βοήθεια των ακόλουθων καταστατικών εξισώσεων:

$$\left. \begin{aligned} (K1): D &= \epsilon E \\ (K2): B &= \mu H \\ (K3): j &= \sigma E \end{aligned} \right\} \quad (1.25)$$

Όπου: ϵ η διηλεκτρική σταθερά, μ η μαγνητική διαπερατότητα και σ η ηλεκτρική αγωγιμότητα. Μάλιστα, σημειώνουμε εδώ ότι η καταστατική εξίσωση (K3) αντιστοιχεί στο νόμο του Ohm. Στην περίπτωση που τα συσχετιζόμενα διανυσματικά πεδία δεν είναι μεταξύ τους παράλληλα, οι βαθμωτές σταθερές λαμβάνουν τη μορφή ταυνοστών δεύτερης τάξης. Από τις καταστατικές εξισώσεις (1.25) και τις μαθηματικές διατυπώσεις (1.24) για την ηλεκτρική μετατόπιση και τη μαγνητική επαγωγή, μπορούμε να εξαγάγουμε συμπεράσματα για τη φυσική σημασία της διηλεκτρικής σταθεράς και της μαγνητικής διαπερατότητας. Η διηλεκτρική σταθερά αποτελεί ουσιαστικά το λόγο του συνολικού πεδίου προς το ηλεκτρικό πεδίο, καθώς τα ηλεκτρόνια που ταλαντώνονται παράγουν μακροσκοπικά πόλωση στο υλικό, η οποία προστίθεται στην πόλωση του ηλεκτρικού πεδίου. Κατά παρόμοιο τρόπο μπορεί να οριστεί και η μαγνητική διαπερατότητα. Τα μεγέθη ϵ , μ και σ εισάγονται στις εξισώσεις του Maxwell όταν υπάρχει παρουσία μέσου, με αποτέλεσμα οι εξισώσεις αυτές να διαμορφωθούν ως εξής:

$$\nabla \cdot D = 4\pi\rho \quad \text{ή} \quad \nabla \cdot E = \frac{4\pi\rho}{\epsilon} \quad (1.26)$$

$$\nabla \times E = -\frac{1}{c} \frac{\partial B}{\partial t} \quad \text{ή} \quad \nabla \times E = -\frac{\mu}{c} \frac{\partial H}{\partial t} \quad (1.27)$$

$$\nabla \cdot B = 0 \quad \text{ή} \quad \mu \nabla \cdot H = 0 \quad (1.28)$$

$$\nabla \times H = \frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t} + \frac{4\pi j}{c} \quad \text{ή} \quad \nabla \times H = \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi\sigma}{c} E \quad (1.29)$$

Στην περίπτωση που η πυκνότητα φορτίου και η πυκνότητα ρεύματος είναι μηδενικές ($\rho = j = 0$), η κυματική εξίσωση του μαγνητικού πεδίου μπορεί να προκύψει λαμβάνοντας υπόψη το *στροβιλισμό* του μαγνητικού πεδίου, $\text{rot}H$ ή $\nabla \times \nabla \times H$, όπως προκύπτει με τη βοήθεια της σχέσης (1.29), και αντικαθιστώντας την τελικώς προκύπτουσα σχέση στην (1.27):

$$\nabla \times \nabla \times H = \frac{\epsilon}{c} \nabla \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times E \quad (1.30)$$

Επειδή όμως

$$\nabla \times \nabla \times H = \nabla(\nabla \cdot H) - \Delta H \quad \text{και} \quad \Delta H = 0 \quad (1.31)$$

τότε η εξίσωση του ηλεκτρικού πεδίου γράφεται ως εξής:

$$\Delta H = \frac{\mu\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 H}{\partial t^2} \quad (1.32)$$

Αντίστοιχα, η εξίσωση του ηλεκτρικού πεδίου γράφεται ως εξής:

$$\Delta E = \frac{\mu\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} \quad (1.33)$$

Σε περίπτωση που η πυκνότητα ρεύματος είναι μη μηδενική, οι εξισώσεις (1.32) και (1.33) διαμορφώνονται ως εξής:

$$\left. \begin{aligned} (\Sigma 1): \Delta H &= \frac{\mu\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 H}{\partial t^2} + \frac{4\pi\mu\sigma}{c^2} \frac{\partial H}{\partial t} \\ (\Sigma 2): \Delta E &= \frac{\mu\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \frac{4\pi\mu\sigma}{c^2} \frac{\partial E}{\partial t} \end{aligned} \right\} \quad (1.34)$$

Στη γενική περίπτωση κατά την οποία τόσο η πυκνότητα ρεύματος j όσο και η πυκνότητα φορτίου ρ είναι μη μηδενικές, η σχέση (Σ1) παραμένει ως έχει, αλλά στο δεύτερο μέλος της σχέσης (Σ2) θα πρέπει να προστεθεί ο όρος $\frac{4\pi}{\epsilon} \nabla \rho$, με αποτέλεσμα να προκύψει η σχέση (1.35) για το ηλεκτρικό πεδίο:

$$\Delta E = \frac{\mu\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \frac{4\pi\mu\sigma}{c^2} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi}{\epsilon} \nabla \rho \quad (1.35)$$

Από τα παραπάνω, συμπεραίνουμε τελικά ότι η ταχύτητα διάδοσης του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου, έστω v , είναι η ίδια και δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$v = \frac{c}{\sqrt{\mu\epsilon}} \quad (1.36)$$

Όπως γνωρίζουμε από την ηλεκτρομαγνητική θεωρία, σε κάποια υλικά η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία διαδίδεται με περιοδικό (ταλαντωτικό) χαρακτήρα, ενώ σε ορισμένα άλλα μειώνεται εκθετικά με την απόσταση. Με χρήση της εξίσωσης που περιγράφει την ταχύτητα μετάδοσης του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου, θα αποδείξουμε την παραπάνω πρόταση.

Υποθέτουμε ότι η λύση των εξισώσεων για τα δύο πεδία (ηλεκτρικό και μαγνητικό) έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\left. \begin{aligned} (\text{Η.Π.}): E &= E_0 \exp[i(\omega t - kr)] \\ (\text{Μ.Π.}): H &= H_0 \exp[i(\omega t - kr)] \end{aligned} \right\} \quad (1.37)$$

Με αντικατάσταση στις εξισώσεις (1.35) και (1.36) έχουμε:

$$-k \cdot k = \frac{4\pi\mu\sigma}{c^2} i\omega + \frac{\mu\epsilon}{c^2} \omega^2 \Rightarrow k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \cdot \left[\mu\epsilon \cdot \left(1 - i \frac{4\pi\sigma}{\omega\epsilon} \right) \right] \quad (1.38)$$

Η ποσότητα μέσα στην αγκύλη συνήθως ονομάζεται *μιγαδική διηλεκτρική σταθερά*, $\epsilon^i(\omega) = \mu\epsilon \cdot \left(1 - i \frac{4\pi\sigma}{\omega\epsilon} \right)$. Με απλή αντικατάσταση προκύπτει ότι για τα μέταλλα και γενικώς τα αγώγιμα

υλικά, στα οποία η ηλεκτρική αγωγιμότητα σ είναι μη μηδενική, ο κυματάριθμος k είναι μιγαδικός ($k = k_1 + ik_2$), με αποτέλεσμα το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο να λαμβάνουν τη μορφή:

$$\left. \begin{aligned} \text{(Η.Π.): } E &= E_0 \cdot e^{k_2 r} \cdot \exp[i(\omega t - k_1 r)] \\ \text{(Μ.Π.): } H &= H_0 \cdot e^{k_2 r} \cdot \exp[i(\omega t - k_1 r)] \end{aligned} \right\} \quad (1.39)$$

Η (1.39) δείχνει ότι στα παραπάνω υλικά τα πεδία εξασθενούν εκθετικά με την αύξηση της απόστασης.

Είναι πάντως σημαντικό να έχουμε μία εικόνα για τις τιμές που λαμβάνει η ηλεκτρική αγωγιμότητα στα διάφορα υλικά. Εστιάζοντας στα μέταλλα, δεν μπορούμε να είμαστε απόλυτα ακριβείς με την υπόθεση $\sigma \neq 0$, επειδή όλα τα μη πραγματικά υλικά έχουν μη μηδενική ηλεκτρική αγωγιμότητα. Με τη βοήθεια της θεωρίας μετάλλων του *Drude*, θα προσπαθήσουμε να εξαγάγουμε μία γενική σχέση για την ηλεκτρική αγωγιμότητα, μέσω της οποίας θα μπορούμε να κάνουμε υπολογισμούς αυτής για κάθε υλικό που μας ενδιαφέρει. Αρχικά υπολογίζουμε την ορμή ενός ηλεκτρονίου που προκαλείται από ένα χρονικά μεταβαλλόμενο ηλεκτρικό πεδίο, $p = p(t)$. Μας ενδιαφέρει το πώς θα μεταβληθεί η τιμή της ορμής όταν έχει παρέλθει ένα πεπερασμένο διάστημα dt , άρα δηλαδή θα ασχοληθούμε με το μέγεθος $p(t + dt)$.

Η δύναμη που ασκείται από ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα σε ένα ηλεκτρόνιο δίνεται από τη σχέση:

$$F = -e \left(E + \frac{V}{c} \times B \right) \quad (1.40)$$

Στην παρούσα περίπτωση, η συνεισφορά του μαγνητικού πεδίου είναι σαφώς χαμηλότερη αυτής του ηλεκτρικού και, επομένως, μπορεί να αμεληθεί. Η κατανόηση της ηλεκτρικής αγωγιμότητας μπορεί να γίνει ευκολότερη εάν συσχετίσουμε την ορμή $p(t)$ ενός ηλεκτρονίου με το ηλεκτρικό πεδίο $E(t)$ και την πυκνότητα ρεύματος $j(t)$. Αν τ ο χρόνος χαλάρωσης, τότε τη χρονική στιγμή $\tau + dt$ η πιθανότητα σύγκρουσης ενός ηλεκτρονίου είναι $\left(1 - \frac{dt}{\tau}\right)$ με ένα ιόν και $\frac{dt}{\tau}$ με ένα άλλο ηλεκτρόνιο. Εάν αγνοήσουμε τη συνεισφορά των $t + dt$ ηλεκτρονίων (τα οποία πράγματι συγκρούονται μεταξύ των χρονικών στιγμών t και $t + dt$), στην ορμή $p(t + dt)$, ως όρους της τάξης $(dt)^2$ άρα πάρα πολύ μικρούς, και λάβουμε επίσης υπόψη ότι $F = -e \cdot E$, η εξίσωση ορμής του ηλεκτρονίου διατυπώνεται ως εξής:

$$\begin{aligned} p(t + dt) &= \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) \left[p(t) + f(t)dt + O(dt)^2 \right] \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{dp(t)}{dt} &= -\frac{p(t)}{\tau} - eE(t) \end{aligned} \quad (1.41)$$

Εάν υποθέσουμε ότι $p(t) = p(\omega)e^{i(\omega t)}$ και $E(t) = E(\omega)e^{i(\omega t)}$, θα προκύψουν τα εξής:

$$-i\omega \cdot p(\omega) = \frac{p(\omega)}{\tau} - eE(\omega) \Rightarrow p(\omega) = \frac{\tau_c E(\omega)}{1 - i\omega\tau} \quad (1.42)$$

Η εξίσωση (1.42) συσχετίζει την ορμή με το ηλεκτρικό πεδίο. Αφού το κάθε ηλεκτρόνιο μεταφέρει φορτίο, έστω $-e$ (όπου το αρνητικό πρόσημο δηλώνει το αρνητικό φορτίο του ηλεκτρονίου), το φορτίο που διατρέχει μια διατομή A σε χρόνο dt θα ισούται με $-ne \cdot v \cdot A dt$, ενώ η πυκνότητα ρεύματος θα ισούται με:

$$j(t) = -ne \cdot v(t) = -ne \frac{p(t)}{m} \quad (1.43)$$

Στην παραπάνω σχέση n είναι ο αριθμός των ηλεκτρονίων ανά μονάδα όγκου, v η ταχύτητα με την οποία κινούνται και m η μάζα του καθενός. Συνδυάζοντας τις σχέσεις (1.42) και (1.43), θα προκύψει η ακόλουθη σχέση:

$$j(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m(1-i\omega\tau)} E(\omega) = \sigma(\omega) E(\omega) \quad (1.44)$$

Για υψηλές τιμές της συχνότητας ω , τέτοιες ώστε $\omega\tau \gg 1$, μπορούμε να εξαγάγουμε πολύ χρήσιμα συμπεράσματα. Αρκεί, στη σχέση της μιγαδικής ηλεκτρικής σταθεράς, $\epsilon^i(\omega) = \epsilon \cdot \left(1 - i \frac{4\pi\sigma}{\omega\epsilon}\right)$, να

εισαγάγουμε την ηλεκτρική αγωγιμότητα $\sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m(1-i\omega\tau)}$, οπότε προκύπτουν τα εξής:

$$\left. \begin{aligned} \sigma(\omega) &= -\frac{ne^2}{m\omega} i \\ \epsilon^i(\omega) &= \left(1 - \frac{4\pi ne^2}{m\epsilon} \frac{1}{\omega^2}\right) = \epsilon \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \end{aligned} \right\} \quad (1.45)$$

Στις παραπάνω σχέσεις (1.45), η ποσότητα ω_p είναι γνωστή με τον όρο *συχνότητα πλάσματος*.

- **Αν $\omega < \omega_p$** , η διηλεκτρική σταθερά είναι πραγματικός αρνητικός αριθμός, με αποτέλεσμα η λύση του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου να είναι ποσότητες που ελαττώνονται εκθετικά στο χώρο. Τα υλικά που παρουσιάζουν αυτές τις ιδιότητες ονομάζονται *απορροφητικά*.
- **Αν $\omega > \omega_p$** , η λύση για τα δύο πεδία έχει περιοδική μορφή, με αποτέλεσμα η κατάσταση της ύλης που έχουμε (*πλάσμα ή μεταλλικός ατμός*) να είναι διαφανής από την προσπίπτουσα συχνότητα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.

1.4. Η επίδραση της ακτινοβολίας Laser σε μεταλλικά υλικά

1.4.1. Γενικές αρχές αλληλεπίδρασης ακτινοβολίας Laser – ύλης

Η ισχύς μιας προσπίπτουσας ακτινοβολίας διαχωρίζεται σε τρία μέρη: την *ανακλώμενη*, την *απορροφώμενη* και τη *διερχόμενη*. Στην περίπτωση των μεταλλικών υλικών δεν υπάρχει διερχόμενη ισχύς (είναι δηλαδή μηδενική), επειδή τα υλικά αυτά είναι αδιαφανή. Στην περίπτωση κάθε ηλεκτρομαγνητικού κύματος, άρα και της *ακτινοβολίας Laser*, η ηλεκτρική αγωγιμότητα επηρεάζεται από τη συχνότητα του κύματος που επιδρά σε αυτό. Για αυτό το λόγο, η απορροφητικότητα ενός υλικού επηρεάζεται από τη συχνότητα της ακτινοβολίας Laser, άρα και από το μήκος κύματος εκπομπής. Όταν ένα οποιοδήποτε ηλεκτρομαγνητικό κύμα (άρα και η ακτινοβολία Laser) επιδράσει στα άτομα της επιφάνειας ενός μεταλλικού υλικού, το ηλεκτρικό πεδίο προκαλεί την έντονη κίνηση των ηλεκτρονίων. Από το ρεύμα που δημιουργείται, και λαμβάνοντας υπόψη την πεπερασμένη ηλεκτρική αγωγιμότητα που παρουσιάζει το υλικό, λαμβάνει χώρα το φαινόμενο *Joule*, το οποίο προκαλεί αύξηση στη θερμοκρασία των επιφανειακών στιβάδων του υλικού.

Κάτω από την επίδραση της ακτινοβολίας Laser, η θερμοκρασία του υλικού αυξάνεται συνεχώς. Από κάποια ελάχιστη τιμή έντασης της ακτινοβολίας και μετά, αρχίζει η τήξη του υλικού. Η τήξη μειώνει την αγωγιμότητα και αυξάνει την απορροφητικότητα του υλικού. Εάν, λόγω εντονότερης ακτινοβολίας, η θερμοκρασία αυξηθεί ακόμα περισσότερο, τότε θα παρατηρηθεί *εξάτμιση και απομάκρυνση υλικού*, που άλλωστε είναι και ο σκοπός της παρούσας εργασίας, θέλοντας να εκτελέσουμε κατεργασία αποβολής υλικού με χρήση Laser.

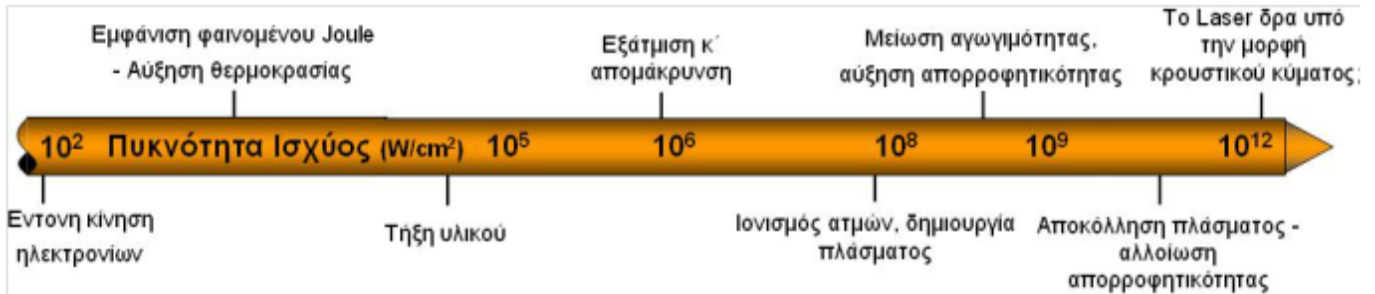
Όταν η τιμή της έντασης ακτινοβολίας είναι ιδιαίτερα υψηλή, τα ελεύθερα ηλεκτρόνια αναπτύσσουν μεγάλες ταχύτητες, με αποτέλεσμα τον ιονισμό των ατμών που προέρχονται από το υλικό που εξατμίζεται. Αποτέλεσμα αυτού του φαινομένου είναι ο *σχηματισμός πλάσματος*, το οποίο παρεμβαίνει σε σημαντικό βαθμό ανάμεσα στη δέσμη και στην υπό κατεργασία επιφάνεια. Η απορρόφηση ενέργειας αυξάνεται σημαντικά λόγω του πλάσματος, το οποίο ταυτόχρονα ασκεί πίεση στο τηγμένο υλικό, με αποτέλεσμα την αλλοίωση της μορφής της επιφάνειας.

Το πλάσμα που δημιουργείται μπορεί να γίνει ακόμα πυκνότερο αν αυξηθεί περαιτέρω η τιμή της έντασης της ακτινοβολίας. Σε αυτή την περίπτωση, το πλάσμα συνήθως αποκολλάται από την επιφάνεια του υλικού. Όταν το πλάσμα αποκολληθεί, καθίσταται και πάλι αραιότερο, με αποτέλεσμα να είναι διαπερατό στην προσπίπτουσα ακτινοβολία. Κατά συνέπεια, η ενέργεια που μεταφέρεται στο υλικό ελαττώνεται και η απορρόφηση αλλοιώνεται.

Για πολύ υψηλές τιμές της έντασης, η οπτική ενέργεια της ακτινοβολίας Laser δρα ως *κρουστικό κύμα*, του οποίου η ταχύτητα διάδοσης είναι μεγαλύτερη της ταχύτητας του ήχου. Το κρουστικό αυτό κύμα συναντά την επιφάνεια του προς κατεργασία υλικού. Ανάλογα με την τιμή της πυκνότητας ισχύος της ακτινοβολίας, δηλαδή της ισχύος (σε Watt) ανά μονάδα επιφάνειας (cm^2), η ακτινοβολία Laser προκαλεί

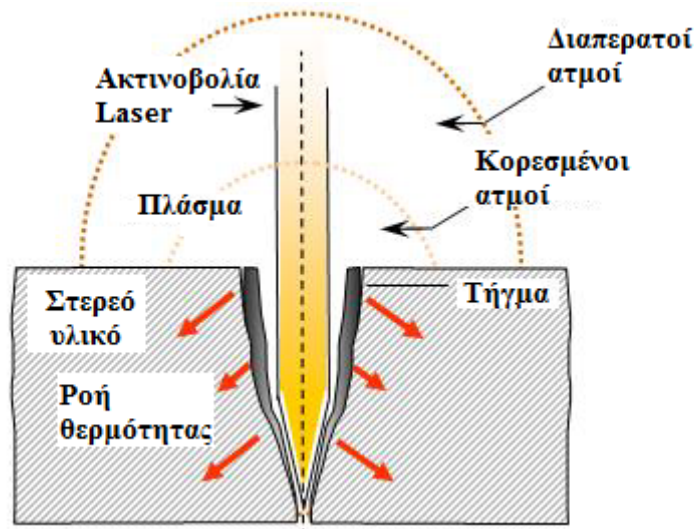
ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

διαφορετική επίδραση σε ένα υλικό. Το παρακάτω Σχήμα 1.6. παρουσιάζει συνοπτικά όλες τις πιθανές επιδράσεις της ακτινοβολίας Laser:



Σχήμα 1.6.: Η επίδραση της ακτινοβολίας Laser σε ένα υλικό, για ένα εύρος διαφορετικών τιμών εφαρμοζόμενης πυκνότητας ισχύος.

Με βάση τα όσα ειπώθηκαν για την επίδραση της ακτινοβολίας Laser στα διάφορα υλικά και κυρίως στα μεταλλικά, αξίζει να παραθέσουμε το ακόλουθο Σχήμα 1.7., το οποίο αποτελεί μία απλουστευμένη σχηματοποίηση της αλληλεπίδρασης υλικού – Laser:



Σχήμα 1.7. Απλουστευμένη σχηματική αναπαράσταση της επίδρασης της ακτινοβολίας Laser σε μεταλλικά υλικά.

1.4.2. Μοντέλο αλληλεπίδρασης ακτινοβολίας Laser και ύλης κατά Zhigilei et al.

Οι Zhigilei et al. [12] παρουσιάζει με τη σειρά του ένα γενικό μοντέλο που περιγράφει τη διαδικασία αλληλεπίδρασης ενός υλικού με την ακτινοβολία Laser βραχέων παλμών. Η διαδικασία αυτή, όπως

περιγράφεται από τους Zhigilei κ.ο.κ., μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως βάση για τη διεξαγωγή μιας σειράς από υπολογιστικές προσομοιώσεις της αλληλεπίδρασης υλικών-Laser. Οι προσομοιώσεις αυτές μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη βελτιστοποίηση πειραματικών παραμέτρων σε σύγχρονες εφαρμογές, την καθιέρωση νέων τεχνικών και την ερμηνεία των αποτελεσμάτων που προκύπτουν από την εξέταση της μεταβατικής ατομικής δυναμικής σε διάφορα υλικά και επιφάνειες.

Το παρακάτω Σχήμα 1.8. παρουσιάζει σχηματικά την ακολουθία των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα λόγω της *διέγερσης Laser* (Laser excitation) και της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας με το υλικό. Η ακολουθία των φαινομένων αυτών περιλαμβάνει τα εξής:

Βήμα 1: Διέγερση Laser οπτικά ενεργών καταστάσεων μέσα στο υλικό-στόχο (ηλεκτρονική ή ταλαντωτική, γραμμική ή μη-γραμμική/πολυφωτονιακή).

Βήμα 2: Χαλάρωση – θερμοποίηση της απορροφώμενης ενέργειας Laser (μεταφορά ενέργειας μεταξύ ηλεκτρονίου και φωνονίου, διαμοριακή και ενδομοριακή ταλαντωτική εξισορρόπηση, μη-θερμική ατομική δυναμική).

Βήμα 3: Ενεργές μεταβολές δομής και φάσης στην περιοχή υψηλής θερμοκρασίας και πίεσης, κατά τη διάρκεια της εναπόθεσης της ενέργειας Laser (τήξη/μετουσίωση/απανθράκωση, γένεση κρυσταλλικών ατελειών, κάταγμα/θρυμματισμός, εκρηκτικός βρασμός και εξάτμιση της επιφάνειας).

Βήμα 4: Μακροπρόθεσμη εξέλιξη της πολυ-στοιχειακής στήλης φωτοαποδόμησης (εξάτμιση / συμπύκνωση συστοιχιών, χημικές αντιδράσεις και αντιδράσεις ιονισμού).

Η μελέτη των παραπάνω διαδικασιών θα μας είναι πολύ χρήσιμη όταν θα επεκταθούμε διεξοδικά στο ζήτημα της *φωτοαποδόμησης με χρήση Laser* (Laser Ablation), στα πλαίσια του Κεφαλαίου 2.

1.4.3. Απορρόφηση ακτινοβολίας Laser από μεταλλικά υλικά

Η απορρόφηση της ακτινοβολίας Laser από ένα μεταλλικό υλικό αποτελεί προαπαιτήση για την επίδραση της ακτινοβολίας αυτής στο υλικό. Η επιτυχία και το αποτέλεσμα μιας κατεργασίας ενός μεταλλικού υλικού με Laser βασίζεται κατά μείζονα λόγο στην απορρόφηση της ακτινοβολίας, ένα στάδιο που πολλές φορές αποδεικνύεται ιδιαίτερα προβληματικό, κατά την εκτέλεση της κατεργασίας. Οι όποιες διαφορές παρατηρούνται, μεταξύ των *μεταλλικών* και των *μη μεταλλικών* υλικών, κατά τη διάρκεια της κατεργασίας αυτών με χρήση Laser, οφείλονται κατά κύριο λόγο στη διαφορά του τρόπου με τον οποίο συμπεριφέρονται τα ηλεκτρόνια, υπό την επίδραση ηλεκτρικού πεδίου. Στα μέταλλα, η ενέργεια του Laser απορροφάται κατά βάση από σχεδόν ελεύθερα ηλεκτρόνια, μέσω αντίστροφης ακτινοβολίας πέδησης [6]. Αυτό έρχεται σε αντίθεση με τους ημιαγωγούς και τους μονωτές, όπου τα ηλεκτρόνια αυτά θα πρέπει να δημιουργηθούν μέσω ιονισμού φωτονίων και ατομικών στιβάδων.

Πιο συγκεκριμένα, η απορρόφηση της ακτινοβολίας του φωτός Laser στα μέταλλα γίνεται από τα ηλεκτρόνια της ζώνης αγωγιμότητας. Στη συνέχεια, η εναποτιθέμενη ενέργεια αρχικά κατανέμεται γρήγορα (σε χρονικό διάστημα της τάξης των μερικών femtoseconds) ανάμεσα στα ηλεκτρόνια, ενώ αργότερα (σε μεγαλύτερο χρονικό διάστημα) μεταδίδεται στις ταλαντώσεις του πλέγματος. Η επακόλουθη διαδικασία ελέγχεται από την ισχύ της σύζευξης ηλεκτρονίου-φωνονίου και μπορεί να διαρκέσει από κλάσματα του picosecond έως μερικές δεκάδες picoseconds. Τελικά, επέρχεται θερμική ισορροπία ανάμεσα στα ηλεκτρόνια και στα φωνόνια [12].

Η τήξη, η εξάτμιση και η γρήγορη στερεοποίηση αποτελούν διαδικασίες που γίνονται ως επί το πλείστον εκμεταλλεύσιμες μέσω των διαφορών επιδράσεων που λαμβάνουν χώρα λόγω της ακτινοβολίας με Laser στα μεταλλικά υλικά [58]. Οι μεταβολές φάσης στα παραπάνω υλικά είναι εν γένει πολύπλοκες διαδικασίες, λόγω των πυκνοτήτων ισχύος και των χρονικών κλιμάκων που χρησιμοποιούνται για τις διάφορες κατεργασίες με Laser. Ως εκ τούτου, η μελέτη των φαινομένων αυτών απαιτεί τη χρήση μιας σειράς από υπολογιστικά μοντέλα, για τα οποία θα γίνει εκτενέστερη αναφορά στο Κεφάλαιο 2.

Όσον αφορά το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργεί ένα κύμα που διαδίδεται σε ένα ομογενές μέσο, χωρίς όμως να απορροφάται, ο von Allmen [46] το περιγράφει με τη βοήθεια της παρακάτω σχέσης:

$$E = E_0 \exp \frac{2\pi z i}{\lambda - \omega t} \quad (1.46)$$

όπου E είναι η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου, z η συντεταγμένη που είναι παράλληλη στη διεύθυνση διάδοσης του κύματος, ω η γωνιακή συχνότητα και λ το μήκος κύματος της ακτινοβολίας Laser. Αν c η ταχύτητα του φωτός και n_1 ο δείκτης διάθλασης του μέσου εντός του οποίου διαδίδεται η ακτινοβολία, τότε το μήκος κύματος λ εκφράζεται συναρτήσει της γωνιακής συχνότητας ω ως εξής:

$$\lambda = \left(\frac{2\pi}{\omega} \right) \left(\frac{c}{n_1} \right) \quad (1.47)$$

Ανάλογη σχέση με την (1.46) υπάρχει και για το μαγνητικό πεδίο του κύματος. Αν E_0 το εύρος του ηλεκτρικού πεδίου και H_0 το εύρος του μαγνητικού, τότε τα δύο αυτά εύρη μπορούν να συσχετιστούν μεταξύ τους με τη βοήθεια της ακόλουθης σχέσης:

$$H_0 = E_0 n_1 \epsilon_0 c \quad (1.48)$$

όπου ϵ_0 η διηλεκτρική σταθερά στο κενό.

Το ποσό της ενέργειας που μεταφέρει το ηλεκτρικό πεδίο είναι το ίδιο με αυτό που μεταφέρει το μαγνητικό πεδίο. Όμως, σε ένα ηλεκτρόνιο, το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο ασκεί μία ενιαία διανυσματική δύναμη \vec{f} , η οποία, πάντα σύμφωνα με τα λεγόμενα του von Allmen [46], δίνεται από την εξής σχέση:

$$\mathbf{f} = -e \left[\frac{\mathbf{u}}{E} + \left(\frac{n_1}{c} \right) (\mathbf{v} \times \mathbf{H}) \right] \quad (1.49)$$

όπου e το φορτίο του ηλεκτρονίου και v η (διανυσματική) ταχύτητά του.

Είναι όμως σημαντικό να αναφέρουμε ότι, στη δύναμη που περιγράφεται από τη σχέση (1.49), η συνεισφορά του μαγνητικού πεδίου είναι $\frac{v}{c}$ φορές μικρότερη από αυτή του ηλεκτρικού πεδίου, με

αποτέλεσμα να παραλείπεται συνήθως, επειδή $c \approx 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$? v άρα $\frac{v}{c} \rightarrow 0$. Η *πυκνότητα ενέργειας* J , η οποία ουσιαστικά είναι η ένταση της ενέργειας του κύματος ανά μονάδα επιφάνειας, δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$J = \left| \mathbf{E} \times \mathbf{H} \right| = n_1 \epsilon_0 c E_0^2 \quad (1.50)$$

Σε μέσα που χαρακτηρίζονται από την ικανότητα απορρόφησης του ηλεκτρομαγνητικού κύματος, ο δείκτης διάθλασης n_1 θα πρέπει να αντικατασταθεί από ένα *μιγαδικό* δείκτη διάθλασης n , της μορφής

$$n = n_1 + i n_2 \quad (1.51)$$

Λόγω των εξισώσεων (1.46)-(1.51), παρατηρούμε ότι η διάδοση του ηλεκτρομαγνητικού κύματος κατά τη διεύθυνση διάδοσης, z , έχει μειωθεί κατά την ποσότητα $\exp\left(-\frac{n_2 \omega z}{c}\right)$, κάτι που δείχνει ότι ένα μέρος

της οπτικής ενέργειας έχει απορροφηθεί. Για ένταση ακτινοβολίας J , όπως ορίστηκε από τη σχέση (1.50), ο συντελεστής απορρόφησης a ορίζεται ως εξής:

$$a = - \left(\frac{1}{J} \right) \left(\frac{dJ}{dz} \right) = \frac{2\omega n_2}{c} = \frac{4\pi n_2}{\lambda} \quad (1.52)$$

Το αντίστροφο μέγεθος του συντελεστή απορρόφησης, $\frac{1}{a} = d$, ονομάζεται *μήκος απορρόφησης*.

Σε μη ομογενή μέσα, ο δείκτης διάθλασης δεν παραμένει σταθερός στο χώρο αλλά μεταβάλλεται. Εξαιτίας των μεταβολών αυτών, το μέτωπο διάδοσης του κύματος μεταβάλλεται, με αποτέλεσμα την εκτροπή της ακτινοβολίας και τη δημιουργία, στις περισσότερες περιπτώσεις, δευτερογενών κυμάτων. Για ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα που προσπίπτει σε στερεό επίπεδο που χαρακτηρίζεται από δείκτη διάθλασης n και συντελεστή απόσβεσης k , ο νόμος του Fresnel ορίζει την *ανακλαστικότητα* R του κύματος ως εξής:

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (1.53)$$

Ο δείκτης διάθλασης n μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει της διηλεκτρικής σταθεράς ϵ και της ηλεκτρικής αγωγιμότητας σ μέσω της ακόλουθης σχέσης:

$$n^2 = \frac{\epsilon + i\sigma}{\epsilon_0\omega} = \epsilon \quad (1.54)$$

Οι ποσότητες n^2 και ϵ είναι μιγαδικοί αριθμοί της μορφής

$$\left. \begin{aligned} n^2 &= n_1^2 + in_2^2 \\ \epsilon &= \epsilon_1 + i\epsilon_2 \end{aligned} \right\} \quad (1.55)$$

Οι σχέσεις που δίνουν τα πραγματικά και φανταστικά μέρη των δύο παραπάνω ποσοτήτων είναι οι εξής:

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_1 &= n_1^2 - n_2^2 \\ \epsilon_2 &= 2n_1n_2 \\ n_1^2 &= \frac{\epsilon + \epsilon_1}{2} \\ n_2^2 &= \frac{\epsilon - \epsilon_1}{2} \end{aligned} \right\} \quad (1.56)$$

Σύμφωνα με μία πρώτη προσέγγιση, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η επίδραση της ακτινοβολίας Laser σε μεταλλικά υλικά δεν εξαρτάται από περιβαλλοντικούς παράγοντες. Οι οπτικές ιδιότητες των μετάλλων είναι άρρηκτα συνδεδεμένες με τα *ελεύθερα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας*, τα οποία βρίσκονται στην εξωτερική στιβάδα και παίζουν καθοριστικό ρόλο στη διαμόρφωση της οπτικής συμπεριφοράς του μεταλλικού υλικού. Το βασικότερο φαινόμενο που παρατηρείται κατά την αλληλεπίδραση μετάλλων με Laser είναι η *αλληλεπίδραση φωτονίων και ελεύθερων ηλεκτρονίων*. Κατά το βασικό μηχανισμό αλληλεπίδρασης λαμβάνουν χώρα τα εξής βήματα:

Βήμα 1: Απορρόφηση ενός *κβάντου* (στοιχειώδης ποσότητας) ενέργειας από ένα ηλεκτρόνιο.

Βήμα 2: Διέγερση του ηλεκτρονίου και μετάπτωση αυτού σε υψηλότερη ενεργειακή στάθμη.

Βήμα 3: Σύγκρουση του ηλεκτρονίου με άλλα ηλεκτρόνια και φωτόνια που υπάρχουν στο πλέγμα.

Βήμα 4: Απόδοση μέρους της ενέργειας του ηλεκτρονίου στα ανωτέρω σωματίδια. Η ενέργεια αυτή αποδίδεται στο εξωτερικό περιβάλλον υπό μορφή *θερμότητας*.

Τα παραπάνω βήματα παρουσιάζονται στο ακόλουθο *Σχήμα 1.8*:

Επειδή το ηλεκτρονιακό νέφος είναι εκφυλισμένο, οι οπτικές ιδιότητες του μεταλλικού υλικού καθορίζονται *μόνο* από τα *ελεύθερα ηλεκτρόνια*, τα οποία βρίσκονται κοντά στη στάθμη Fermi. Τα ηλεκτρόνια που υφίστανται διέγερση λόγω της απορρόφησης της προσπίπτουσας ακτινοβολίας χάνουν ένα μέρος της ενέργειάς τους (κατόπιν σκέδασής τους στα φωτόνια ή στις τυχόν ανωμαλίες που

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

παρουσιάζει το πλέγμα), προκειμένου να επιστρέψουν στη θεμελιώδη κατάσταση. Στα μεταλλικά υλικά, τα ηλεκτρόνια της εξωτερικής στιβάδας δεν υφίστανται συντονισμό σε κάποια συχνότητα. Οι κρούσεις αποτελούν τη μόνη μορφή αλληλεπίδρασης μεταξύ των μετάλλων και του κρυσταλλικού πλέγματος. Σε αυτό το σημείο είναι πολύ σημαντικό να θυμηθούμε τη σχέση που δίνει τη μιγαδική διηλεκτρική σταθερά, $\epsilon^i(\omega) = \left(1 - \frac{4\pi n e^2}{m\epsilon} \frac{1}{\omega^2}\right) = \text{με} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)$, καθώς επίσης και τη διαπίστωση στην οποία

καταλήξαμε στο τέλος της Υποενότητας 1.3. και η οποία αφορά το διαχωρισμό των μετάλλων με βάση το δείκτη απορροφητικότητάς τους (*υψηλό* ή *χαμηλό*), ένας διαχωρισμός που γίνεται με κριτήριο τη συγκριτική σχέση μεταξύ της συχνότητας διάδοσης της ηλεκτρομαγνητικής, ω , και της συχνότητας του πλάσματος, ω_p .

Για μεταλλικά υλικά που συχνά υπόκεινται σε κατεργασίες με Laser, παρουσιάζονται στον παρακάτω Πίνακα 1.2. τυπικές τιμές για τους συντελεστές απορρόφησης και ανάκλασης, συναρτήσει του μήκους κύματος:

Μήκος Κύματος (μm)	Συντελεστής ανάκλασης					
	Χαλκός (Cu)	Νικέλιο (Ni)	Σίδηρος (Fe)	Βολφράμιο (W)	Χρόμιο (Cr)	Άργυρος (Ag)
0.251	0.259	0.378	0.38	0.15	0.32	0.341
0.305	0.253	0.442	0.44	0.25	0.37	0.091
0.357	0.273	0.488	0.5	0.28	0.41	0.745
0.5	0.437	0.608	0.56	0.493	0.55	0.927
0.7	0.834	0.688	0.580	M/Δ	0.56	0.946
1	0.901	0.72	0.63	0.623	0.57	0.964
2	0.955	0.835	0.77	0.846	0.63	M/Δ
3	0.971	0.887	0.83	0.905	0.7	0.981
5	0.979	0.944	M/Δ	0.94	0.81	0.981
9	0.984	0.956	0.93	0.905	0.92	M/Δ

Πίνακας 1.2. Τυπικές τιμές συντελεστών ανάκλασης συναρτήσει του μήκους κύματος της ακτινοβολίας Laser, για μεταλλικά υλικά που συνήθως υπόκεινται σε κατεργασίες με δέσμες Laser.

M/Δ = Μη διαθέσιμη τιμή.

Τα διάφορα μεταλλικά υλικά χαρακτηρίζονται από μία *διηλεκτρική συνάρτηση*, η οποία δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\epsilon = 1 + \omega_p^2 \left(-\tau_c + i \frac{\tau_c}{\omega} \right) (1 + \omega^2 \tau_c^2) \quad (1.57)$$

Στην παραπάνω σχέση τ_c είναι ο μέσος χρόνος μεταξύ δύο συγκρούσεων και ω_p η γωνιακή συχνότητα του πλάσματος.

Ανάλογα με τη σχέση μεταξύ της γωνιακής συχνότητας διάδοσης της ακτινοβολίας (ω) και της γωνιακής συχνότητας του πλάσματος, οι οπτικές ιδιότητες των μεταλλικών υλικών χωρίζονται στις ακόλουθες τρεις κατηγορίες:

- **Αν $\omega < \omega_p$** , τότε το υλικό παρουσιάζει μεγάλη ανακλαστικότητα και μεγάλο συντελεστή απορρόφησης.
- **Αν $\omega > \omega_p$** , τότε το υλικό παρουσιάζει μικρή ανακλαστικότητα και μικρό συντελεστή απορρόφησης.
- **Αν $\omega = \omega_p$** , τότε οι ποσότητες ϵ_1 και n_1 μηδενίζονται, κάτι που σημαίνει ότι ο δείκτης διάθλασης και η διηλεκτρική σταθερά γίνονται *φανταστικοί αριθμοί*. Η συγκεκριμένη περίπτωση εμφανίζεται μόνο στην περιοχή της υπεριώδους ακτινοβολίας, για τα μεταλλικά υλικά.

Ο συντελεστής ανάκλασης, τυπικές τιμές του οποίου παρουσιάστηκαν στον παραπάνω Πίνακα 1.2., συνήθως ελαττώνεται γραμμικά με την αύξηση της θερμοκρασίας, κάτι που συνοδεύεται από ελάττωση της αγωγιμότητας, ένα φαινόμενο που φαίνεται περισσότερο κατά τη διάρκεια της τήξης. Οι παραπάνω διαπιστώσεις ισχύουν ακριβώς, μόνο για ομογενή μέσα. Εάν στο μεταλλικό υλικό υπάρχουν προσμίξεις και / ή εγκλείσματα, με μέγεθος ένα ή περισσότερα μήκη κύματος, παρουσιάζεται σκέδαση στα όρια των κόκκων, η οποία οδηγεί σε αύξηση της απορροφητικότητας. Τέλος, λόγω προσμίξεων από στρώματα οξειδίων, οι τιμές που δίνονται από τη βιβλιογραφία για το συντελεστή ανάκλασης διαφέρουν σημαντικά από πηγή σε πηγή.

1.5. Γενικά περί Laser υπερβραχέων παλμών (Ultrashort Pulse Lasers)

1.5.1. Ορισμός – Ιστορική αναδρομή – Εφαρμογές

Όπως προκύπτει και από την ετυμολογία της λέξης, η διάρκεια παλμού στα Laser υπερβραχέων παλμών είναι πολύ μικρή, κάτι που σε ακριβή ποσοτικά μεγέθη αντιστοιχεί σε τάξη μεγέθους *picoseconds* και *femtoseconds*, όπως αναφέρθηκε και στην αρχή του Κεφαλαίου. Μέχρι και τα μέσα της δεκαετίας του 1960 δεν ήταν εφικτή η παραγωγή παλμών αυτού του μήκους. Η πρώτη τεχνική που εφαρμόστηκε για την παραγωγή Laser υπερβραχέων παλμών βασίζεται στην ανάπτυξη των πηγών Laser

στερεάς κατάστασης, και, πιο συγκεκριμένα, του πρώτου Laser ιόντων-μετάλλων [46]. Τα Laser *Nd:YAG* και χρωστικών ουσιών (dye lasers) [47][48] αντικατέστησαν τα Laser ιόντων-μετάλλων το 1964, βελτιώνοντας την αποτελεσματικότητα στην παραγωγή των υπερβραχέων παλμών, οι οποίοι μέχρι και το τέλος της δεκαετίας του '60 αφορούσαν τάξεις μεγέθους όχι μικρότερες των λίγων picoseconds. Οι πρώτοι *femtosecond* Laser παλμοί δημιουργήθηκαν στη δεκαετία του '70, χρησιμοποιώντας Laser χρωστικών ουσιών, με αποτέλεσμα να μπορεί να επιτευχθεί η μείωση της διάρκειας του παλμού έως και τα 300 fs περίπου. Όμως αυτά τα Laser αντιμετώπιζαν προβλήματα αξιοπιστίας, κάτι που οδήγησε στην αναθέρμανση του ενδιαφέροντος για τα Laser στερεάς κατάστασης. Συγκεκριμένα, το 1979 αναπτύχθηκε το Laser *Alexandrite* ($\text{Cr:BeAl}_2\text{O}_2$) [49] και το 1982 το Laser *Ti:Sapphire* ($\text{Ti:Al}_2\text{O}_3$) [50].

Κατά τη δεκαετία του '80, η τεχνολογία Laser και υλικών στερεάς κατάστασης συνέχισε να εξελίσσεται, μέσω της παραγωγής υλικών ευρείας ζώνης, με κύριο χαρακτηριστικό αυτών την ευρεία εκπομπή φθορισμού. Χάρη στο παραπάνω χαρακτηριστικό κατέστη εφικτή η παραγωγή και υποστήριξη παλμών διάρκειας μόνο μερικών femtoseconds. Το 1981, οι Fork *et al.* προχώρησαν στην εξέλιξη του Laser υπερβραχέων παλμών, ενώ 4 χρόνια αργότερα άρχισαν οι πρώτες πειραματικές μελέτες στη φωτοαποδόμηση με χρήση υπερβραχέων παλμών Laser [28].

Για την παραγωγή υπερβραχέων παλμών με χρήση *Ti:Sapphire* Laser, προτάθηκαν και χρησιμοποιήθηκαν διάφορες τεχνικές *εγκλείδωσης ρυθμών* (modelocking), με τη σημαντικότερη εξ αυτών να παρουσιάζεται το 1991 από τους Spence, Kean και Sibbett [51], οι οποίοι της προσέδωσαν την ονομασία *Kerr-lens modelocking*. Σε αντίθεση με τις καθιερωμένες τεχνικές *εγκλείδωσης ρυθμών*, η παραπάνω τεχνική δεν περιλαμβάνει κάποιο πρόσθετο στοιχείο *εγκλείδωσης* εντός της οπτικής κοιλότητας. Χάρη στην τεχνική *Kerr-lens modelocking*, ένα *Ti:Sapphire* Laser είναι σε θέση να παράγει παλμούς διάρκειας 6.5 fs, μία τιμή που αντιστοιχεί στη μικρότερη διάρκεια παλμού που έχει παραχθεί, έως και σήμερα, από συσκευή Laser [52].

Η γρήγορη εξέλιξη των Laser υπερβραχέων παλμών (κυρίως διάρκειας από περίπου 100 fs έως και μερικά ps) κατά τις τελευταίες δεκαετίες οδήγησε στη σταδιακή αύξηση της σημασίας τους σε μία σειρά από εφαρμογές, με κυριότερη αυτή των κατεργασιών υλικών [14]. Η μη ύπαρξη διεπιφάνειας επαφής είναι το χαρακτηριστικό των κατεργασιών με Laser που επιτρέπει υψηλή ακρίβεια και ταχύτητα στην κατεργασία, κάτι που είναι πολύ δύσκολο να επιτευχθεί με χρήση μηχανικών μέσων. Για παράδειγμα, στις μικρο-κατεργασίες υλικών χρησιμοποιούνται συνήθως Laser υπερβραχέων παλμών. Ειδικά στην περίπτωση της μικρο-διάτρησης, η ποιότητα των οπών που διανοίγονται κατά τη διάτρηση εξαρτάται σημαντικά από τη διάρκεια του παλμού, με την ποιότητα να είναι τόσο καλύτερη όσο χαμηλότερη είναι η διάρκεια του παλμού. Αυτό δηλαδή σημαίνει ότι τα αποτελέσματα της μικροδιάτρησης είναι σαφώς καλύτερα όταν χρησιμοποιούνται παλμοί διάρκειας της τάξης των fs ή ps από ό,τι της τάξης των ns. Η

κατεργασία διαφανών υλικών μπορεί να γίνει επίσης με τη βοήθεια υπέρυθρης (IR) ή υπεριώδους (UV) ακτινοβολίας Laser, ενώ τέλος η ανάπτυξη μικροδομής σε λεπτά υμένα ευνοείται με τη χρήση συστημάτων υπερβραχέων παλμών Laser υψηλής έντασης, τα οποία χρησιμοποιούνται κατά κύριο λόγο στη φωτοβολταϊκή τεχνολογία.

1.5.2. Κατεργασία υλικών με Laser υπερβραχέων παλμών

Στα πλαίσια της διαδικασίας φωτοαποδόμησης με χρήση Femtosecond Laser (*Femtosecond Laser Ablation*), χρησιμοποιούνται παλμοί διάρκειας από μερικές δεκάδες έως μερικές εκατοντάδες fs. Η τεχνολογία των Femtosecond Laser έχει εξελιχθεί, κατά τα τελευταία χρόνια, σε σημαντικό βαθμό σε βάρος των Laser μακρύτερων παλμών, όπως για παράδειγμα των *Nanosecond Laser*. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο οι εφαρμογές των femtosecond Lasers σε Βιομηχανία, Ιατρική κ.ο.κ., είναι πολύ διαδεδομένες. Η ικανότητα των παλμών πολύ μικρής διάρκειας να επεξεργάζονται, με μεγάλη ακρίβεια, επιφάνειες διαφόρων υλικών, όπως επίσης και διαφανών διηλεκτρικών υλικών, είναι δεδομένη [4][9][42].

Οι υπερβραχείς παλμοί Laser χαρακτηρίζονται, σε σημαντικό βαθμό, από την απορρόφηση αυτών από την ύλη, η οποία πραγματοποιείται σε μία κλίμακα χρόνου σαφώς μικρότερη από αυτή που σχετίζεται με τη μεταφορά ενέργειας των διεγερμένων ηλεκτρονίων στο ατομικό πλέγμα (συνήθως γύρω στα 10 ps). Μάλιστα, το παραπάνω φαινόμενο έχει αποτελέσει αφορμή για εκτενή μελέτη και μοντελοποίηση [4], όπως θα δούμε σε επόμενο Κεφάλαιο, καθώς είναι πολύ σημαντική η διερεύνηση των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στη χρονική μικροκλίμακα κατά την κατεργασία με Laser, δεδομένου και του μεγέθους των συσκευών, το οποίο συνεχώς ελαττώνεται με το πέρασμα του χρόνου. Η απορρόφηση των femtosecond Laser παλμών από την ύλη επιτρέπει την αποφυγή της επιφανειακής αποδόμησης των υλικών (η οποία λαμβάνει χώρα κατά την κατεργασία με *nanosecond Laser*), με τη βοήθεια ενός προστατευτικού καλύμματος που προέρχεται από το πλάσμα. Κατά συνέπεια, η χρήση των femtosecond παλμών Laser παρουσιάζει, έναντι των nanosecond Laser, μία σειρά από σημαντικά πλεονεκτήματα, και εφαρμόζεται ευρέως ως αποτέλεσμα των παρακάτω:

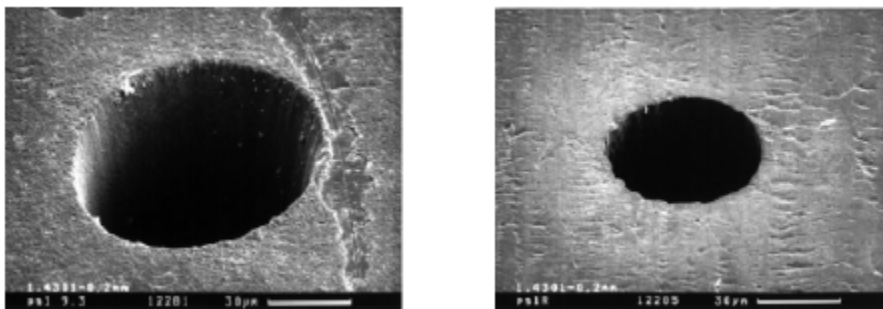
- Αποδοτική ενεργειακή εναπόθεση.
- Ελαχιστοποίηση της μεταφοράς θερμότητας στην περιβάλλουσα περιοχή του υλικού, με αποτέλεσμα την ελαχιστοποίηση των θερμικών ζημιών που ενδέχεται να προκληθούν.

Με χρήση παλμών ενέργειας μόλις μερικών mJ (millijoules), μπορούμε να πετύχουμε εντάσεις ακτινοβολίας που μπορούν, κατά τόπους, να ξεπεράσουν τα 10^{13} W/cm². Επίσης, με τη βοήθεια της πολυφωτονιακής απορρόφησης καθίσταται εφικτή η επεξεργασία διαφανών διηλεκτρικών.

Επειδή η διάρκεια του παλμού σε ένα femtosecond Laser είναι πολύ μικρή, η διάχυση της θερμότητας είναι περιορισμένη και η θερμικά επηρεασμένη ζώνη (*Heat-Affected Zone, HAZ*) είναι αρκετά μικρότερη συγκριτικά με τις περιπτώσεις των Laser μακρότερων παλμών. Η υψηλή συγκέντρωση θερμότητας έχει ως συνέπεια την απομάκρυνση μικρότερου όγκου υλικού ανά κύκλο διεργασίας, κάτι στο οποίο οφείλεται η πολύ υψηλή ακρίβεια της κατεργασίας με Laser παλμών της τάξης των femtoseconds.

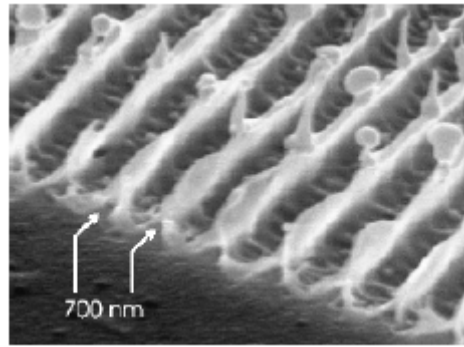
Τα παρακάτω Σχήματα 1.9. έως 1.12. απεικονίζουν τα πειραματικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται στη βιβλιογραφία και αφορούν τις κατεργασίες με χρήση υπερβραχέων παλμών. Ακολουθεί η περιγραφή κάθε ενός από τα πειράματα, μαζί με το σχήμα που αντιστοιχεί στην κάθε περίπτωση:

α) Nolte et al. [54]: Σε αυτή τη μελέτη χρησιμοποιήθηκαν παλμοί διάρκειας 170 fs, μήκους κύματος 780 nm και πυκνότητας ενέργειας 2.5 J/cm^2 . Οι παλμοί χρησιμοποιήθηκαν για τη διάνοιξη οπών τάξης μεγέθους 100μm, σε χαλύβδινο έλασμα πάχους 200μm. Τα αποτελέσματα από τη διαμπερή οπή που δημιουργείται φαίνονται στο παρακάτω Σχήμα 1.9.:



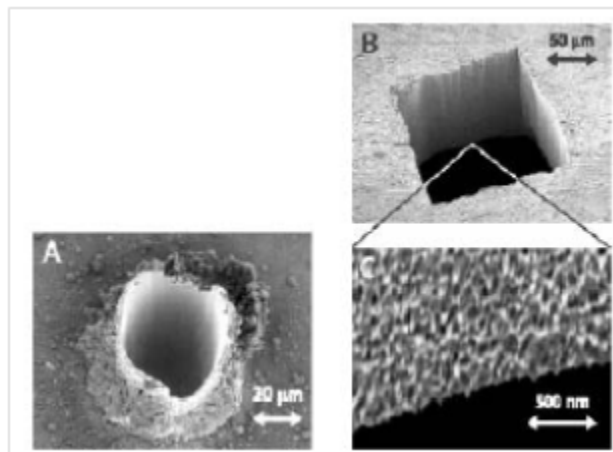
Σχήμα 1.9. Φωτογραφίες, από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης (SEM / Scanning Electron Microscope), οπών που δημιουργήθηκαν από παλμούς με τα χαρακτηριστικά που περιγράφονται από τους Nolte et al. (βλ. α), σε έλασμα χάλυβα πάχους 200 μm. Η είσοδος της οπής εμφανίζεται αριστερά και η έξοδος αυτής δεξιά.

β) Klein-Wiele et al. [55]: Σε αυτή τη μελέτη χρησιμοποιήθηκαν παλμοί διάρκειας 490 fs και μήκους κύματος 248nm. Η υπόψη ακτινοβολία εφαρμόστηκε πάνω σε επιφάνεια από χρυσό (Au), με σκοπό τη δημιουργία μιας μορφολογίας που περιλαμβάνει αυλακώσεις. Η μορφολογία αυτή εμφανίζεται στο παρακάτω Σχήμα 1.10.:



Σχήμα 1.10. Φωτογραφίες SEM από αυλακώσεις σε χρυσό που δημιουργήθηκαν με χρήση παλμών Laser με τα χαρακτηριστικά που περιγράφονται από τους Klein-Wiele *et al.* (βλ. β).

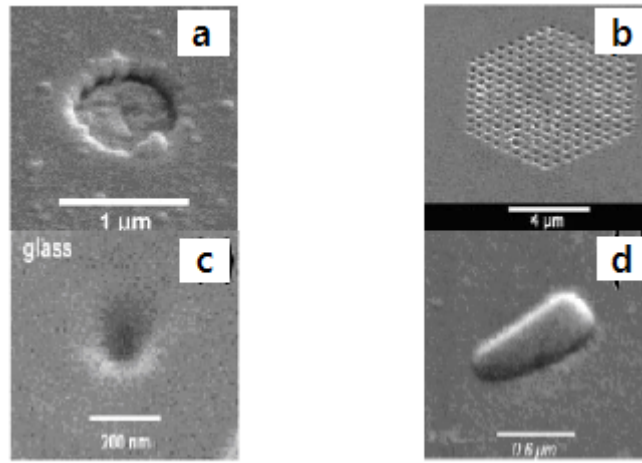
γ) *Wellersshoff et al.* [56]: Σε αυτή τη μελέτη χρησιμοποιήθηκαν παλμοί διάρκειας 120 fs και μήκους κύματος 248nm, με σκοπό την παραγωγή μικροκατασκευών υψηλής ποιότητας. Είναι πολύ σημαντικό, σε αυτό το σημείο, να δείξουμε τη σύγκριση μεταξύ των μορφολογιών και κατασκευών που προκύπτουν, για τις περιπτώσεις κατά τις οποίες χρησιμοποιούνται *nanosecond* ή *femtosecond* παλμοί Laser. Η σύγκριση μπορεί να γίνει οπτικά, με τη βοήθεια φωτογραφιών SEM, οι οποίες εμφανίζονται στο παρακάτω Σχήμα 1.11.. Η φωτογραφία A αναπαριστά τη μορφολογία μιας επιφάνειας που έχει κατεργαστεί με ακτινοβολία Laser μήκους παλμού 25 ns, ενώ στις περιπτώσεις B και C η διάρκεια του παλμού είναι σαφώς μικρότερη και, πιο συγκεκριμένα, ίση με 120 fs.



Σχήμα 1.11. Φωτογραφίες SEM από κατεργασίες που πραγματοποιήθηκαν με χρήση παλμών Laser διαφορετικής τάξης μεγέθους διάρκειας. Η διάρκεια παλμού στη φωτογραφία A ανέρχεται σε 25 ns, ενώ στις B και C ισούται με 120 fs.

δ) *Wellersshoff et al.* [56] & *Korte et al.* [57]: Οι μελέτες αυτές παρουσιάζουν μία σειρά από αποτελέσματα που αφορούν τη μορφή των οπών που σχηματίζονται κατά την κατεργασία με χρήση

femtosecond παλμών Laser. Τα διάφορα αποτελέσματα, όπως αυτά εμφανίζονται μέσω ενός ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης (SEM), εμφανίζονται στο παρακάτω Σχήμα 1.12.:



Σχήμα 1.12.: Φωτογραφίες SEM από οπές που δημιουργήθηκαν με τη βοήθεια femtosecond παλμών Laser. Η φωτογραφία (a) αφορά ένα μεταλλικό υλικό, ενώ οι (b), (c), (d) αφορούν διηλεκτρικά υλικά.

Το Σχήμα 1.12[a] παρουσιάζει μία οπή που δημιουργήθηκε σε μία στρώση από χρώμιο (Cr), με χρήση παλμών διάρκειας 2 fs. Τα femtosecond Laser χρησιμοποιούνται και για τις κατεργασίες διαφανών διηλεκτρικών, όπως αυτά που παρουσιάζονται στα Σχήματα 2.12[b][c][d]. Στο [b] σχήμα εμφανίζεται μία περιοδική νανο-κατασκευή σε κρύσταλλο από ζαφείρι. Η κατασκευή δημιουργήθηκε με χρήση femtosecond Laser διάρκειας παλμού 30 fs, μήκους κύματος 800nm και έντασης 1 mJ. Για τη δημιουργία της κάθε οπής χρησιμοποιήθηκαν δέκα (10) παλμοί, ενώ συνολικά απαιτήθηκαν 30 sec για τη δημιουργία 216 οπών. Τα σχήματα [c],[d] εμφανίζουν, στο κέντρο τους, οπές με τάξη μεγέθους υπο-μικρού (sub-micron), οι οποίες έχουν δημιουργηθεί πάνω σε υάλινη επιφάνεια.

Με τη βοήθεια των παραπάνω σχημάτων καταδεικνύεται ξεκάθαρα ότι η ακρίβεια και η καθαρότητα στα αποτελέσματα μιας κατεργασίας ενισχύονται σημαντικά με τη βοήθεια των femtosecond Laser. Τα αποτελέσματα δεν είναι εφικτό να είναι εξίσου ικανοποιητικά εάν χρησιμοποιηθούν συμβατικά εργαλεία ή Laser μακρύτερης διάρκειας παλμού. Τα femtosecond Laser χρησιμοποιούνται και για την κατεργασία διαφανών υλικών (γυαλί, ζέφυρος κ.ο.κ.) που δύσκολα μπορούν να υποστούν κατεργασία με άλλα είδη Laser που χρησιμοποιούνται ευρέως, έστω και αν κάτι τέτοιο έχει επιτευχθεί μερικές φορές. Συμπεραίνουμε εντέλει ότι τα femtosecond Laser μπορούν να αποδειχθούν πολύ ισχυρά εργαλεία για ένα μηχανικό κατεργασιών, ιδιαίτερα όταν το πεδίο ενασχόλησής του είναι οι μικρο- και νανο-κατεργασίες.

2. ΦΩΤΟΑΠΟΔΟΜΗΣΗ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER (LASER ABLATION): ΒΑΣΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ – ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ – ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΙ

2.1. Βασικά χαρακτηριστικά και εφαρμογές

2.1.1. Γενικά

Με τον όρο *φωτοαποδόμηση με Laser (Laser Ablation)* αναφερόμαστε στη διαδικασία απομάκρυνσης υλικού από μία στερεή (ή ακόμα και υγρή, σε κάποιες περιπτώσεις) επιφάνεια, μέσω της ακτινοβόλησής της με μία δέσμη Laser. Με άλλα λόγια, κατά τη φωτοαποδόμηση με Laser, μία δέσμη από ένα μικρό παλμικό Laser μπορεί να εστιαστεί άμεσα πάνω σε ένα στερεό υλικό, προκειμένου να προκαλέσει επαρκή θέρμανση, με αποτέλεσμα την τελική εξαέρωση της επιφάνειας [70].

Όταν η ροή ακτινοβολίας Laser (ακτινοβολία ανά μονάδα επιφάνειας) είναι χαμηλή, το υλικό θερμαίνεται λόγω της απορρόφησης της ενέργειας του Laser από αυτό, ενώ στη συνέχεια υφίσταται εξαχνωση (αν πρόκειται για *στερεό*) ή εξάτμιση (αν πρόκειται για *υγρό*). Για υψηλότερη ροή Laser, το υλικό συνήθως μεταπίπτει σε κατάσταση *πλάσματος*. Το νέφος πλάσματος δημιουργείται επειδή, κατά τη διάρκεια της φωτοαποδόμησης, ένας μεγάλος αριθμός ηλεκτρονίων, ιόντων και διεγερμένων ουδέτερων σωματιδίων που συνυπάρχουν στο εξαερωμένο υλικό, απορροφούν την ακτινοβολία Laser. Η ακτινοβολία Laser, έπειτα από τη δημιουργία του νέφους πλάσματος, αντιδρά περαιτέρω με το πλάσμα πριν αντιδράσει τελικά με το υλικό-στόχο. Συνήθως η χρήση του όρου *φωτοαποδόμηση με Laser* αναφέρεται στην απομάκρυνση υλικού με χρήση παλμικού Laser (οπότε και η διαδικασία αποκαλείται *Pulsed Laser Ablation – PLA*), αλλά είναι πιθανή η πραγματοποίηση της φωτοαποδόμησης με χρήση μιας δέσμης Laser συνεχούς κύματος, εάν βεβαίως η ένταση της δέσμης είναι αρκετά υψηλή.

Όπως θα δούμε στη συνέχεια, το βάθος στο οποίο λαμβάνει χώρα η απορρόφηση της ενέργειας του Laser και, κατά συνέπεια, η ποσότητα του υλικού που αφαιρείται κατά την επενέργεια ενός μόνο παλμού Laser πάνω στην επιφάνεια, εξαρτάται από τις οπτικές ιδιότητες του υλικού, το μήκος κύματος του Laser και τη διάρκεια παλμού του. Για τη διαδικασία φωτοαποδόμησης μπορούν να χρησιμοποιηθούν πολλές

διαφορετικές τιμές όσον αφορά τη διάρκεια παλμού (από *milliseconds* έως και *femtoseconds*) και τη ροή ακτινοβολίας. Τα παραπάνω καθιστούν τη φωτοαποδόμηση μία διαδικασία πολύ πολύτιμη για μία σειρά από εφαρμογές στην έρευνα και στη βιομηχανία.

Η ιστορία της φωτοαποδόμησης με Laser ξεκινά ήδη από τη γέννηση του Laser, τόσο από θεωρητικής άποψης (A. Einstein 1917, R.W. Ladenburg 1928 κ.ο.κ.) όσο και από πρακτικής, με τη χρήση ορατού φωτός για την εκπομπή ακτινοβολίας (C.H. Townes & A.L. Schawlow, 1957). Μία μεγάλη σειρά από μελέτες, οι οποίες αποτελούν κατά κάποιον τρόπο προγόνους των περισσότερων σύγχρονων εφαρμογών της φωτοαποδόμησης με Laser, εμφανίστηκαν ήδη από τη δεκαετία του 1960 [27]. Το πλήθος των μελετών αυξανόταν χρόνο με το χρόνο αλλά εκτοξεύθηκε γύρω στο 1985, λόγω της αυξανόμενης χρήσης εφαρμογών όπως η ανάπτυξη λεπτών υμενίων, η ιατρική με Laser και η φασματομετρία μάζας για φωτοαποδόμηση με Laser (*Laser Ablation Mass Spectrometry*).

Σημαντικό ρόλο στην ανάπτυξη των διαφόρων εφαρμογών φωτοαποδόμησης, ήδη από τα μέσα της δεκαετίας του 1980, έπαιξε η ανακάλυψη του *excimer laser* (η οποία είχε γίνει το 1970 από τους N. Basov, V.A. Danilychev και Y.M. Popov) [59]. Η παραπάνω ανακάλυψη οδήγησε στην εξέλιξη εφαρμογών όπως η ανάπτυξη λεπτών υμενίων και πολύστρωτων, δίνοντας ιδιαίτερη έμφαση σε υπεραγωγία υλικά με υψηλή θερμοκρασία υπεραγωγιμότητας, T_c .

Από το 1985 και έπειτα [28], έλαβαν χώρα πολλές πειραματικές μελέτες που σχετίζονται με τη φωτοαποδόμηση με Laser. Οι Downer *et al.* [62] έλαβαν φωτογραφικές εικόνες, χρονικής ανάλυσης 100 fs, μιας επιφάνειας από πυρίτιο (Si) που υπόκειται διαδοχικά σε τήξη και εξάτμιση, έπειτα από έντονη διέγερση από έναν παλμό Laser 80 fs. Οι Pronko *et al.* [63] εξέτασαν το κατώφλι πυκνότητας ενέργειας (*threshold fluence*, ο όρος θα εξηγηθεί αργότερα) για τη φωτοαποδόμηση σε χρυσό (Au), ως συνάρτηση του εύρους παλμού μεταξύ 10ns και 100fs. Οι Stuart *et al.* [64] μέτρησαν την εξάρτηση εύρους παλμού του κατωφλίου ζημιάς (*damage threshold*) για ομογενή και πολυστρωματικά διηλεκτρικά υλικά, καθώς επίσης και για οπτικά υλικά με επικάλυψη χρυσού, χρησιμοποιώντας παλμούς Laser μήκους κύματος 1053 και 526 nm και εύρους στη διάρκεια παλμού μεταξύ 140fs και 1ns. Οι Simon και Ihlemann [65] μελέτησαν τη φωτοαποδόμηση μικροδομών και νανοδομών σε χαλκό (Cu) και πυρίτιο (Si) με χρήση βραχέων υπεριωδών παλμών Laser, διάρκειας μεταξύ 0.5 και 50 ps και μήκους κύματος 248 nm. Οι Momma *et al.* [66] διερεύνησαν την αποδόμηση πλακών από χάλυβα και χαλκό, με πάχη μεταξύ 100μm και 1mm, μέσω ακτινοβολήσεως των πλακών αυτών με παλμούς διάρκειας 0.2 ps – 5 ns και εντάσεις τάξης μεγέθους μεταξύ 10^9 και $5 \cdot 10^{16}$ W/cm². Οι Rosenfeld *et al.* [67] μέτρησαν τη χρονική κλίμακα για την απομάκρυνση τεσσάρων διηλεκτρικών υλικών (a-SiO₂, c-SiO₂, c-Al₂O₃, c-MgO) από μία επιφάνεια που ακτινοβολήθηκε με χρήση ενός Laser διάρκειας παλμού 120 fs και ενέργειας παλμού περίπου 50 μJ. Τέλος, οι Shirk και Molian [68] συνέκριναν τη φωτοαποδόμηση του συνήθους διαμαντιού και του

διαμαντιού που υποβλήθηκε σε χημική απόθεση ατμών (Chemical Vapor Deposition – CVD), με χρήση femtosecond και nanosecond Laser, και μελέτησαν τη δομή της επιφάνειας χρησιμοποιώντας φασματοσκοπία Raman, καθώς επίσης και τη σχέση μεταξύ βάθους ανά παλμό και ροής ακτινοβολίας.

2.1.2. Εφαρμογές της φωτοαποδόμησης με Laser

Η φωτοαποδόμηση με Laser αποτελεί μία βάση για μία σειρά από εφαρμογές που βρίσκουν ευρεία χρήση κατά τα τελευταία χρόνια. Η βιβλιογραφία [2][3][59] παρουσιάζει διάφορα πεδία εφαρμογών της διαδικασίας αυτής, τα βασικότερα από τα οποία είναι τα εξής:

- Προσρόφηση / Ιονισμός με Laser υποβοηθούμενος από μήτρα (Matrix-Assisted Laser Desorption / Ionization, MALDI).
- Μεταφορά ορμής πάνω σε μία επιφάνεια, λαμβάνοντας υπόψη την επιβολή υψηλής πίεσης από το υλικό που υπέστη φωτοαποδόμηση στο υπόστρωμα. Η συγκεκριμένη εφαρμογή χρησιμοποιείται συχνά για τη σκλήρυνση επιφανειών.
- Τεχνικές καθοδηγούμενες από Laser για φασματομετρική ανάλυση μάζας μεγάλων μη-πτητικών βιομορίων.
- Χειρουργικές επεμβάσεις με χρήση Laser (π.χ. καταστροφή ή θεραπεία νεύρων και ιστών).
- Μικρο-κατασκευές επιφανειών.
- Εναπόθεση παλμικού Laser (Pulsed Laser Deposition – PLD) οργανικών υμενίων και επικαλύψεων.

Η φωτοαποδόμηση με Laser έχει αρχίσει να επεκτείνεται και σε άλλους τομείς πέραν των ήδη προαναφερθέντων, όπως για παράδειγμα οι ακόλουθοι:

- Νανοτεχνολογία.
 - Μικρο-κατασκευές ηλεκτρονικών συσκευών.
 - Αναστήλωση εικαστικών έργων.
 - Σχεδίαση πηδαλίων Laser / Plasma για μικρο-δορυφόρους.
 - Παλμική προώθηση με Laser (*Pulsed Laser Propulsion*) για χρήση στην αεροδιαστημική βιομηχανία.
- Η περαιτέρω βελτιστοποίηση των πειραματικών παραμέτρων σε σύγχρονες εφαρμογές, καθώς επίσης και η ανάπτυξη νέων τεχνικών που βασίζονται στη φωτοαποδόμηση με Laser, μπορούν να διευκολυνθούν σημαντικά μέσω μίας καλύτερης θεωρητικής κατανόησης: [2]
- της σχέσης μεταξύ των βασικών μηχανισμών της αλληλεπίδρασης Laser και υλικών,
 - των διαδικασιών που λαμβάνουν χώρα σε κατάσταση μη-ισορροπίας και οι οποίες προκαλούνται λόγω του γρήγορου ρυθμού απόθεσης της ενέργειας Laser,

- τα τελικά χαρακτηριστικά της στήλης πλάσματος που εξάγεται από το υλικό ως αποτέλεσμα της φωτοαποδόμησης,
- την κατάσταση του εναπομείναντος υλικού-στόχου.

Από όλες τις εφαρμογές στις οποίες χρησιμοποιείται η φωτοαποδόμηση, η απλούστερη αφορά την απομάκρυνση υλικού από μία στερεή επιφάνεια με ελεγχόμενο τρόπο, όπως λαμβάνει χώρα σε συνηθισμένες κατεργασίες στερεών υλικών αλλά και εφαρμογές *διάτρησης* με Laser. Σε αυτή την περίπτωση, λαμβάνεται υπόψη η δυνατότητα των παλμικών Laser να διανοίξουν πολύ μικρές και βαθιές οπές διαμέσου υλικών με πολύ υψηλή σκληρότητα. Οι υπερβραχείς παλμοί Laser (τάξης μεγέθους *picoseconds* και *femtoseconds*) έχουν τη δυνατότητα να απομακρύνουν υλικό με τόσο μεγάλη ταχύτητα, έτσι ώστε το υλικό που περιβάλλει την οπή να απορροφά πολύ μικρό ποσό θερμότητας, κάτι που καθιστά τη διάτρηση με Laser μία εφικτή και αποτελεσματική κατεργασία ακόμα και για υλικά που είναι ευαίσθητα σε θερμικές επιδράσεις.

Επίσης, η ενέργεια του Laser μπορεί να απορροφηθεί επιλεκτικά από επικαλύψεις, κυρίως στην περίπτωση κατά την οποία η κατεργασία λαμβάνει χώρα πάνω σε μεταλλική επιφάνεια. Αυτό σημαίνει ότι μπορεί να γίνει χρήση παλμικών Laser CO_2 ή $Nd:YAG$ (Neodymium – Yttrium/Aluminum Garnet) για τον καθαρισμό επιφανειών, την απομάκρυνση βαφής ή επικάλυψης, ή την προετοιμασία επιφανειών για βαφή, χωρίς όμως η επιφάνεια – υπόστρωμα να υφίσταται κάποια ζημιά. Τα Laser υψηλής ισχύος μπορούν να καθαρίσουν ένα σχετικά μεγάλο χωρίο πάνω σε μία επιφάνεια, με χρήση ενός μόνο παλμού. Τα Laser χαμηλότερης ισχύος χρησιμοποιούν πολλούς μικρούς παλμούς που μπορούν να σαρωθούν κατά μήκος μιας επιφάνειας.

Όσον αφορά τα Laser μέτριας ισχύος (στην περιοχή μεταξύ $1-10 J/cm^2$) [26], επιδρούν στο υλικό κατά τέτοιον τρόπο ώστε συνήθως να σχηματίζεται πλάσμα χαμηλής θερμοκρασίας (χαρακτηριστική θερμοκρασία τάξης μεγέθους $10^4 K$), μέσα στο οποίο μπορεί να απορροφηθεί ένα αρκετά μεγάλο τμήμα της ενέργειας του Laser. Αυτό επηρεάζει τόσο την απόδοση και την ποιότητα της φωτοαποδόμησης, όσο και τα χαρακτηριστικά της στήλης πλάσματος που οφείλεται στην αλληλεπίδραση Laser – υλικού στόχου. Καθώς οι παράμετροι που καθορίζουν το οπτικό πάχος του πλάσματος (όπως είναι η συγκέντρωση ηλεκτρονίων, η θερμοκρασία και το μέγεθος του νέφους πλάσματος) διαφοροποιούνται σημαντικά κατά τη διάρκεια εκπομπής του παλμού Laser, είναι εν γένει πολύ δύσκολο να δοθεί μία σαφής περιγραφή του δυναμικού απορρόφησης ακτινοβολίας, χωρίς να χρησιμοποιηθεί κάποιο ικανοποιητικό και λεπτομερώς ανεπτυγμένο υπολογιστικό μοντέλο.

Η φωτοαποδόμηση με Laser μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε διάφορες εφαρμογές που αφορούν τη διαμόρφωση του απομακρυνόμενου υλικού σε νέες μορφές που είναι δύσκολο ή και αδύνατο να επιτευχθούν με χρήση άλλων μέσων. Ένα πρόσφατο παράδειγμα αφορά την παρασκευή νανοσωλήνων

από άνθρακα. Το 1995 οι *Guo et al.* ήταν οι πρώτοι που ανέφεραν τη χρήση μιας συσκευής Laser για τη φωτοαποδόμηση ενός δισκίου από καθαρό γραφίτη [60] και, αργότερα, γραφίτη αναμειγμένο με κάποιο καταλυτικό μεταλλικό υλικό [61]. Το υλικό αυτό μπορεί να αποτελείται από στοιχεία όπως κοβάλτιο (Co), νιόβιο (Nb), λευκόχρυσο (Pt), νικέλιο (Ni), χαλκό (Cu) ή κάποιο διμερή συνδυασμό αυτών. Το τελικό σύνθετο υλικό σχηματίζεται μέσω μιας πάστας σκόνης γραφίτη, ανθρακικού ασβεστίου, και του μεταλλικού υλικού. Μετά τη στερεοποίησή της, η πάστα τοποθετείται μέσα σε ένα φούρνο, υπό θερμοκρασία περίπου 1200°C, στον οποίο βρίσκεται ταυτόχρονα και μία συσκευή Laser με την εκπεμπόμενη δέσμη να κατευθύνεται προς το υλικό. Ταυτόχρονα, αντλείται αέριο αργό (Ar) κατά τη διεύθυνση της δέσμης Laser. Καθώς το Laser αποδομεί το υλικό-στόχο, δημιουργούνται νανοσωλήνες άνθρακα, οι οποίοι μεταφέρονται, μέσω της ροής αέρα, σε ένα συλλέκτη χαλκού, υπό χαμηλότερη θερμοκρασία.

Η δημιουργία υποστρωμάτων μπορεί να γίνει με χρήση φωτοαποδόμησης με Laser. Συγκεκριμένα, υπάρχει η δυνατότητα αποδόμησης του υλικού-επικάλυσης από μία πηγή, αφήνοντάς το στη συνέχεια να εναποτεθεί στην επιφάνεια όπου θέλουμε να εφαρμοστεί η επικάλυψη. Πρόκειται για μία διαδικασία που χαρακτηρίζεται ως *παλμική εναπόθεση με Laser* (Pulsed Laser Deposition – PLD) και μπορεί να δημιουργήσει επικαλύψεις από υλικά που δεν μπορούν να εξαερωθούν άμεσα με οποιονδήποτε άλλο τρόπο. Με αυτή τη μέθοδο υπάρχει η δυνατότητα παρασκευής διαφόρων τύπων υπεραγωγίων υλικών με υψηλή θερμοκρασία υπεραγωγιμότητας.

2.1.3. Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της φωτοαποδόμησης με Laser

Ένας από τους βασικούς λόγους για τους οποίους η φωτοαποδόμηση με Laser αποτελεί μία διαδικασία ευρέως χρησιμοποιούμενη σε ένα μεγάλο σύνολο εφαρμογών, είναι τα σημαντικά πλεονεκτήματα που παρουσιάζει η συγκεκριμένη μέθοδος. Αυτά είναι τα εξής:

- Δε χρησιμοποιούνται χημικοί διαλύτες, με αποτέλεσμα η διαδικασία να είναι φιλική προς το περιβάλλον και οι χρήστες να μην εκτίθενται σε νοσηρά χημικά περιβάλλοντα.
- Η διαδικασία είναι σχετικά εύκολο να αυτοματοποιηθεί, π.χ. με χρήση συστημάτων ρομποτικής.
- Το κόστος λειτουργίας είναι χαμηλότερο από αυτό της χρήσης στεγνών μέσων ή CO₂ υπό μορφή πάγου, παρά το γεγονός ότι το κόστος επένδυσης είναι υψηλότερο.
- Η διαδικασία είναι λιγότερο επιρρεπής σε εμφάνιση ζημιών σε σχέση με αποξεστικές τεχνικές, π.χ. οι ίνες άνθρακα εντός ενός σύνθετου υλικού παραμένουν άθικτες.
- Το υλικό-στόχος θερμαίνεται ελάχιστα, κάτι που δικαιολογείται από αυτά που περιγράψαμε παραπάνω.

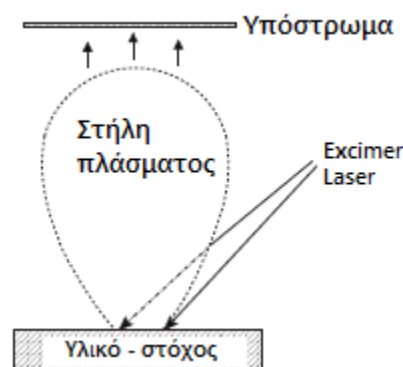
Όμως, η βιβλιογραφία έχει να επιδείξει και μερικά μειονεκτήματα της μεθόδου, εξαιτίας των οποίων η φωτοαποδόμηση και οι τεχνικές που βασίζονται σε αυτή (π.χ. παλμική εναπόθεση με Laser – PLD) είναι σχετικά δύσκολο να αναπτυχθούν ως τεχνολογικές μέθοδοι για απόθεση λεπτών υμενίων υψηλής ποιότητας [59]. Τα σημαντικότερα από αυτά τα μειονεκτήματα, τα οποία αποτελούν και περιορισμούς για την επίτευξη του επιθυμητού αποτελέσματος, είναι τα εξής:

- Εμφάνιση σταγονιδίων στην επιφάνεια του υμενίου.
- Έλλειψη ομοιογένειας στο αναπτυσσόμενο υμένιο.

Τα δύο παραπάνω μειονεκτήματα οφείλονται στην ανισοτροπική διαστολή της στήλης πλάσματος, μετά το σχηματισμό της.

2.1.4. Παλμική εναπόθεση με Laser (PLD): Σχέση αυτής με τη φωτοαποδόμηση

Η τεχνική PLD χρησιμοποιεί παλμούς Laser υψηλής ισχύος, τάξης μεγέθους περίπου 10^8 W/cm² προκειμένου για την τήξη, την εξάχνωση και τον ιονισμό υλικού από την επιφάνεια ενός στόχου [E2][75]. Αυτό το φαινόμενο φωτοαποδόμησης παράγει μεταβατική και έντονα λαμπερή στήλη πλάσματος, η οποία επεκτείνεται με μεγάλη ταχύτητα μακριά από την επιφάνεια του στόχου. Στη συνέχεια, το υλικό που υπέστη φωτοαποδόμηση συλλέγεται πάνω σε ένα κατάλληλα τοποθετημένο υπόστρωμα, πάνω στο οποίο συμπυκνώνεται, με σκοπό τη δημιουργία υμενίων, όπως παρουσιάζεται χαρακτηριστικά στο Σχήμα 2.1...:



Σχήμα 2.1. Σχηματική αναπαράσταση της διαδικασίας παλμικής εναπόθεσης με Laser (PLD).

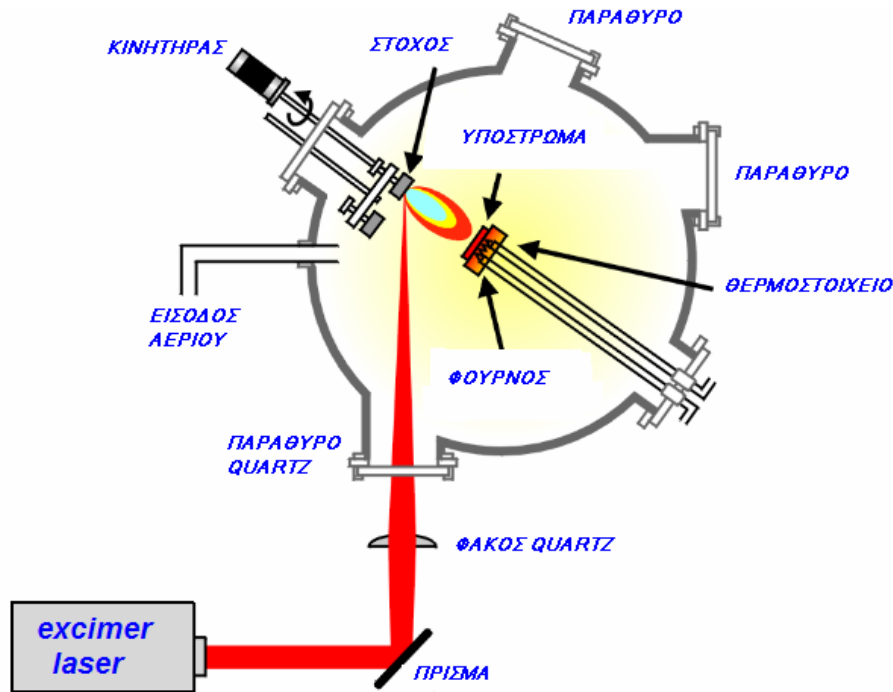
Η τεχνική PLD χρησιμοποιείται ευρέως σε εφαρμογές απόθεσης λεπτών υμενίων, όπως αυτές που αφορούν την ανάπτυξη υμενίων για μαγνητο-οπτικές συσκευές αποθήκευσης δεδομένων, την ανάπτυξη

πολυστρωματικών συσκευών για εφαρμογές οπτικής ακτίνων-X, καθώς επίσης και την εναπόθεση αδαμάντινων υμενίων πάνω σε διάφορα στοιχεία και διατάξεις συσκευών, με σκοπό την προστασία και μόνωσή τους. Κατά τα τελευταία χρόνια, η τεχνική PLD έχει επίσης χρησιμοποιηθεί για την Παρασκευή μικροδομών και νανοδομών.

Η τεχνική PLD παρουσιάζει μία σειρά από σημαντικά πλεονεκτήματα έναντι άλλων μεθόδων εναπόθεσης, με τα πιο σημαντικά εξ αυτών να είναι τα εξής:

- Διατήρηση της στοιχειομετρίας μεταξύ των συνιστωσών που εμπλέκονται στην αντίδραση στόχου / υποστρώματος.
- Πολύ καθαρή διαδικασία, κατά τη διάρκεια της οποίας η εμφάνιση ακαθαρσιών ελαχιστοποιείται.
- Παρουσιάζει σχετικά υψηλούς ρυθμούς εναπόθεσης σε τιμές ροής ακτινοβολίας Laser που να μην θεωρούνται μέτριες αλλά είναι μεγαλύτερες από το κατώφλι φωτοαποδόμησης (*threshold fluence*). Για παράδειγμα, αν η πυκνότητα ενέργειας (ροή ακτινοβολίας) είναι στην περιοχή των $1.5 - 2 \text{ J/cm}^2$ πάνω από ένα κατώφλι φωτοαποδόμησης 0.23 J/cm^2 , για ακτινοβολία με Excimer Laser, μπορεί να επιτευχθεί ένας εύλογος ρυθμός εναπόθεσης, της τάξης των 10 nm/min , όπως έχουν διαπιστώσει μέσα από πειράματά τους οι Lorenz *et al.* [74].

Το παρακάτω Σχήμα 2.2. παρουσιάζει μία τυπική πειραματική διάταξη της διαδικασίας PLD [E4]. Ένα υλικό-στόχος και ένα υπόστρωμα διατηρούνται εντός ενός θαλάμου κενού, ο οποίος συνήθως πληρούται με αδρανή αέρια όπως είναι το αργό (Ar) και το μοριακό άζωτο (N_2), υπό συνθήκες πολύ χαμηλής πίεσης, συνήθως μεταξύ 10^{-4} και 10^{-8} bar. Οι διαστάσεις του στόχου και του υποστρώματος είναι συνήθως τάξης μεγέθους μερικών cm, ενώ ο στόχος και το υπόστρωμα βρίσκονται μεταξύ τους σε απόσταση 50 με 100 mm περίπου. Διάφορες διατάξεις, με χαρακτηριστικά που μπορεί να διαφέρουν λιγότερο ή περισσότερο σε σχέση με αυτά που αναφέρθηκαν, έχουν ήδη αναπτυχθεί για την εναπόθεση λεπτών υμενίων, ενώ έχουν αναπτυχθεί και μερικές διατάξεις που προορίζονται για την κατασκευή μικροδομών και νανοδομών. Πάντως, η κατεργασία της PLD δεν είναι απαραίτητο να πραγματοποιηθεί χρησιμοποιώντας Excimer Laser, αφού και τα Nd:YAG (ένα τέτοιο θα χρησιμοποιηθεί και στη μετέπειτα πειραματική και υπολογιστική μελέτη μας) πραγματοποιούν εξίσου αποτελεσματικά το σκοπό για τον οποίο τα χρειαζόμαστε.



Σχήμα 2.2. Τυπική διάταξη παλμικής εναπόθεσης με Laser (PLD).

Η τεχνική PLD είναι μία εν γένει ευέλικτη τεχνική εναπόθεσης και δημιουργίας λεπτών υμενίων, και παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα έναντι άλλων μεθόδων που χρησιμοποιούνται για εφαρμογές εναπόθεσης:

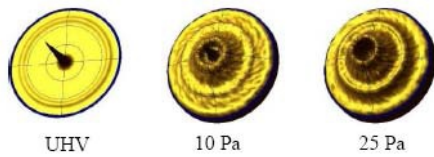
- Στην PLD, πολλές παράμετροι, όπως αυτές που αφορούν το Laser και τις συνθήκες προετοιμασίας των δοκιμίων, μπορούν να μεταβληθούν και να ασκήσουν σημαντική επίδραση στις ιδιότητες του υμενίου.
- Η μέθοδος παρέχει τη δυνατότητα στοιχειομετρικής μεταφοράς του υλικού από το στόχο στο υπόστρωμα, επιτρέποντας με αυτό τον τρόπο την εναπόθεση όλων των ειδών υλικών (π.χ. μετάλλων, κεραμικών, πολυμερών), αλλά και στην ανάπτυξη σύνθετων συστημάτων (π.χ. αισθητήρες).
- Οι τυπικές τιμές του ρυθμού εναπόθεσης στην PLD μπορούν να είναι ιδιαίτερα μεγάλες, δίνοντας με αυτό τον τρόπο τη δυνατότητα ελέγχου του πάχους του υμενίου.
- Το παραγόμενο πλάσμα χαρακτηρίζεται από υψηλή ενέργεια, η οποία διευκολύνει την ευκινησία των συστατικών στο υπόστρωμα και δίνει τη δυνατότητα ανάπτυξης υλικών ακόμα και σε χαμηλές θερμοκρασίες (π.χ. επιπέδου περιβάλλοντος).
- Η PLD έχει τη δυνατότητα παραγωγής σωματιδίων σε κατάσταση μη χημικής ισορροπίας, οδηγώντας με αυτό τον τρόπο στην παραγωγή νέων υλικών με μετασταθή συμπεριφορά, τα οποία δε θα μπορούσαν να παραχθούν κάτω από συνθήκες θερμοδυναμικής ισορροπίας.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

- Η πηγή ενέργειας Laser για τη μεταφορά του υλικού βρίσκεται εκτός του θαλάμου κενού της διάταξης PLD. Με αυτό τον τρόπο ελαχιστοποιούνται οι ακαθαρσίες εντός του θαλάμου.
- Η τεχνική PLD μπορεί να χρησιμοποιήσει πολλά και διαφορετικά υλικά, τα οποία γίνεται να εξατμιστούν χρησιμοποιώντας την ίδια συσκευή, απλά αλλάζοντας το μήκος κύματος της εκπεμπόμενης δέσμης Laser.
- Το εύρος πιέσεων που παρέχεται στην PLD είναι πολύ μεγάλο, μεταξύ υψηλού κενού και μερικών χιλιάδων ατμοσφαιρών (atm). Επίσης, η χρήση αντιδρώντος αερίου (κατά τη βούληση του εκάστοτε Μηχανικού) μπορεί να βοηθήσει στην ευκολότερη ρύθμιση των ιδιοτήτων του υμενίου.
- Δεν εμφανίζει τυχόν προβλήματα που εμφανίζονται σε άλλες παρόμοιες κατεργασίες εναπόθεσης που βασίζονται σε ηλεκτρόνια ή ιόντα (π.χ. sputtering).
- Το μέγεθος της δέσμης του εστιασμένου Laser είναι πολύ μικρό, οδηγώντας με αυτό τον τρόπο σε επιφάνειες με εμβαδό κάτω από 1 cm^2 . Με αυτό τον τρόπο, διευκολύνεται η παρασκευή σύνθετων δειγμάτων εμπλουτισμένων με ισότοπα, μέσα στο υμένιο που εναποτίθεται πάνω στο υπόστρωμα.
- Στην PLD καθίσταται εφικτή, μεταξύ άλλων, και η εναπόθεση πολυστρωματικών υμενίων χωρίς τη διακοπή του κενού και την αλλαγή των υλικών, χρησιμοποιώντας μία περιστροφική βάση πάνω στην οποία μπορούν να τοποθετηθούν δύο ή περισσότεροι ίδιοι ή διαφορετικοί στόχοι, με τη διαδικασία που πραγματοποιείται να είναι συνεχής, χωρίς την ανάγκη κατά διαστήματα διακοπής και επανέναρξης από το χρήστη.

Τα μειονεκτήματα της μεθόδου PLD, τα οποία διάφοροι ερευνητές έχουν αποπειραθεί κατά τα τελευταία χρόνια να αντιμετωπίσουν είναι τα εξής:

- Η παραγωγή, κατά τη διάρκεια της εναπόθεσης, μακροσκοπικών σωματιδίων (που χαρακτηρίζονται από υπολογίσιμες διαστάσεις σε μακροσκοπικό επίπεδο).
- Η μη δυνατότητα επίτευξης ομοιόμορφου πάχους υμενίου κατά την εναπόθεση πάνω σε μεγάλης έκτασης υποστρώματα.
- Η ανομοιομορφία του πλάσματος και η φύση του υλικού ενδέχεται να οδηγήσουν σε ετερογενή δομή του υμενίου.
- Η πρόσκρουση των αποδομούμενων σωματιδίων με πολύ υψηλή ταχύτητα (λόγω των υψηλών κινητικών ενεργειών), μπορεί να προκαλέσει ελαττώματα στην κρυσταλλογραφική δομή του υμενίου.
- Το πάχος και η επιφάνεια του υμενίου γίνονται τόσο λιγότερο ομοιόμορφα όσο αυξάνεται η πίεση του αντιδρώντος αερίου, εάν και εφόσον θέλουμε να το χρησιμοποιήσουμε. Η εμφάνιση ολοένα και εντονότερων δακτυλίων καθώς αυξάνεται η πίεση (βλ. διπλανό Σχήμα),



, είναι χαρακτηριστική της αυξανόμενης ανομοιομορφίας όταν αυξάνουμε την πίεση (Σημείωση: UHV = Ultra-High Vacuum, υπέρ-υψηλό κενό).

Η φωτοαποδόμηση με Laser (Laser Ablation) αποτελεί τη βάση για την πραγματοποίηση της διαδικασίας PLD. Η διαδικασία φωτοαποδόμησης έχει ως αποτέλεσμα, όπως έχουμε ήδη αναφέρει περισσότερες από μία φορές, την παραγωγή πλάσματος, το οποίο υπόκειται σε περαιτέρω αντίδραση με την ακτινοβολία Laser. Αυτή η περαιτέρω αντίδραση έχει ως αποτέλεσμα την προστασία, υπό μορφή ασπίδας, της άνω επιφάνειας του υλικού. Το συγκεκριμένο φαινόμενο είναι ευρέως γνωστό με τον όρο *plasma shielding* και επηρεάζει περαιτέρω το ρυθμό αποδόμησης. Κατά την αντίδραση ακτινοβολίας-πλάσματος, το πλάσμα απορροφά μέρος της ακτινοβολίας, με αποτέλεσμα την αύξηση της θερμοκρασίας του. Κατόπιν του τερματισμού του παλμού, αυτό το πλάσμα υψηλής θερμοκρασίας διαστέλλεται υπό κενό, πριν εναποτεθεί στο υπόστρωμα. Κατά συνέπεια, η διαδικασία PLD μπορεί να κατηγοριοποιηθεί σε τέσσερα στάδια, όπου το στάδιο της φωτοαποδόμησης αποτελεί τόσο το σημαντικότερο όσο και το πρώτο χρονικά στάδιο, στο δρόμο για την ολοκλήρωση της διαδικασίας. Τα υπόλοιπα τρία στάδια είναι τα εξής:

- Σχηματισμός πλάσματος και αντίδραση αυτού με το Laser.
- Διαστολή του πλάσματος υπό κενό.
- Εναπόθεση στο υπόστρωμα.

2.1.5. Παράμετροι εξάρτησης της διαδικασίας φωτοαποδόμησης

Η διαδικασία φωτοαποδόμησης με Laser εξαρτάται από μία σειρά από παραμέτρους [69] που αφορούν:

- το Laser (μήκος κύματος, ροή ακτινοβολίας, συχνότητα επανάληψης παλμού, διάρκεια παλμού)
- το υλικό (απορρόφηση, θερμική διαχυσιμότητα, συμπεριφορά όσον αφορά την τήξη και το βρασμό),
- τη στρωματική δομή του δοκιμίου που θα υποβληθεί σε φωτοαποδόμηση με Laser.

Η απορρόφηση, η οποία εξαρτάται ως επί το πλείστον από το μήκος κύματος του Laser, καθορίζει το λόγο της προσπίπτουσας προς την απορροφημένη ενέργεια Laser. Η αύξηση της πυκνότητας ενέργειας έχει ως αποτέλεσμα μεγαλύτερους ρυθμούς φωτοαποδόμησης. Επίσης, η αύξηση της συχνότητας επανάληψης του παλμού λαμβάνει χώρα λόγω συσσώρευσης θερμότητας, όπως τονίζεται από τους Singh *et al.* [71] και Schittenhelm *et al.* [72]. Για ομοιόμορφες τιμές της ενέργειας παλμού, η μικρότερη

διάρκεια παλμού επηρεάζει μικρότερο όγκο υλικών και προκαλεί υψηλότερες θερμοκρασίες στη θερμικά επηρεαζόμενη ζώνη. Αντίθετα, η αύξηση της διάρκειας του παλμού έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση του όγκου του υλικού που θα επηρεαστεί κατά τη φωτοαποδόμηση, αλλά και την επίτευξη χαμηλότερων θερμοκρασιών στην περιοχή επιρροής. Κατά τη διάρκεια της εξάτμισης, το νέφος ατμού μπορεί να ιονιστεί από τη δέσμη Laser, με αποτέλεσμα τη δημιουργία μιας στήλης πλάσματος που μπορεί να απορροφήσει ένα τμήμα της ενέργειας του παλμού, ελαττώνοντας με αυτό τον τρόπο το ρυθμό φωτοαποδόμησης. Αυτή η επίδραση ενισχύεται όταν η διάρκεια του παλμού είναι τάξης μεγέθους ns ή ps, ενώ είναι αμελητέα για παλμούς διάρκειας fs.

Σε γενικές γραμμές, η ποιότητα του αποτελέσματος της φωτοαποδόμησης με Laser επιδεινώνεται λόγω της υπερχειλίσης τήγματος και της πρόκλησης θερμικών ζημιών στο υπό κατεργασία δοκίμιο, δύο ανεπιθύμητα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα για υψηλής διάρκειας παλμούς Laser. Αυτό έρχεται να επιβεβαιώσει τη διαπίστωση ότι η ποιότητα της φωτοαποδόμησης βελτιώνεται με την ελάττωση της διάρκειας παλμού. Όμως, η διάρκεια παλμού έχει ως αρνητική συνέπεια την ελάττωση της απόδοσης του φαινομένου.

2.2. Περιγραφή της διαδικασίας φωτοαποδόμησης με Laser

Πολλές αποτελεσματικές μέθοδοι, αλλά και υπολογιστικά μοντέλα, έχουν αναπτυχθεί με σκοπό τη μελέτη όλης της διαδικασίας του φαινομένου φωτοαποδόμησης στόχων με χρήση Laser (*Pulsed Laser Ablation*). Παρά το γεγονός ότι τα όσα αφορούν την προσομοίωση και τη μοντελοποίηση του παρόντος φαινομένου θα μελετηθούν διεξοδικά στο Κεφάλαιο 3, εντούτοις μπορούμε σε αυτό το σημείο να κάνουμε μία συνοπτική παράθεση ορισμένων από τα κυριότερα μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν από διάφορους ερευνητές σε παρελθούσες μελέτες, προκειμένου να περιγράψουν το φαινόμενο με τη μέγιστη δυνατή ακρίβεια.

Οι Fang *et al.* [73] παρουσίασαν ένα θερμικό μοντέλο που περιγράφει τη φωτοαποδόμηση με Laser ενός μεταλλικού στόχου, όπου η συσκευή Laser παράγει υπεριώδεις nanosecond παλμούς υψηλής ισχύος και όπου λαμβάνεται υπόψη το φαινόμενο του plasma shielding. Οι Singh και Viatella [76] προέβλεψαν την απόδοση της φωτοαποδόμησης σε διαφορετικά χρονικά διαστήματα, χρησιμοποιώντας ένα μοντέλο που εκλαμβάνει τη θερμοκρασία του πλάσματος ως ανάλογη του στιγμιαίου βάθους φωτοαποδόμησης. Οι Conde *et al.* [59] πραγματοποίησαν αριθμητική προσομοίωση των αρχικών σταδίων της διαδικασίας φωτοαποδόμησης με Laser, λαμβάνοντας υπόψη το ρόλο της αρχικής τραχύτητας επιφάνειας του στόχου στην εκτροπή της στήλης πλάσματος. Οι Zhang *et al.* [77] προέβλεψαν το συντελεστή απορρόφησης και την απορροφητικότητα του στόχου συναρτήσει της θερμοκρασίας του, και απεικόνισαν την επίδραση της

δυναμικής φύσης τους στη διαδικασία φωτοαποδόμησης. Οι Oliveira και Vilar [78] διερεύνησαν την πιθανότητα εμφάνισης εκρηκτικού βρασμού κατά τη διάρκεια της φωτοαποδόμησης TiC με χρήση παλμικού Laser *Nd:YAG* και φθοριούχου κρυπτού (KrF), με χρήση προσομοίωσης με πεπερασμένα στοιχεία σε δύο διαστάσεις. Οι Bulgakov και Bulgakova [26] παρουσίασαν ένα θερμικό μοντέλο της φωτοαποδόμησης με Laser λαμβάνοντας υπόψη το σχηματισμό και τη θέρμανση της ακτινοβολίας που απορροφά το πλάσμα, προκειμένου για τον υπολογισμό της ισορροπίας στην ενέργεια του Laser κατά τη διάρκεια ενός παλμού. Ο Lunney [79] περιέγραψε, στο υπολογιστικό του μοντέλο, τις βασικές φυσικές διαδικασίες που εμπεριέχονται στη θέρμανση με Laser και εξάχνωση του μεταλλικού στόχου, λαμβάνοντας υπόψη το δυναμικό ιονισμού και την εκ νέου ακτινοβολία προς την επιφάνεια-στόχο. Τέλος, οι Amoruso *et al.* [80] διερεύνησαν τους μηχανισμούς απορρόφησης και κορεσμού σε πλάσματα που δημιουργήθηκαν λόγω της φωτοαποδόμησης αλουμινίου με Laser.

Από τα παραπάνω γίνεται εμφανές ότι η μελέτη διαφόρων όψεων των βασικών μηχανισμών της φωτοαποδόμησης με Laser βρίσκεται σε εξέλιξη, μην έχοντας καταλήξει σε κάποιο σαφές συμπέρασμα σχετικά με τη διαδικασία, τα χαρακτηριστικά και της παραμέτρους του φαινομένου. Παρ'όλα αυτά, πολλοί ερευνητές έχουν ενσωματώσει ένα σημαντικό αριθμό χαρακτηριστικών του φαινομένου στα μοντέλα τους, προκειμένου να τα φέρουν πιο κοντά στην πραγματικότητα. Προφανώς, η περίπλοκη φύση των επιμέρους διαδικασιών που λαμβάνουν χώρα, σε διαφορετικές κλίμακες χρόνου και μήκους, δυσκολεύει την εξαγωγή ενός καθολικά αποδεκτού μοντέλου για όλες τις περιπτώσεις [3]. Στο Κεφάλαιο 3 θα ασχοληθούμε διεξοδικότερα με την περιγραφή αυτών των μοντέλων.

Μία ποσοτική περιγραφή της διαδικασίας φωτοαποδόμησης περιλαμβάνει μία σειρά από στοιχεία και χαρακτηριστικά, τα βασικότερα από τα οποία είναι τα εξής:

- Βασικές / στοιχειώδεις διεγέρσεις οπτικά ενεργών καταστάσεων σε ένα στερεό.
- Θερμοποίηση της εναποτιθέμενης ενέργειας Laser.
- Σχηματισμός περιοχών υψηλής θερμοκρασίας και υψηλής πίεσης.
- Εκρηκτική αποσύνθεση και εκτόπιση υλικού.
- Έντονες διεργασίες στην εκτοπισμένη στήλη.
- Διάδοση κύματος πίεσης μέσα στο κυρίως υλικό, μακριά από την επιφάνεια.

Είναι δύσκολο να ενσωματώσουμε όλες τις διαδικασίες που λαμβάνουν χώρα κατά την αποδόμηση μέσα σε ένα μόνο υπολογιστικό μοντέλο. Παρ'όλα αυτά, οι μακροσκοπικές παρατηρήσεις είναι ίδιες και μπορούν να μας δώσουν μία πρώτη, γενική εικόνα σχετικά με την εξέλιξη του φαινομένου της φωτοαποδόμησης [3][24]:

Βήμα 1^ο: Η ενέργεια του Laser απορροφάται από το μέσο.

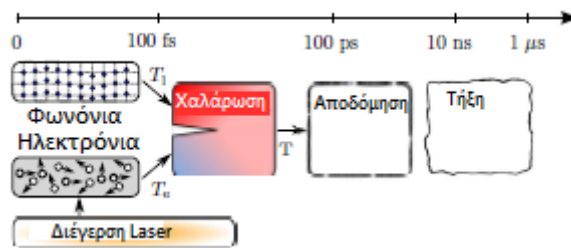
Βήμα 2^ο: Η ενέργεια αυτή μετατρέπεται σε θερμικές ταλαντώσεις.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Βήμα 3^ο: Σε περίπτωση που τα άτομα έχουν αποκτήσει αρκετή ενέργεια, μπορεί στην επιφάνεια να λάβει χώρα εκπομπή σωματιδίων (ηλεκτρονίων, ιόντων, ουδέτερων ατόμων ή μορίων).

Βήμα 4^ο: Κάτω από ορισμένες συνθήκες, ένα νέφος πλάσματος δημιουργείται μπροστά από το στόχο.

Το τι συμβαίνει και σε ποια χρονική κλίμακα εξαρτάται εξ ολοκλήρου από το υλικό και τις παραμέτρους του Laser, όπως είναι το μήκος κύματος ή η διάρκεια παλμού. Για τα μέταλλα, οι χρονικές κλίμακες και οι διεργασίες που λαμβάνουν χώρα σε κάθε περίπτωση παρουσιάζονται στο ακόλουθο Σχήμα 2.3., όπου οι χρονικές τιμές στον οριζόντιο άξονα αντιπροσωπεύουν διάρκειες παλμού. Μετά την απορρόφηση της ενέργειας του παλμού, τα ηλεκτρόνια θερμοποιούνται γρήγορα (σε χρόνο μικρότερο των 500 fs). Οι τυπικοί χρόνοι χαλάρωσης μεταξύ των ηλεκτρονίων και του πλέγματος είναι περίπου ίσοι με 5 ps. Σε αυτή τη χρονική διάρκεια, το σύστημα μπορεί να περιγραφεί με χρήση μιας ενιαίας θερμοκρασίας. Η διαδικασία φωτοαποδόμησης και η υπερχειλίση τήγματος διαρκούν περισσότερο από 10 φορές τον προαναφερθέντα χρόνο χαλάρωσης.

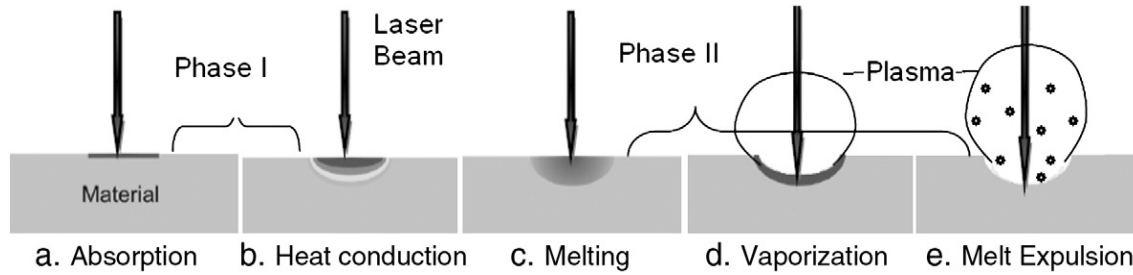


Σχήμα 2.3. Χρονικές κλίμακες και διεργασίες φωτοαποδόμησης σε μέταλλα.

Οι Vasantgadkar *et al.* [69] μπορούν να διακρίνουν διάφορες φάσεις αλληλεπίδρασης του Laser με το υλικό-στόχο, οι οποίες εμφανίζονται στο παρακάτω Σχήμα 2.4.:

Φάση 1^η: Άμεση απορρόφηση της ενέργειας Laser από το υλικό-στόχο και συνακόλουθη θέρμανσή του (Σχήμα 2.4.[a]). Μεταφορά θερμότητας με αγωγή (Σχήμα 2.4.[b]). Γενικότερα, ο ρυθμός θέρμανσης και η θερμοκρασία της επιφάνειας ορίζονται μέσω των συντελεστών απορρόφησης και ανάκλασης, της θερμικής αγωγιμότητας και της ειδικής θερμότητας του στερεού. Στην παρούσα φάση, η μοναδική μορφή μεταφοράς θερμότητας είναι η αγωγή διαμέσου του στερεού.

Φάση 2^η: Αρχίζει όταν η επιφάνεια του στόχου αποκτήσει τη θερμοκρασία τήξης του. Σε αυτό το στάδιο, το μέτωπο του τήγματος εισρέει στη στερεά φάση. Παρατηρείται τήξη του στόχου (Σχήμα 2.4.[c]), εξαέρωσή του (Σχήμα 2.4.[d]) και εξώθηση του τήγματος (Σχήμα 2.4.[e]). Κατά τη διάρκεια των φάσεων [d] και [e] λαμβάνει χώρα έκλυση πλάσματος.

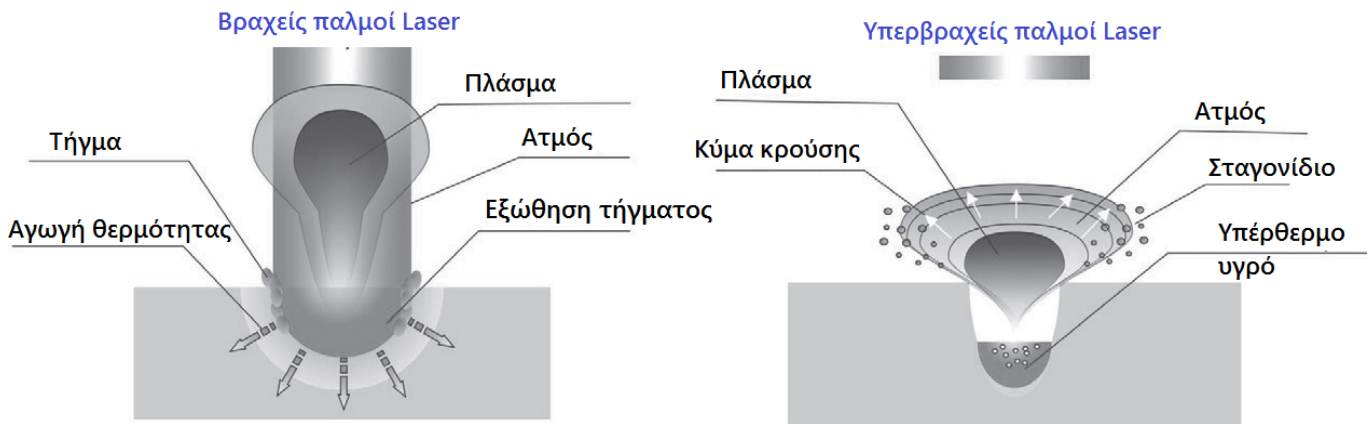


Σχήμα 2.3. Παρουσίαση των σταδίων αλληλεπίδρασης μετάλλου-laser κατά τη διάρκεια της φωτοαποδόμησης με χρήση παλμικού Laser (Pulsed Laser Ablation), σύμφωνα με την έρευνα των Vasantgadkar et al. [69]

Αξίζει εδώ να αναφέρουμε ότι οι θερμικές και οπτικές ιδιότητες του υλικού-στόχου μεταβάλλονται κατά τη διάρκεια της τήξης, με αποτέλεσμα σαφώς χαμηλότερη θερμική αγωγιμότητα και ανακλαστικότητα. Επίσης, αναφέρουμε ότι, κατά την απομάκρυνση υλικού από ένα στερεό στόχο με χρήση παλμικού Laser, λαμβάνει χώρα μία σειρά από πολύπλοκα φαινόμενα, μέσα στα οποία περιλαμβάνεται η θερμική εξάτμιση, η ηλεκτρονιακή διέγερση, ο βρασμός και η έκλυση στερεών σωματιδίων ή σταγονιδίων (όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.4.[e], παραπάνω).

Οι κλασικές περιγραφές για την αλληλεπίδραση ύλης και Laser, άρα και για το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης, δεν καθίστανται πλέον έγκυρες στην περίπτωση των υπερβραχέων picosecond και femtosecond παλμών Laser. Λόγω των πολύ υψηλών εντάσεων των υπερβραχέων παλμών Laser, η απορρόφηση αυξάνεται μέσω των μη-γραμμικών πολύ-φωτονιακών διαδικασιών απορρόφησης. Επιπλέον, στις κλίμακες picoseconds και nanoseconds, η ενέργεια δεν μπορεί να μεταφερθεί από το αέριο ηλεκτρονίων στο ιοντικό πλέγμα άμεσα. Σε αυτή την περίπτωση, η περιγραφή θερμικών φαινομένων απαιτεί την εισαγωγή υπολογιστικών μοντέλων, το σημαντικότερο εκ των οποίων είναι το *διθερμοκρασιακό μοντέλο* (Two-Temperature Model, TTM), το οποίο αποτελεί μία σειρά από θερμικές περιγραφές που διαχωρίζουν τη θερμοκρασία του ηλεκτρονίου και του ιοντικού πλέγματος. Σε επόμενο εδάφιο θα γίνει εκτενέστερη μελέτη του συγκεκριμένου μοντέλου. Κατά τη διάρκεια της παλμικής φωτοαποδόμησης με Laser, οι πολύ υψηλές πιέσεις, πυκνότητες και θερμοκρασίες επιταχύνουν το ιοντισμένο υλικό σε πολύ υψηλές ταχύτητες. Λόγω του πολύ μικρού χρόνου αντίδρασης, το υλικό δεν μπορεί να υποστεί συνεχή εξάτμιση αλλά μετατρέπεται σε μία κατάσταση υπέρθερμου υγρού. Κάτι τέτοιο έχει ως αποτέλεσμα το σχηματισμό ενός μίγματος υψηλής πίεσης υγρών σταγονιδίων και ατμού, το οποίο διαστέλλεται με μεγάλη ταχύτητα. Ο μηχανισμός αυτός ονομάζεται *έκρηξη φάσης* (phase explosion) και παρουσιάζεται στο ακόλουθο Σχήμα 2.5.[β]. Αξίζει εδώ να γίνει η σύγκριση με το Σχήμα 2.5.[α], το οποίο παρουσιάζει σχηματικά τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα κατά τη φωτοαποδόμηση

στόχου με χρήση Laser βραχέος παλμού (σε αντίθεση με το [β] σχήμα που αφορά υπερβραχείς παλμούς Laser).



Σχήμα 2.5. Αλληλεπίδραση δέσμης-ύλης: [α] κλασική περίπτωση (βραχείς παλμοί), [β] περίπτωση χρήσης υπερβραχέων παλμών Laser.

Οι περισσότερες μέθοδοι που αφορούν την τροποποίηση μίας επιφάνειας με χρήση Laser, άρα και οι κατεργασίες αποβολής υλικού μέσω φωτοαποδόμησης με Laser, δεν περιλαμβάνουν μόνο την τήξη του επιφανειακού χωρίου του υλικού-στόχου που αλληλεπιδρά με το Laser, αλλά και την εκ νέου στερεοποίησή της [12].

2.3. Χαρακτηριστικά μεγέθη για τη μελέτη του φαινομένου της φωτοαποδόμησης

Ένα από τα μεγέθη που παίζουν πολύ σημαντικό ρόλο στη μελέτη του φαινομένου της φωτοαποδόμησης είναι αυτό του *κατώφλιου φωτοαποδόμησης* (threshold fluence) [25] ή *κατώφλιου πυκνότητας ενέργειας Laser*. Το μέγεθος αυτό συμβολίζεται με F_{th} και ορίζεται ως η κρίσιμη τιμή πυκνότητας ενέργειας (σε J/cm^2), που θα πρέπει να αντιδράσει με το υλικό προκειμένου να το αποδομήσει. Πρόκειται για μία τιμή που εξαρτάται κατά κύριο λόγο από τη δομή του υλικού-στόχου, αλλά και το συντελεστή απορρόφησης του στα διάφορα μήκη κύματος ακτινοβολίας. Το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης είναι παρατηρήσιμο μόνο για πυκνότητες ενέργειας υψηλότερες από το κατώφλι φωτοαποδόμησης. Σε γενικές γραμμές, το φαινόμενο χαρακτηρίζεται από το *ρυθμό φωτοαποδόμησης* (ablation rate), ο οποίος με τη σειρά του καθορίζεται από το *βάθος αφαίρεσης υλικού* (etch depth) ή *βάθος φωτοαποδόμησης* (ablation depth) που προκαλείται στο υλικό-στόχο ανά προσπίπτοντα παλμό. Αν το βάθος αυτό συμβολιστεί με d , τότε ισχύει η παρακάτω σχέση λογαριθμικής αναλογίας (2.1) για την περίπτωση που η πυκνότητα ενέργειας του Laser, έστω F , είναι ελάχιστα υψηλότερη από το κατώφλι φωτοαποδόμησης:

$$d \propto \ln \left(\frac{F}{F_{th}} \right) \quad (2.1)$$

Όταν αυξηθεί περαιτέρω η πυκνότητα ενέργειας, η (2.1) μεταβάλλεται σε μία σχεδόν γραμμική σχέση της μορφής:

$$d \propto (F - F_0) \quad (2.2)$$

όπου F_0 είναι μία χαρακτηριστική τιμή για την πυκνότητα ενέργειας Laser, συνήθως υψηλότερη από το κατώφλι φωτοαποδόμησης. Σε γενικές γραμμές, παρατηρούμε ότι το βάθος αφαίρεσης υλικού ανά παλμό αυξάνεται έντονα όσο αυξάνεται η πυκνότητα ενέργειας του Laser, ενώ επίσης το Laser δεν μπορεί να επιτύχει αφαίρεση υλικού σε πάχος μεταλύτερο των 10 nm ανά παλμό. Πάντως, εάν τοποθετήσουμε την πυκνότητα ενέργειας F στον οριζόντιο άξονα και το βάθος αφαίρεσης d στον κατακόρυφο άξονα μιας γραφικής παράστασης που απεικονίζει τη μεταξύ τους εξάρτηση, θα παρατηρήσουμε ότι η εξέλιξη της γραφικής παράστασης αυτής θα είναι σαφώς διαφορετική ανάλογα το υλικό και το χρησιμοποιούμενο μήκος κύματος ακτινοβολίας. Ορισμένες πειραματικές μελέτες έχουν δείξει ότι το σχήμα της εξάρτησης μπορεί να επηρεαστεί και από τον αριθμό παλμών.

Η παραπάνω προσέγγιση, στην οποία εισάγονται τα μεγέθη της πυκνότητας ενέργειας F , του κατωφλίου ροής F_{th} , της χαρακτηριστικής πυκνότητας ενέργειας F_0 και του βάθους αφαίρεσης d , είναι πολύ αποτελεσματική κατά την εξέταση του φαινομένου σε μεταλλικά δοκίμια υπολογίσιμου πάχους, αλλά και σε υμένα από πολυμερή. Όμως, δεν είναι το ίδιο αποτελεσματική για λεπτά μεταλλικά υμένα, επειδή συχνά, στην περιοχή πάχους των μερικών εκατοντάδες nm (που γενικά χαρακτηρίζει τα υμένα αυτά), ένας μόνο παλμός Laser, ακόμα και χαμηλής ενέργειας, αρκεί για την πλήρη αποδόμηση του επιστρώματος από το υπόστρωμα. Σε αυτή την περίπτωση, η απόδοση της φωτοαποδόμησης μπορεί να περιγραφεί με τη βοήθεια της διαμέτρου του κρατήρα που δημιουργείται στο υλικό-στόχο μετά το πέρας του φαινομένου.

Το κατώφλι φωτοαποδόμησης είναι ένα μέγεθος που μπορεί να περιγράψει επαρκώς το φαινόμενο, όταν η κατανομή της ενέργειας του Laser είναι ομογενής και έχει τη μορφή top-hat κώνου. Ένα τέτοιο προφίλ ενέργειας Laser χαρακτηρίζει την έξοδο των Excimer Lasers. Όμως, στα Laser τύπου Nd:YAG, η αντίστοιχη κατανομή είναι κανονική (Gauss), με αποτέλεσμα τη μεταβολή της πραγματικής ροής κατά μήκος της διατομής της δέσμης. Κάτι τέτοιο, σύμφωνα με τη βιβλιογραφία [81], εξηγεί τη χρήση της

ενέργειας παλμού ως παράμετρο που καθορίζει τις τιμές των διαφόρων μεταβλητών αλλά και του κατωφλίου, αντί για τη ροή ενέργειας.

Στη φωτοαποδόμηση με Laser, παίζουν πολύ σημαντικό ρόλο τα μεγέθη του μήκους θερμικής διάχυσης (thermal diffusion length, L_d) και του βάθους οπτικής απορρόφησης (optical absorption depth, L_a).

Το μήκος θερμικής διάχυσης περιγράφει το βάθος εισχώρησης θερμότητας μέσα στο υλικό, και προέρχεται από την αναλυτική λύση της εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας με αγωγή σε μία διάσταση:

$$L_d = \sqrt{4K\tau} \quad (2.2)$$

Όπου:

- $K = \frac{k}{\rho c}$ η θερμική διαχυσιμότητα,
- τ η διάρκεια παλμού,
- k η θερμική αγωγιμότητα,
- ρ η πυκνότητα και
- c η ειδική θερμοχωρητικότητα.

Το βάθος οπτικής απορρόφησης μπορεί να προκύψει από την εφαρμογή του νόμου απορρόφησης των Lambert-Beer. Σύμφωνα με το νόμο αυτό, υπάρχει μία λογαριθμική σχέση εξάρτησης μεταξύ της μεταδοτικότητας (έστω T) μιας πηγής φωτός διαμέσου μιας οποιαδήποτε ουσίας, και του γινομένου $a \cdot l$, όπου a ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης και l το μήκος της διαδρομής (απόστασης) κατά μήκος της οποίας ταξιδεύει το φως. Προκύπτει τελικά ότι το μέγεθος L_a αποτελεί το αντίστροφο του συντελεστή οπτικής απορρόφησης, δηλαδή:

$$L_a = \frac{1}{a} \quad (2.3)$$

Στα πολυμερή ισχύει $L_a \geq L_d$. Κατά συνέπεια, η θερμική διάχυση είναι αμελητέα κατά τη διάρκεια του παλμού. Στην περίπτωση των μετάλλων, όταν αυτά βάλλονται με παλμούς Laser διάρκειας ns ή ps, ισχύει $L_a \leq L_d$. Επίσης, το βάθος οπτικής απορρόφησης είναι τυπικά το 1/20 του μήκους κύματος, σύμφωνα με τους Matthias *et al.* [82]. Όταν χρησιμοποιείται ένα Laser Nd:YAG με δυνατότητα τριπλασιασμού της συχνότητας εκπομπής ακτινοβολίας, αυτό το βάθος αντιστοιχεί σε περίπου 10 με 20 nm. Σύμφωνα με πειραματικές μελέτες, οι οποίες διεξήχθησαν από τους Semerok *et al.* [83], το ανιχνευμένο βάθος του κρατήρα, μετά την επενέργεια ενός παλμού στο υλικό-στόχο, είναι τάξης μεγέθους μm , κάτι που σημαίνει ότι η φωτοαποδόμηση των μετάλλων καθορίζεται από τη θερμική διάχυση. Οι μελέτες που ασχολούνται με την εξάρτηση του κατωφλίου ροής (F_{th}) από το πάχος, έδειξαν ότι, όταν το πάχος του υμενίου ελαττωθεί τόσο, ώστε να γίνει μικρότερο του L_d , το κατώφλι

φωτοαποδόμησης θα ελαττωθεί και αυτό, ενώ ταυτόχρονα θα εξαρτάται και από το υλικό του υποστρώματος.

2.4. Μαθηματικές σχέσεις που αφορούν το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης

2.4.1. Φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα ως αποτέλεσμα της πρόσπτωσης του Laser στο υλικό-στόχο

Όλα τα φαινόμενα που παρατηρούνται κατά τη διάρκεια της φωτοαποδόμησης προκαλούνται από την προσπίπτουσα δέσμη φωτός πάνω στην επιφάνεια του υλικού-στόχου. Για αυτό το λόγο, μερικές από τις μαθηματικές σχέσεις που είναι σημαντικό να χρησιμοποιηθούν αφορά τη διάδοση των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων. Πρόκειται για τις εξισώσεις *Maxwell*, οι οποίες, λαμβάνοντας τη μη-ομογενή μορφή (2.4) και (2.5) με αγνώστους το ηλεκτρικό πεδίο \vec{E} και το μαγνητικό πεδίο \vec{B} αντίστοιχα, μπορούν να μας δώσουν την κυματική εξίσωση. Οι σχέσεις (2.4) και (2.5) ισχύουν στην ακριβή μορφή τους όταν το ηλεκτρικό φορτίο και η πυκνότητα ρεύματος είναι μηδέν:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \Delta \vec{E} = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} - \Delta \vec{B} = 0 \quad (2.5)$$

Στις παραπάνω σχέσεις, c είναι η ταχύτητα του φωτός στο κενό.

Οι λύσεις στις παραπάνω εξισώσεις είναι κύματα που διαδίδονται με την ταχύτητα του φωτός. Η ταχύτητα του σήματος σε ένα μέσο είναι διαφορετική και καθορίζεται από την ηλεκτρική (ϵ) και τη μαγνητική (μ) διαπερατότητα του υλικού. Ο λόγος της ταχύτητας του φωτός στο κενό προς την ταχύτητα του φωτός σε ένα μέσο, δηλαδή ο δείκτης διάθλασης, δίνεται από την παρακάτω σχέση (2.6), όπου το συγκεκριμένο μέγεθος παρουσιάζεται ως μιγαδικός αριθμός:

$$n' = n + ik = \sqrt{\frac{\epsilon_m}{\epsilon_0 \mu_0}} \quad (2.6)$$

Στην παραπάνω σχέση, ο δείκτης m αφορά το τυχόν μέσο, ενώ ο δείκτης 0 αφορά το κενό.

Σε γενικές γραμμές, οι ποσότητες n και k εξαρτώνται από τη συχνότητα, ενώ οι ποσότητες ϵ και μ είναι συναρτήσεις του ηλεκτρικού πεδίου \vec{E} και του μαγνητικού πεδίου \vec{B} . Σε μέσα που παρουσιάζουν απορρόφηση, το φανταστικό μέρος της σχέσης (2.6) έχει ως αποτέλεσμα την εξασθένηση του κύματος, όπως εκφράζεται από το νόμο του Lambert-Beer:

$$E_x = E_0 e^{-ax} = E_0 e^{-x/l_a} \quad (2.7)$$

Όπου l_a είναι το χαρακτηριστικό μήκος απορρόφησης κατά μήκος της διεύθυνσης διάδοσης του κύματος.

Αρχικά, η ενέργεια του Laser απορροφάται από το μέταλλο, μέσω των ελεύθερων ή των ασθενώς συνδεδεμένων ηλεκτρονίων. Μετά από μερικά femtoseconds, το ηλεκτρονιακό νέφος θερμοποιείται μέσω συγκρούσεων μεταξύ των ηλεκτρονίων. Στα πλαίσια της θεωρίας Fermi που αφορά τα υγρά (αλλά μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για τα στερεά), ο χρόνος σκέδασης μεταξύ δύο ηλεκτρονίων, για ένα ηλεκτρόνιο με ενέργεια E , ορίζεται με τη βοήθεια της σχέσης (2.8):

$$\tau_{e-e} = \frac{1}{a(E - E_F)^2 + b(k_B T_c)^2} \quad (2.8)$$

Στην παραπάνω σχέση, οι συντελεστές a και b είναι ανεξάρτητοι των μεγεθών E και T_c . Στην περίπτωση των διεγέρσεων Laser, η ενέργεια των ηλεκτρονίων είναι περίπου ίση με την ενέργεια Fermi. Επιπρόσθετα, η θερμοκρασία μπορεί να ανέλθει σε τιμές μεγαλύτερες των 15000 K. Κατά συνέπεια, λαμβάνοντας υπόψη ότι στη σχέση (2.8) η θερμοκρασία βρίσκεται στον παρονομαστή, ο χρόνος σκέδασης γίνεται μικρός. Ο φυσικός λόγος για αυτό το τόσο σύντομο χρονικό διάστημα μπορεί να δοθεί στο φανταστικό χώρο k . Ο φασικός χώρος σκέδασης είναι πολύ μεγάλος και δεν περιορίζεται στην απαγορευτική αρχή του Pauli, καθώς δεν υπάρχουν πολλές άδειες θέσεις για γεγονότα σκέδασης. Μετά τη θερμοποίηση, υπάρχει η δυνατότητα καθορισμού μιας θερμοκρασίας T_c για τα ηλεκτρόνια, με βάση την κατανομή Fermi-Dirac. Μόνο η αναγωγή του πολυ-σωματικού κβαντομηχανικού συστήματος σε μία μόνο θερμοδυναμική ποσότητα επιτρέπει μια μακροσκοπική περιγραφή.

Λόγω της αδράνειάς τους, τα ιόντα δεν μπορούν να ακολουθήσουν το ταχέως ταλαντούμενο ηλεκτρομαγνητικό πεδίο του Laser. Παρά ταύτα, τα ιόντα κερδίζουν κινητική ενέργεια λόγω των συγκρούσεών τους με τα θερμά ηλεκτρόνια. Η διαφορά μάζας μεταξύ των ηλεκτρονίων και των ιόντων είναι πολύ μεγάλη. Επομένως, μόνο ένα μικρό τμήμα της ενέργειας μεταφέρεται ανά σκέδαση. Ο χρόνος χαλάρωσης μεταξύ ηλεκτρονίου και πλέγματος μπορεί να υπολογιστεί με τη βοήθεια της παρακάτω σχέσης:

$$\tau_{e-l} = \frac{\gamma T_c}{\kappa} \quad (2.9)$$

Όπου:

- γ η σταθερά ηλεκτρονίων για την ειδική θερμότητα,
- T_c η θερμοκρασία των ηλεκτρονίων,
- κ η σταθερά σύζευξης ηλεκτρονίου – φωνονίου.

Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εκτίμηση των χρονικών κλιμάκων της θερμοποίησης των ηλεκτρονίων και του πλέγματος, η οποία είναι συνήθως μία τάξη μεγέθους μεγαλύτερη από τη χρονική κλίμακα της σκέδασης μεταξύ ηλεκτρονίων, τ_{e-e} . Για μέταλλα με ισχυρή σύζευξη ηλεκτρονίου-φωτονίου, όπως είναι ο σίδηρος, η τιμή τ_{e-l} βρίσκεται στην περιοχή των 0.5 ps, ενώ για το αλουμίνιο η τιμή αυτή είναι περίπου ίση με 5 ps.

Σε γενικές γραμμές, η επηρεαζόμενη ζώνη από το Laser είναι μικρή συγκριτικά με ολόκληρο το δείγμα-στόχο, κάτι που σημαίνει ότι λαμβάνει χώρα μόνο τοπική ισορροπία. Η μεταφορά ενέργειας σε περιοχές που βρίσκονται βαθύτερα μέσα στο σύστημα λαμβάνει και πάλι χώρα μέσω συγκρούσεων ανάμεσα στα ηλεκτρόνια.

Ανάλογα με τις χρονικές κλίμακες που μας ενδιαφέρουν, οι συγκρούσεις μεταξύ ηλεκτρονίων θα πρέπει να ληφθούν σοβαρά υπόψη. Στην περίπτωση κατά την οποία οι χρονικές κλίμακες που χρησιμοποιούνται για τα διάφορα συστήματα και τους διάφορους παλμούς είναι σημαντικά μεγαλύτερες από την τιμή τ_{e-e} , μπορούν να χρησιμοποιηθούν απλές περιγραφές του φαινομένου μεταφοράς θερμότητας με αγωγή, ώστε να ενσωματωθούν στη γενικότερη μελέτη της φωτοαποδόμησης με Laser, και κυρίως στα αρχικά στάδια αυτής, όπου η αγωγή είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός μεταφοράς θερμότητας.

2.4.2. Μεταφορά θερμότητας με αγωγή

Για ένα ακίνητο στερεό, η ενεργειακή ισορροπία μπορεί να εκφραστεί ως εξής:

$$c(T)\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q(\mathbf{x}, t) \quad (2.10)$$

Όπου:

- ρ η πυκνότητα μάζας,
- $c(T)$ η ειδική θερμότητα σε μία δοθείσα θερμοκρασία T ,
- \mathbf{q} το διάνυσμα θερμικής ροής,
- $Q(\mathbf{x}, t)$ η πηγή θερμότητας.

Αν κάνουμε την παραδοχή ότι η ενέργεια του φωτός απορροφάται από το μέσο και μετατρέπεται εξ ολοκλήρου σε θερμότητα (μία παραδοχή που δεν είναι πάντοτε αληθής), τότε ο όρος της πηγής θερμότητας μπορεί να εκφραστεί ως εξής:

$$Q(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot \left(\mathbf{S}(\mathbf{x}, t) \right) + U(\mathbf{x}, t) \quad (2.11)$$

Η ποσότητα $U(\overset{r}{x}, t)$ εκφράζει την επιπλέον ενέργεια που απαιτείται ή παρέχεται όταν λαμβάνουν χώρα αλλαγές φάσης ή χημικές αντιδράσεις. Στα πλαίσια των διαφόρων υπολογισμών που γίνονται για τη μοντελοποίηση του φαινομένου, η συγκεκριμένη ποσότητα συνήθως αμελείται. Η ποσότητα $\overset{u}{S}(\overset{r}{x}, t)$ είναι ο χρονικός μέσος όρος του διανύσματος Poynting και δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\overset{u}{S} = \frac{c(\overset{u}{E} \times \overset{u}{H})}{4\pi} \quad (2.12)$$

Για μονοχρωματικό φως που απορροφάται μέσα σε ένα ιστροπικό μέσο, η ποσότητα $-\nabla \overset{u}{S}$ αντιστοιχεί στο νόμο του Lambert-Beer. Στην περίπτωση ενός ιστροπικού και ομογενούς υλικού, υπάρχει η δυνατότητα εισαγωγής, στην εξίσωση (2.11), της γραμμικής προσέγγισης Fourier $\overset{1}{q} = -k\nabla T$ για την ειδική θερμότητα. Συνδυάζοντας τα παραπάνω προκύπτει η εξίσωση μεταφοράς θερμότητας με αγωγή κατά Fourier:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \beta \nabla^2 T + Q(\overset{r}{x}, t) \quad (2.13),$$

όπου k είναι η θερμική αγωγιμότητα και $K = \frac{k}{\rho c}$ η θερμική διαχυσιμότητα. Η αγόμενη θερμότητα των ηλεκτρονίων είναι περίπου 100 φορές μεγαλύτερη αυτής των ιόντων. Κατά συνέπεια, η τιμή k μπορεί να γραφτεί υπό μορφή αγωγιμότητας που αφορά μόνο τα ηλεκτρόνια, k_e .

Για την εξίσωση (2.13), υπάρχουν αναλυτικές λύσεις μόνο για πολύ ειδικές συνοριακές συνθήκες και πηγές $Q(\overset{r}{x}, t)$. Μία λύση για μία σημειακή πηγή, $Q(\overset{r}{x}, t) = \frac{Q_0 \delta(\overset{r}{x}, t)}{\beta}$, που αφορά τον άπειρο χώρο, μπορεί να προέλθει από τη γραμμική εξίσωση θερμότητας. Για τον τρισδιάστατο χώρο, η συνάρτηση Greens λαμβάνει την ακόλουθη μορφή [83]:

$$T(\overset{r}{x}, t) = \frac{Q_0}{8(\pi\beta t)^{3/2}} \exp\left\{-\frac{|\overset{r}{x}|^2}{4\beta t}\right\} \quad (2.14)$$

Για μια πιο γενική πηγή θερμότητας, έστω $S(x', t')$, και ένα άπειρο δοκίμιο, ισχύει η εξής γενικευμένη σχέση για τη θερμοκρασία $T(\overset{r}{x}, t)$:

$$T(\overset{r}{x}, t) = \int_{t'=0}^t \iiint \frac{S(x', t')}{8(\pi\beta)(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{|\overset{r}{x}-\overset{r}{x}'|^2}{4\beta(t-t')}\right\} d^3 \overset{r}{x}' dt' \quad (2.15)$$

Στα πλαίσια της μελέτης της αλληλεπίδρασης μεταξύ Laser και ύλης, το γεγονός ότι τελικώς επέρχεται θερμική ισορροπία ανάμεσα στα ηλεκτρόνια και στα φωνόνια, μετά το πέρας ενός εύλογου χρονικού διαστήματος (τάξης μεγέθους ns ή ps), μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε τη συμβατική εξίσωση μεταφοράς θερμότητας με αγωγή, προκειμένου να περιγράψουμε τη ροή θερμότητας μέσα στον κύριο όγκο (bulk) του ακτινοβολούμενου στόχου [12].

Για συγκεκριμένες (π.χ. πεπερασμένες) γεωμετρίες ή πιο πολύπλοκες πηγές θερμότητας, οι λύσεις γρήγορα λαμβάνουν πιο περίπλοκη μορφή, με αποτέλεσμα να εφαρμόζονται αριθμητικές μέθοδοι για τα περισσότερα πρακτικά προβλήματα που σχετίζονται με σχετικά φαινόμενα, άρα και με τη φωτοαποδόμηση με Laser.

2.5. Το διθερμοκρασιακό μοντέλο (Two-Temperature Model, TTM)

2.5.1. Ορισμός – Κατανόηση της έννοιας

Όπως αναφέρθηκε στο προηγούμενο εδάφιο, η διάχυτη αγωγή θερμότητας μέσα στο κυρίως (bulk) υλικό ελέγχεται κατά κύριο λόγο από τα ηλεκτρόνια. Ταυτόχρονα με την εξίσωση αγωγής θερμότητας, μπορεί να προκύψει μία λύση που σχετίζεται με την εξέλιξη της θερμοκρασίας των ηλεκτρονίων μέσα σε ένα μέταλλο που θερμαίνεται από Laser. Παρ'όλα αυτά, κάτι τέτοιο δεν ισχύει πλήρως, επειδή η τήξη του στόχου, η δημιουργία κυμάτων πίεσης και τα περισσότερα φαινόμενα που σχετίζονται με τη φωτοαποδόμηση, λαμβάνουν χώρα επειδή διασπάται το κρυσταλλικό πλέγμα. Για αυτό το λόγο, είναι σημαντική η διατύπωση μιας περιγραφής που αφορά τη θερμοκρασία των φωνονίων.

Για την πραγματοποίηση των υπολογισμών των θερμοκρασιών του ηλεκτρονίου και του φωνονίου, έχει διατυπωθεί το ευρέως χρησιμοποιούμενο, σε πολλές εφαρμογές μοντελοποίησης, *διθερμοκρασιακό μοντέλο* (Two-Temperature Model, TTM). Η θεωρία του διθερμοκρασιακού μοντέλου είναι η βασικότερη από τις θεωρίες που εξηγούν την απορρόφηση της ενέργειας του Laser, αλλά και τη θέρμανση μεταλλικών υλικών λόγω της ενέργειας αυτής. Στα πλαίσια του μοντέλου TTM, τα ελεύθερα ηλεκτρόνια και η κρυσταλλική δομή στα μεταλλικά υλικά μελετώνται ως δύο ξεχωριστά υποσυστήματα, κάθε ένα από τα οποία καθορίζεται από τα δικά του χαρακτηριστικά, όπως για παράδειγμα αυτό της θερμοκρασίας. Έτσι, ορίζουμε δύο διακριτές θερμοκρασίες για το σύστημα: αυτή του ηλεκτρονίου (*electron temperature, T_e*) και αυτή του κρυσταλλικού πλέγματος (*lattice temperature, T_l*). Οι θερμοκρασίες αυτές περιγράφονται με χρήση μιας σειράς από εξισώσεις [3], οι οποίες παρατίθενται στη συνέχεια. Χάρη στο διθερμοκρασιακό μοντέλο διευκολύνεται η κατανόηση της πορείας της ενέργειας Laser από τη στιγμή που η δέσμη θα προσπέσει στο στόχο. Συγκεκριμένα, διαπιστώνουμε ότι η ενέργεια

που μεταφέρεται από το Laser απορροφάται μόνο από τα ελεύθερα ηλεκτρόνια και μεταφέρεται στην κρυσταλλική δομή μέσω αλληλεπίδρασης των δύο.

Στα πλαίσια του διθερμοκρασιακού μοντέλου, τα ελεύθερα ηλεκτρόνια και η κρυσταλλική δομή βρίσκονται αρχικά σε ισορροπία και στην ίδια θερμοκρασία. Όταν η δέσμη του Laser προσπέσει στην επιφάνεια του υλικού, λαμβάνει χώρα απορρόφηση της ενέργειας των ηλεκτρονίων, κάτι που έχει ως επακόλουθο την αύξηση της θερμοκρασίας τους. Μάλιστα, η θερμοκρασία των ηλεκτρονίων γίνεται ιδιαίτερα υψηλή, επειδή η ειδική θερμότητα των ηλεκτρονίων είναι κατά κύριο λόγο μικρό μέγεθος, ενώ μία ακτίνα Laser εμπερικλείει συνήθως υψηλά ποσά ενέργειας. Την ίδια περίοδο, η θερμοκρασία του κρυσταλλικού πλέγματος παραμένει χαμηλή. Όταν όμως αρχίζουν τα ηλεκτρόνια να αλληλεπιδρούν με την κρυσταλλική δομή, παρατηρείται μεταφορά θερμότητας ανάμεσα στα συστήματα των ηλεκτρονίων και του πλέγματος. Μεταξύ των δύο αυτών συστημάτων θα επέλθει ισορροπία μετά το πέρας μερικών picoseconds. Στη συνέχεια, η μεταφορά ενέργειας στο υλικό θα ακολουθήσει την κλασική διαδικασία μετάδοσης θερμότητας, ενώ δεν αποκλείεται να υπάρξουν αλλαγές φάσεων κατά τη διάρκεια της ακτινοβολήσης του υλικού-στόχου από την ακτίνα (ή δέσμη) Laser, αν η τιμή της ενέργειας του Laser φτάσει σε ιδιαίτερα υψηλά επίπεδα.

Η απορρόφηση της ενέργειας του Laser από το υλικό θα έχει σαν επακόλουθο τη ραγδαία αύξηση της θερμοκρασίας τόσο των ηλεκτρονίων όσο και του κρυσταλλικού πλέγματος. Οι αλλαγές φάσης που λαμβάνουν χώρα, για ιδιαίτερα υψηλές τιμές ενέργειας του Laser, έχουν ως αποτέλεσμα την απομάκρυνση μέρους του υλικού από τον αρχικό όγκο του στόχου. Κατά τη διάρκεια αυτής της περιόδου λαμβάνει χώρα μία σειρά από σύνθετα θερμικά και μηχανικά φαινόμενα, τα οποία θα εξεταστούν στα πλαίσια της Υποενότητας 2.6.. Το γεγονός ότι η θερμοκρασία αποτελεί το σημαντικότερο παράγοντα για να υπάρξει αποκόλληση του υλικού, καθιστά σημαντική την κατάστρωση ενός απλού αλλά πλήρους και αξιόπιστου μοντέλου για την εύρεση των θερμοκρασιών ηλεκτρονίου και πλέγματος ανά πάσα στιγμή, αλλά και των συνθηκών κάτω από τις οποίες πραγματοποιούνται αλλαγές φάσης, καθώς επίσης και η απομάκρυνση υλικού. Αυτός είναι ο λόγος για τον οποίο το μοντέλο TTM τυγχάνει ευρείας αποδοχής από ερευνητές και μηχανικούς, προς επίτευξη του παραπάνω σκοπού.

2.5.2. Συμβατική μορφή του διθερμοκρασιακού μοντέλου

Το συνεχόμενο μοντέλο TTM (*Continuum TTM model*) περιγράφει τη χρονική εξέλιξη των θερμοκρασιών των υποσυστημάτων, με χρήση συζευγμένων μη-ομογενών μερικών διαφορικών εξισώσεων, της γενικής μορφής (2.16) και (2.17):

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla [K_e T_e \nabla T_e] - \kappa (T_e - T_l) + S(x, t) \quad (2.16)$$

$$C_l(T_l) \frac{\partial T_l}{\partial t} = \nabla [K_l T_l \nabla T_l] + \kappa (T_e - T_l) \quad (2.17)$$

Όπου:

- οι ποσότητες C και K αφορούν αντίστοιχα τη θερμοχωρητικότητα και τη θερμική αγωγιμότητα των ηλεκτρονίων (C_e, K_e) και του πλέγματος (C_l, K_l),
- κ είναι η σταθερά σύζευξης ηλεκτρονίου – φωνονίου και
- $S(x, t)$ είναι ο όρος της πηγής Laser.

Παρατηρώντας προσεκτικά τις εξισώσεις, διαπιστώνουμε ότι, για σταθερή τιμή K_e , η Εξίσωση (2.16) αποτελεί ουσιαστικά την Εξίσωση (2.13), το δεύτερο μέλος της εξίσωσης προσαυξάνεται κατά την ποσότητα $\kappa(T_e - T_l)$. Η θερμοκρασία του πλέγματος, T_l , περιγράφεται μέσω της ίδιας διαφορικής εξίσωσης. Στις περισσότερες περιπτώσεις, η διάχυση των φωνονίων, $K_l T_l \nabla T_l$, μπορεί να εξαλειφθεί λόγω της μικρής θερμοκρασιακής κλίσης των φωνονίων.

Μία σημαντική ποσότητα που εισέρχεται εδώ, και η οποία περιλαμβάνεται στις Εξισώσεις (2.16) και (2.17), είναι η σταθερά σύζευξης ηλεκτρονίων-φωνονίων, κ . Το μέγεθος αυτό μπορεί να μετρηθεί και να υπολογιστεί με πολλές διαφορετικές μεθόδους. Κατά συνέπεια, είναι πολύ σημαντικό να γίνει σύγκριση μεταξύ των διαφόρων μεθόδων για την εκτίμηση της τιμής του κ . Η συγκεκριμένη ποσότητα αποτελεί επίσης μία σημαντική ποσότητα στη θεωρία της υπεραγωγιμότητας. Αποδεικνύεται ότι η τιμή της ποσότητας αυτής σχετίζεται με τη μεταβατική θερμοκρασία των υπεραγωγών.

Μία εμπειρική σχέση για τη σταθερά κ δίνεται από τους Wang *et al.* [85] και είναι η εξής:

$$\kappa = \frac{\pi^4 (k_B v_s n_e)^2}{18 L \sigma_e (T_e) T_e} \quad (2.18)$$

Όπου:

- v_s η ταχύτητα του ήχου,
- n_e η πυκνότητα ηλεκτρονίων,
- σ_e η ηλεκτρική αγωγιμότητα και
- L ο αριθμός Lorenz, όπως είναι γνωστός μέσω του νόμου Wiedemann-Franz, δηλαδή

$$\frac{\kappa}{\sigma} = LT \Rightarrow L = \frac{\kappa}{\sigma T} \quad (2.19)$$

Μία δεύτερη εμπειρική σχέση έχει διατυπωθεί από τον Allen, συγκρίνοντας το ρυθμό χαλάρωσης της θερμοκρασίας του ηλεκτρονίου, T_e , με την παράμετρο ενίσχυσης της σύζευξης ηλεκτρονίου-φωτονίου, $\lambda(T)$, και το σταθμισμένο τετράγωνο της συχνότητας του φωτονίου, $\langle \omega^2 \rangle$, χρησιμοποιώντας βασικές σχέσεις σκέδασης [86]:

$$\hat{I} = \frac{3\hbar\tilde{A}\langle \omega^2 \rangle}{\kappa_B} \quad (2.20)$$

Η ενίσχυση ηλεκτρονίου-φωτονίου της θερμοϊσχύος διάχυσης μπορεί να γραφτεί με τη βοήθεια της ακόλουθης σχέσης:

$$\frac{S}{T} = \frac{S_0}{T} [1 + \lambda(T)] \quad (2.21)$$

όπου S_0 η θερμοϊσχύς, στην περίπτωση απουσίας αλληλεπιδράσεων μεταξύ ηλεκτρονίων και φωτονίων. Η παράμετρος ενίσχυσης μάζας ηλεκτρονίου-φωτονίου, $\lambda(T)$, δίνεται από τη σχέση (2.22):

$$\lambda(T) = \int_0^{\infty} \frac{\alpha^2(\omega)F(\omega)}{\omega} G\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) d\omega \quad (2.22)$$

Στην παραπάνω σχέση, η συνάρτηση $G\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)$ είναι μία καθολική συνάρτηση, την οποία εισήγαγε ο Kaiser, ενώ η ποσότητα $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ αντιπροσωπεύει τη συνάρτηση Eliashberg [87]. Η ποσότητα $F(\omega)$ είναι η πυκνότητα καταστάσεων των φωτονίων, ενώ το α^2 αποτελεί μία στάθμιση της αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-φωτονίου. Από την εξίσωση (2.22) μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι απαιτείται μια μεγάλη ποσότητα θεωρητικής και πειραματικής γνώσης για τον υπολογισμό ακριβών τιμών για τη σταθερά σύζευξης κ . Με τη βοήθεια της σχέσης (2.21) μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η σύζευξη ηλεκτρονίου-φωτονίου μπορεί να αντιστοιχηθεί στο συντελεστή Seebeck της θερμοηλεκτρικής ισχύος, S , ένας συντελεστής που μπορεί να μετρηθεί με χρήση συνήθων τεχνικών θερμοκρασιακής κλίσης.

2.5.3. Απλοποιημένη μορφή του διθερμοκρασιακού μοντέλου (Simplified TTM – sTTM)

Σε γενικές γραμμές, όλες οι παράμετροι στις εξισώσεις TTM (2.16) και (2.17) εξαρτώνται από τη θερμοκρασία. Δεν υπάρχει η δυνατότητα εξεύρεσης κάποιας αναλυτικής λύσης για τις συγκεκριμένες εξισώσεις.

Όταν λεπτά μεταλλικά υμένα πάχους μικρότερου των 100 nm θερμανθούν με χρήση ακτινοβολίας Laser, οι θερμοκρασιακές κλίσεις ανάμεσα στην επιφάνεια και στην πίσω πλευρά μπορούν να

αμεληθούν. Με την προσέγγιση της σταθερής ειδικής θερμότητας και παραδεχόμενοι ότι η θέρμανση των ηλεκτρονίων είναι ακαριαία, μπορούν να προκύψουν αναλυτικές εκφράσεις για τις, χρονοεξαρτώμενες πλέον, θερμοκρασίες του ηλεκτρονίου, $T_e(t)$ και του πλέγματος, $T_l(t)$. Σε αυτή την περίπτωση, οι εξισώσεις του διθερμοκρασιακού μοντέλου μπορούν να απλοποιηθούν, δίνοντάς μας την εξίσωση (2.23):

$$-C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = C_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = \kappa(T_e - T_l) \quad (2.23)$$

Μπορούμε να επιλέξουμε την παρακάτω αναλυτική διατύπωση για τις θερμοκρασίες $T_e(t)$ και $T_l(t)$:

$$\left. \begin{aligned} T_e(t) &= Ae^{-t/\tau} + T_\infty \\ T_l(t) &= Be^{-t/\tau} + T_\infty \end{aligned} \right\} \quad (2.24)$$

Όπου τ ο χρόνος χαλάρωσης, T_∞ η θερμοκρασία ισορροπίας και A, B σταθερές. Από την Εξίσωση (2.22) και λαμβάνοντας υπόψη τις διατυπώσεις (2.24), προκύπτει η ακόλουθη σχέση για το χρόνο χαλάρωσης:

$$\tau = \frac{C_e C_l}{\kappa C_e + C_l} = \frac{C_r}{\kappa} \quad (2.25)$$

Σε αυτή τη σχέση εμφανίζεται, ως νέο μέγεθος, η ελαττωμένη θερμοχωρητικότητα C_r . Συνήθως η ποσότητα C_e είναι πολύ χαμηλότερη της C_l , κάτι που συνεπάγεται ότι, χωρίς βλάβη της γενικότητας, ο χρόνος χαλάρωσης μπορεί να υπολογιστεί με τη βοήθεια της εξής απλοποιημένης έκφρασης:

$$\tau = \frac{C_e}{\kappa} \quad (2.26)$$

Συγκρίνοντας τη συγκεκριμένη έκφραση με τη (2.9), διαπιστώνουμε ότι και οι δύο εκφράσεις υπολογίζουν το χρόνο χαλάρωσης τ , και μάλιστα $C_e = \gamma T_e$. Λαμβάνοντας υπόψη τις παρακάτω αρχικές συνθήκες:

$$T_e(0) = T_e^0 \text{ και} \quad (2.27)$$

$$T_l(0) = T_l^0, \quad (2.28)$$

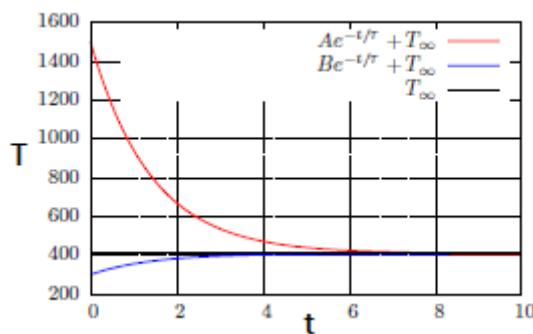
οι λύσεις για τις θερμοκρασίες ηλεκτρονίου και πλέγματος, σύμφωνα με το απλοποιημένο μοντέλο TTM (sTTM), είναι οι ακόλουθες:

$$T_e(t) = \left(\frac{T_e^0 - T_l^0}{\frac{C_e}{C_l} + 1} \right) e^{-t/\tau} + T_\infty \quad (2.29)$$

$$T_l(t) = \left(\frac{T_l^0 - T_e^0}{\frac{C_l}{C_e} + 1} \right) e^{-t/\tau} + T_\infty \quad (2.30)$$

Το παρακάτω Σχήμα 2.6. παρουσιάζει, σε μορφή γραφικής παράστασης $T = f(t)$, τις παραπάνω λύσεις για μια σειρά παραμέτρων, με τις μονάδες μέτρησης της θερμοκρασίας (T) και του χρόνου (t) να είναι αυθαίρετες. Η θερμοκρασία ισορροπίας, T_∞ , προκύπτει ως σταθμισμένος μέσος των δύο αρχικών θερμοκρασιών:

$$T_\infty = T_e^0 \frac{C_e}{C_e + C_l} + T_l^0 \frac{C_l}{C_e + C_l} \quad (2.31)$$



Σχήμα 2.6. Λύσεις για το απλοποιημένο μοντέλο TTM. Οι παράμετροι είναι $C_e = 1$, $C_l = 10$, $T_e(0) = 1500$, $T_l(0) = 300$ και $\kappa = 0.65$. Η θερμοκρασία ισορροπίας $T_\infty = 409$ επιτυγχάνεται μετά από περίπου τέσσερις χρόνους χαλάρωσης, $\tau = 1.4$.

Για μεγαλύτερα δείγματα, ο όρος διάχυσης στην εξίσωση (2.16) δεν μπορεί πια να αμεληθεί. Επιπρόσθετα, όταν εξετάζουμε πραγματικά συστήματα, όλες οι παράμετροι εξαρτώνται από τη θερμοκρασία. Παρά το γεγονός ότι υπάρχουν αναλυτικά μοντέλα για τις περιγραφές μας, είναι δύσκολο να βρεθούν εξισώσεις για τις διάφορες παραμέτρους, που να ισχύουν ομοιόμορφα για ένα μεγάλο θερμοκρασιακό εύρος. Θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν πινακοποιημένες συναρτήσεις, οι οποίες μπορούν να προκύψουν είτε με τη βοήθεια πειραμάτων είτε διεξάγοντας πολύπλοκες προσομοιώσεις. Παρ'όλα αυτά, η εφαρμογή του διθερμοκρασιακού μοντέλου κρύβει πολλές παγίδες.

2.5.4. Εκτεταμένο Διθερμοκρασιακό Μοντέλο (Extended TTM – eTTM)

Το διθερμοκρασιακό μοντέλο, όπως εισήχθη στη βασική του μορφή (βλ. Εδάφιο 2.5.1.) από τον Anisimov [88], παρουσιάζει μία εγγενή αδυναμία. Καθώς βασίζεται στον κλασσικό νόμο μεταφοράς θερμότητας με αγωγή του Fourier, προϋποθέτει άπειρη ταχύτητα διάδοσης της θερμότητας. Μία από τις διαπιστώσεις που υπαινίσσεται η θεωρία της σχετικότητας (Einstein) είναι η αρχή της μη δράσης σε απόσταση, κάτι που προφανώς σημαίνει ότι η ταχύτητα διάδοσης για ένα δοθέν σήμα θα πρέπει να είναι πεπερασμένη. Η βασική ιδέα που σχετίζεται με τα παραπάνω διατυπώθηκε από το Maxwell, ο οποίος τροποποίησε τη βασική εξίσωση αγωγής του Fourier εισάγοντας έναν επιπλέον όρο:

$$\tau_{th} \frac{\partial q}{\partial t} + q = -k \nabla T \quad (2.32)$$

Όπου τ_{th} είναι ο χρόνος χαλάρωσης του μέσου αγωγής της θερμότητας.

Ο Maxwell συμπέρανε ότι ο πρώτος όρος της (2.32) μπορεί να αμεληθεί, επειδή ο ρυθμός αγωγής θερμότητας θα αποκτήσει γρήγορα μία καθορισμένη τιμή. Κάτι τέτοιο ήταν πλήρως βάσιμο περίπου 150 χρόνια πριν, αλλά δεν ισχύει πλήρως από τη στιγμή που μεγάλο μέρος των κατεργασιών φωτοαποδόμησης με Laser χρησιμοποιούν διάρκειες παλμών Laser της τάξης των μερικών femtoseconds. Οι απόψεις σχετικά με το τι ακριβώς αντιπροσωπεύει το μέγεθος τ_{th} δίστανται:

- Οι Zhang *et al.* [89] αναφέρουν ότι το παραπάνω μέγεθος είναι ο χρόνος χαλάρωσης που απαιτείται για τη θερμοκρασία του στόχου να φτάσει σε μια νέα τιμή ισορροπίας, μετά από την επίδραση μίας πολύ υψηλής θερμοκρασιακής κλίσης πάνω στην επιφάνεια.
- Άλλες ερμηνείες [90] παρουσιάζουν το μέγεθος τ_{th} ως το μέσο ελεύθερο χρονικό διάστημα μέσα σε μία διαδικασία σύγκρουσης των σωματιδίων που μεταφέρουν ενέργεια.
- Όσον αφορά τα μέταλλα, ο χρόνος χαλάρωσης των ελεύθερων ηλεκτρονίων μπορεί να χρησιμοποιηθεί γενικά ως ένα τυπικό μέγεθος χρόνου χαλάρωσης.

Η εξίσωση (2.32) ανακαλύφθηκε ξανά το 1958, από τους Cattaneo και Vernotte, ενώ επίσης μπορούμε να εντοπίσουμε μία εκμοντερνισμένη μορφή της εξίσωσης στα πλαίσια της εκτεταμένης Θερμοδυναμικής.

Αναφέρουμε εδώ ότι υπάρχουν διαφωνίες μεταξύ ερευνητών για το αν το μοντέλο TTM μπορεί να προβλέψει τα διάφορα φυσικά φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα κατά τη διαδικασία της φωτοαποδόμησης, όταν χρησιμοποιούνται υπερβραχείς παλμοί, κυρίως διάρκειας τάξης μεγέθους μερικών femtoseconds. Παρά τις διαφωνίες αυτές, ο Hüttner [91] διατύπωσε μία εκτεταμένη μορφή του

TTM (*Extended TTM – eTTM*), βασιζόμενος στην Εξίσωση (2.31) και στην Αρχή Διατήρησης της Ενέργειας (Εξίσωση 2.32):

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = -C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} + S(\mathbf{r}, t) - \kappa(T_e - T_l) \quad (2.33)$$

Κατά συνέπεια, η γενική εξίσωση Fourier (2.32) μετασχηματίζεται στην ακόλουθη:

$$\left(1 + \tau_{th} \frac{\partial}{\partial t}\right) \nabla \cdot \mathbf{q} = -\nabla K_e \nabla T_e \quad (2.34)$$

Η οποία, συνδυαζόμενη με τη (2.33), οδηγεί σε μία υπερβολική μερική διαφορική εξίσωση για τη θερμοκρασία του ηλεκτρονίου. Η εξίσωση αυτή περιλαμβάνει τη δεύτερη παράγωγο της θερμοκρασίας του ηλεκτρονίου ως προς το χρόνο και πρόκειται για μία γενικότερη μορφή της κυματικής εξίσωσης, η οποία αρχικά χρησιμοποιήθηκε για την περιγραφή της διάδοσης σήματος σε υποθαλάσσια καλώδια.

$$C_e \tau_{th} \frac{\partial^2 T_e}{\partial t^2} + C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla |K_e \nabla T_e| + \left(1 + \tau_{th} \frac{\partial}{\partial t}\right) S(\mathbf{r}, t) - \left(1 + \tau_{th} \frac{\partial}{\partial t}\right) \kappa(T_e - T_l) \quad (2.35)$$

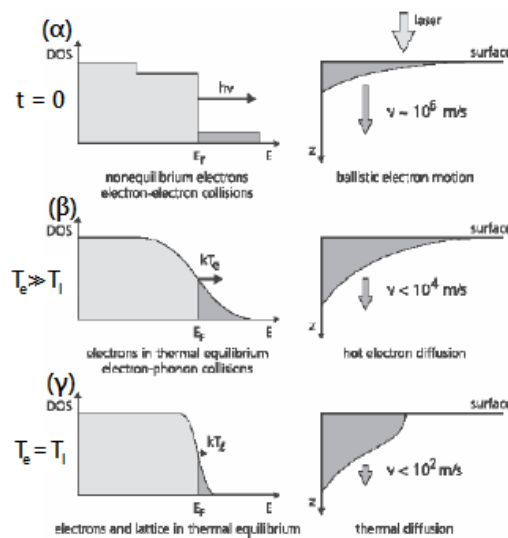
Για το τμήμα που αφορά το φωνόνιο, η εξίσωση παραμένει αμετάβλητη και όπως ακριβώς προτείνεται εντός του μοντέλου TTM, δηλαδή έχει τη μορφή (2.16). Από φυσικής άποψης, η ροή θερμότητας λαμβάνει χώρα μέσα σε ένα χαρακτηριστικό χρονικό διάστημα τ_{th} , επειδή δεν μπορεί να καθιερωθεί μέσα σε αυθαιρέτως μικρά χρονικά πλαίσια. Οι αρχικές εξισώσεις TTM (αυτές που αναφέρθηκαν στο Εδάφιο 2.5.1.) λαμβάνονται καθώς $\tau_{th} \rightarrow 0$.

Οι Metzler *et al.* [91] έδειξαν ότι το μοντέλο eTTM χαρακτηρίζεται από μία βασική λύση με βαλλιστική συμπεριφορά, η οποία έχει ισχύ για πολύ μικρά χρονικά διαστήματα. Ένα μοντέλο διάχυσης, όπως είναι το TTM, περιγράφει μία γραμμική χρονική εξάρτηση για τον τετραγωνικό μέσο της θερμικής μετατόπισης. Για τη βαλλιστική κίνηση, παρατηρείται εξάρτηση από το τετράγωνο του χρόνου, t^2 .

Το βασικό μοντέλο TTM δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για μέταλλα που παρουσιάζουν χαμηλό χρόνο χαλάρωσης τ_{th} , όπως είναι το αλουμίνιο, του οποίου ο χρόνος χαλάρωσης του ηλεκτρονίου βρέθηκε, από πειράματα του Hüttner, ίσος με 67 fs. Είναι όμως σημαντικό να λάβει κάποιος υπόψη ότι το μοντέλο TTM μπορεί να μην αποδίδει όπως θα πρέπει, άρα και να μην είναι κατάλληλο, για αρκετά μεγαλύτερες τιμές του χρόνου χαλάρωσης της θερμοκρασίας, όπως π.χ. συμβαίνει στην περίπτωση του χαλκού, με $\tau_{th,Cu} = 467 \text{ fs}$.

2.6. Μηχανισμοί απομάκρυνσης υλικού κατά τη φωτοαποδόμηση

Κατά τη φωτοαποδόμηση με χρήση Laser υπερβραχέων παλμών, κυρίως Femtosecond Laser, η πολύ σύντομη περίοδος θέρμανσης και ο υψηλός ρυθμός αυτής οδηγούν στη διαπίστωση ότι η διαδικασία μεταφοράς θερμότητας διαφέρει σημαντικά από αυτή που παρατηρείται μακροσκοπικά. Κατά τη διάρκεια της αλληλεπίδρασης των μεταλλικών υλικών με femtosecond παλμούς Laser, αλλά και μετά το πέρας της απορρόφησης των παλμών, λαμβάνουν χώρα τρεις βασικές διεργασίες, όπως τονίζονται από τους Wellershoff *et al.* [92] και παρουσιάζονται στο παρακάτω Σχήμα 2.6.. Στο Σχήμα αυτό, με t συμβολίζεται ο χρόνος, με T_e η θερμοκρασία του ηλεκτρονίου (electron temperature) και με T_l η θερμοκρασία του πλέγματος (lattice temperature):



Σχήμα 2.6. Οι τρεις βασικές διεργασίες μετάδοσης ενέργειας, καθώς λαμβάνει χώρα αλληλεπίδραση μεταξύ femtosecond παλμών Laser και του υλικού-στόχου.

Αριστερή στήλη: Κατανομές πυκνοτήτων κατάστασης (Density of State – DOS).

Δεξιά στήλη: Κατανομή ενέργειας στο εσωτερικό του υλικού.

Κατά την πρώτη διεργασία (Σχήμα 2.6.[α]), η δέσμη του Laser προκαλεί διέγερση των ηλεκτρονίων, τα οποία πλέον κινούνται μέσα στο μεταλλικό υλικό με ταχύτητες τάξης μεγέθους 10^6 m/s. Για τον παραπάνω λόγο, τα ηλεκτρόνια αυτά χαρακτηρίζονται ως *ηλεκτρόνια υψηλής αστάθειας*. Η θερμοκρασία τους δεν είναι καθορισμένη, από τη στιγμή που η κατανομή ενέργειας δε συνάδει με την κατανομή ισορροπίας Fermi. Η αστάθεια που παρατηρείται μπορεί να εκτονωθεί με τη βοήθεια μιας διαδικασίας, την οποία οι Brorson *et al.* [93] και οι Hohlfeld *et al.* [94] αποκαλούν *βαλλιστική μεταφορά ενέργειας* (Ballistic Energy Transport - BET), και της οποίας κύριο χαρακτηριστικό είναι οι εσωτερικές κρούσεις μεταξύ ηλεκτρονίων.

Η δεύτερη διεργασία (Σχήμα 2.6.[β]) εκκινεί όταν έχει παρέλθει συγκεκριμένη περίοδος κρούσεων. Το κύριο χαρακτηριστικό αυτής είναι η διάχυση των ηλεκτρονίων. Σε αυτή τη φάση ισχύει πλέον η

κατανομή Fermi, κάτι που μας επιτρέπει να προσδιορίσουμε τη θερμοκρασία των ηλεκτρονίων. Αυτή η θερμοκρασία είναι μικρότερη από ότι κατά τη διεργασία (α), ενώ η αλληλεπίδραση της κρυσταλλικής δομής με τα ηλεκτρόνια είναι υπεύθυνη για την αύξηση της θερμοκρασίας της κρυσταλλικής δομής. Αυτό το φαινόμενο συνεχίζεται μέχρι τη στιγμή που θα επέλθει θερμική ισορροπία μεταξύ των συστημάτων ηλεκτρονίων και κρυσταλλικής δομής.

Όταν επέλθει θερμική ισορροπία (Σχήμα 2.7.[γ]), οι θερμοκρασίες του ηλεκτρονίου και του κρυσταλλικού πλέγματος εξισώνονται ($T_e = T_l$). Πλέον, η μετάδοση ενέργειας καθορίζεται μόνο από τις κοινές μακροσκοπικές θερμικές διαχύσεις.

Το φαινόμενο BET θεωρείται πολύ σημαντικό στην περίπτωση των ευγενών μετάλλων, όπως ο χρυσός (Au), αλλά παρουσιάζει περιορισμένη σημασία σε μέταλλα μετάπτωσης, όπως το νικέλιο (Ni). Πειραματικές έρευνες [94] έχουν δείξει ότι η κατάσταση ισορροπίας στα ηλεκτρόνια επέρχεται μετά το πέρας κάποιων picosecond από την ακτινοβολήση του στόχου, ενώ η αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων με την κρυσταλλική δομή πραγματοποιείται σε χρονικό διάστημα μερικών δεκάδων picosecond. Αυτό δικαιολογεί τη δυνατότητά μας να αμελήσουμε την ύπαρξη του φαινομένου BET κατά τη μελέτη μετάλλων μετάπτωσης.

Για την εξήγηση των φαινομένων της απορρόφησης της ενέργειας του Laser, καθώς επίσης και του τρόπου με τον οποίο αυτή χρησιμοποιείται για τη θέρμανση μεταλλικών υλικών, μπορεί να χρησιμοποιηθεί, ως απλούστερο αλλά αξιόπιστο μοντέλο, το διθερμοκρασιακό μοντέλο (TTM) για το οποίο έγινε λόγος σε προηγούμενο Εδάφιο.

Αυτό που ενδιαφέρει κατά κύριο λόγο τους ερευνητές είναι η μετάβαση από τη στερεά ή την υγρή κατάσταση στην αέρια, η οποία ευθύνεται για την τελική απομάκρυνση του υλικού από το δοκίμιο που υπόκειται σε ακτινοβολήση με Laser. Υπάρχει μία σειρά από καταστάσεις στις οποίες μεταπίπτει το υλικό καθώς μεταβαίνει από την υγρή στην αέρια φάση. Η ύπαρξη και η διάρκεια των καταστάσεων αυτών εξαρτάται από αρκετούς παράγοντες, οι σημαντικότεροι εκ των οποίων είναι ο ρυθμός θέρμανσης και η αρχική θερμοκρασία του υλικού πριν από την αποδόμηση.

Κατάσταση 1^η: *Συνήθης εξάτμιση* (conventional evaporation). Κατά τη διάρκεια της κατάστασης αυτής, λαμβάνει χώρα μετάβαση των μορίων ή των ατόμων από την υγρή στην αέρια φάση. Για τη φωταποδόμηση με χρήση femtosecond Laser, ο ρυθμός της συνήθους εξάτμισης είναι ιδιαίτερα μικρός συγκριτικά με την αλλαγή φάσης, κάτι που σημαίνει ότι η αποδόμηση μέσω συνήθους εξάτμισης μπορεί να αμεληθεί εάν χρησιμοποιούνται femtosecond Laser παλμοί.

Κατάσταση 2^η: *Συνήθης βρασμός* (conventional boiling). Πρόκειται για έναν άλλο τρόπο μετάβασης των μορίων ή ατόμων από την υγρή στην αέρια φάση. Στα πλαίσια του συνήθους βρασμού προκαλούνται φυσαλίδες σε όλο τον όγκο του υγρού. Ο συνήθης βρασμός λαμβάνει χώρα όταν η θερμοκρασία του

υγρού είναι ίση ή ελάχιστα μεγαλύτερη από αυτή της θερμοκρασίας ισορροπίας μεταξύ υγρού και αερίου. Σύμφωνα με έρευνες των Miotello και Kelly [95], ο συνήθης βρασμός είναι ένα φαινόμενο που δε λαμβάνει χώρα όταν χρησιμοποιούνται, για τη φωτοαποδόμηση, παλμοί Laser διάρκειας μικρότερης των 100 nanoseconds. Επειδή οι αλλαγές φάσης, κατά την αποδόμηση με femtosecond Laser, διαρκούν πολύ λιγότερο από ένα nanosecond, συμπεραίνουμε ότι ο συνήθης βρασμός δεν είναι ένας από τους κυρίαρχους παράγοντες για την απομάκρυνση υλικού με χρήση femtosecond παλμών Laser.

Κατάσταση 3^η: *Εκρηκτικός βρασμός (explosive boiling) ή έκρηξη φάσης (phase explosion)*. Είναι ένα φαινόμενο που εμφανίζεται όταν ο ρυθμός θέρμανσης του υλικού είναι ιδιαίτερα υψηλός. Σε αυτή την περίπτωση, παρουσιάζεται ομογενής πυρήνωση φυσαλίδων αερίου μέσα στον όγκο του υλικού, μόλις η θερμοκρασία φτάσει στο σημείο ισορροπίας μεταξύ υγρού και αερίου.

Από τις διάφορες πειραματικές μελέτες που έχουν διεξαχθεί μέχρι στιγμής, έχουν διαπιστωθεί διάφορα φαινόμενα και χαρακτηριστικά της φωτοαποδόμησης με Laser, τα οποία αποτυπώνονται στην εξάρτηση του βάθους αφαίρεσης υλικού από την πυκνότητα ενέργειας Laser, όπως έχει αναλυθεί στην Υποενότητα 2.3.. Οι διαπιστώσεις αυτές είναι οι εξής:

- Όταν το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης πραγματοποιείται στον αέρα, συνοδεύεται και από ένα ακουστικό κύμα.
- Κατά την εκρηκτική αποδόμηση σχηματίζονται διάφορα φωτοπροϊόντα, των οποίων η φύση και η ποσότητα εξαρτάται άμεσα από το υλικό, το μήκος κύματος, και την ένταση της ακτινοβολίας Laser.
- Κατά τη διάρκεια της φωτοαποδόμησης σε μεταλλικά υλικά, επιτυγχάνονται τυπικά θερμοκρασίες της τάξης των 4000°K, οι οποίες, σύμφωνα με πειραματικές μελέτες, είναι τόσο μεγαλύτερες όσο μεγαλύτερη είναι η ένταση ακτινοβολίας. Τα παραπάνω δεν ισχύουν επακριβώς όταν εξετάζονται συστήματα όπου το υλικό-στόχος δεν εμπίπτει στην κατηγορία των μεταλλικών υλικών.
- Τα προϊόντα της φωτοαποδόμησης με Laser τυπικά κινούνται με ταχύτητες μεταξύ 1000 και 2000 m/s, σε διεύθυνση κάθετη προς την επιφάνεια του ακτινοβολούμενου υποστρώματος. Η κατανομή των ταχυτήτων είναι σχεδόν ανεξάρτητη της προσπίπτουσας έντασης ακτινοβολίας, κάτι που έρχεται σε αντίθεση με την ποσότητα του υλικού, η οποία εξαρτάται άμεσα από την ένταση της ακτινοβολίας.
- Η ταχύτετη έναρξη της διαδικασίας εκτίναξης του υλικού, σε συνδυασμό με την ταχύτετη εκτίναξή του, έχει ως αποτέλεσμα το σχηματισμό ενός διαστελλόμενου αερίου όγκου από προϊόντα της φωτοαποδόμησης, για όσο χρόνο διαρκεί ο παλμός Laser.

Παρά το γεγονός ότι τα παραπάνω χαρακτηριστικά της φωτοαποδόμησης είναι κοινά για όλα τα πιθανά συστήματα κατεργασιών Laser φωτοαποδόμησης, εμφανίζονται σημαντικές διαφοροποιήσεις από σύστημα σε σύστημα, ανάλογα με τη φύση του υποστρώματος (π.χ. κρυσταλλική δομή, χωρική σύσταση). Για τον παραπάνω λόγο, οι μέχρι τώρα διεξαχθείσες έρευνες δεν έχουν καταλήξει σε έναν

ακριβή μηχανισμό φωτοαποδόμησης, με τις παρούσες εντατικές έρευνες και επιστημονικές διαμάχες να προσβλέπουν σε μία ακριβή και αξιόπιστη διατύπωση της διαδικασίας φωτοαποδόμησης. Πάντως έχουν προταθεί, μέσω μιας σειράς θεωρητικών και πειραματικών μελετών, διάφοροι πιθανοί μηχανισμοί, από τους οποίους έχουν επικρατήσει οι ακόλουθοι τέσσερις:

- (1) Φωτοθερμικός μηχανισμός (Photothermal Mechanism).
- (2) Φωτοχημικός μηχανισμός (Photochemical Mechanism).
- (3) Φωτομηχανικός μηχανισμός (Photomechanical Mechanism).
- (4) Εκρηκτικός βρασμός (Explosive Boiling).

2.6.1. Φωτοθερμικός μηχανισμός (Photothermal Mechanism)

Η βασική αρχή του φωτοθερμικού μηχανισμού είναι η εξής: Η αρχική ηλεκτρονική διέγερση των σωματιδίων στο υπόστρωμα μετατρέπεται ταχύτητα σε θερμική. Πιο συγκεκριμένα, τα σωματίδια αποδιεγείρονται και η ενέργεια κατανέμεται στατιστικά στους διάφορους βαθμούς ελευθερίας των σωματιδίων της περιοχής που ακτινοβολείται. Η αύξηση της θερμοκρασίας στο υλικό-στόχο, στα πλαίσια του φωτοθερμικού μηχανισμού, δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\Delta T = \frac{a \cdot F}{\rho \cdot C_p} e^{-az} \quad (2.36)$$

Όπου:

- a ο συντελεστής απορρόφησης των σωματιδίων,
- F η πυκνότητα ενέργειας του Laser,
- ρ η πυκνότητα του υλικού,
- C_p η θερμοχωρητικότητα ανά μονάδα όγκου,
- z το βάθος της οπτικής διείσδυσης.

Ο συντελεστής απορρόφησης μετριέται σε μονάδες αντίστροφου μήκους, και πιο συγκεκριμένα σε cm^{-1} . Αυτό σημαίνει ότι το γινόμενο $a \cdot F$ παριστάνει την ενέργεια που απορροφάται από το υλικό, ανά μονάδα όγκου του υλικού. Η αύξηση αυτή λαμβάνει χώρα για όσο διαρκεί ο παλμός.

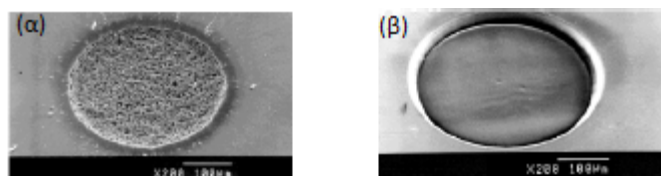
Στο φωτοθερμικό μηχανισμό, το κατώφλι φωτοαποδόμησης F_{th} δεν είναι συγκεκριμένο. Αυτό ισχύει επειδή, στην παραπάνω Εξίσωση (2.36), η μέγιστη επιτεύξιμη θερμοκρασία T είναι γραμμική συνάρτηση της πυκνότητας ενέργειας F . Κάτι τέτοιο σημαίνει ότι ο ρυθμός αποδόμησης ανά παλμό θα δίνεται από την παρακάτω σχέση αναλογίας:

$$K : \frac{\Delta E_{activ,abl.}}{R \cdot F(T)} \text{ ή } K = C \cdot \frac{\Delta E_{activ,abl.}}{R \cdot F(T)} \quad (2.37)$$

όπου $\Delta E_{activ,abl.}$ η μεταβολή της ενέργειας ενεργοποίησης (activation energy) για τη φωτοαποδόμηση (ablation), $F(T)$ η, εξαρτώμενη από τη θερμοκρασία, πυκνότητα ενέργειας Laser και C πραγματική σταθερά.

Μέσω του φωτοθερμικού μηχανισμού επεξηγούνται δύο βασικά χαρακτηριστικά της φωτοαποδόμησης:

- *Σχεδόν γραμμική αύξηση του όγκου του απομακρυνόμενου υλικού.* Η αύξηση αυτή είναι συνάρτηση της έντασης του Laser και θεωρείται γενικά μία από τις σημαντικότερες ενδείξεις του μηχανισμού αυτού. Πρέπει όμως να τονίσουμε ότι, κατά την ανάλυση της εξάρτησης, οι τιμές για τη μεταβολή της ενέργειας ενεργοποίησης για την αποδόμηση, $\Delta E_{activ,abl.}$, διαφέρουν, τις περισσότερες φορές σημαντικά, από τις θερμοδυναμικές τιμές, όπως είναι η ενέργεια διάσπασης και η ενέργεια εξάχνωσης.
- *Μικρότερο κατώφλι αποδόμησης για υποστρώματα με μικρή ενέργεια συνοχής (cohesion energy), αλλά και ομοιομορφία επιφάνειας για την ακτινοβολούμενη περιοχή.* Μάλιστα, εάν η περιοχή αυτή παρατηρηθεί με γυμνό μάτι, θα δώσει την εντύπωση στον παρατηρητή ότι έχει περάσει στην υγρή φάση (ότι δηλαδή έχει επέλθει τοπική τήξη). Για του λόγου το αληθές, παραθέτουμε στη συνέχεια το Σχήμα 2.7., η οποία αφορά το τμήμα επιφάνειας ενός ακτινοβολημένου πολυμερούς, του πολυκαρβονυλίου (PEC), μετά την επενέργεια 15 παλμών Laser πάνω στο στόχο. Η ακτινοβολήση έλαβε χώρα με ένα Excimer Laser XeCl, μήκους κύματος 308 nm και πυκνότητας ενέργειας 7.8 J/cm². Στο Σχήμα 2.7.[α] εμφανίζεται η περίπτωση του καθαρού PEC, χωρίς προσμίξεις, ενώ στο Σχήμα 2.7.[β] εμφανίζεται η αντίστοιχη περίπτωση για το Polyester Carbonate-PEC, στο οποίο η απορρόφηση στο χρησιμοποιούμενο μήκος ακτινοβολίας είναι μεγαλύτερη. Πράγματι, στην περίπτωση [β] δίνεται η πλασματική εντύπωση στον παρατηρητή ότι η ακτινοβολημένη επιφάνεια έχει υποστεί τήξη, κάτι που συμβαίνει λόγω της ομοιομορφίας που έχει αποκτήσει η επιφάνεια. Πάντως είναι σύνηθες, στην περίπτωση του φωτοθερμικού μηχανισμού, να παρατηρείται μία «περιοχή λιωμένου υλικού», παρόμοια με αυτή που εμφανίζεται στην περίπτωση [β].



Σχήμα 2.7. Φωτογραφίες οπών που έχουν σχηματιστεί σε ακτινοβολημένο δείγμα πολυκαρβονυλίου (PEC).

Όταν ο συντελεστής απορρόφησης του υλικού, στο μήκος κύματος που χρησιμοποιείται, είναι χαμηλός, τότε η ακτινοβολούμενη περιοχή του υλικού παρουσιάζει εξαιρετικά ανώμαλη επιφάνεια. Μάλιστα, στο εσωτερικό τις επιφάνειες διακρίνονται φυσαλίδες, οι οποίες θεωρείται ότι περιέχουν κάποιο αέριο, όπως π.χ. O₂, CO ή CO₂. Όταν όμως ο συντελεστής απορρόφησης στο χρησιμοποιούμενο μήκος κύματος είναι υψηλός, τότε οι άκρες της δημιουργούμενης οπής, αλλά και η ακτινοβολούμενη επιφάνεια γενικά, είναι εξαιρετικά ομαλές και ομοιόμορφες. Η διαφορά στην έκταση των αλλαγών οφείλεται στις μεταβολές της τιμής του μεγέθους *θερμική διαχυσιμότητα* (thermal diffusivity), συναρτήσει του συντελεστή απορρόφησης. Πιο συγκεκριμένα, η έκταση της *θερμικά επηρεαζόμενης ζώνης* (*Heat-Affected Zone, HAZ*), δηλαδή της περιοχής στην οποία λαμβάνει χώρα η αύξηση της θερμοκρασίας και στην οποία ενδέχεται να λάβει χώρα θερμική καταστροφή, δίνεται από την παρακάτω σχέση (2.38):

$$HAZ = 2\sqrt{Dt} \quad (2.38)$$

όπου D η θερμική διαχυσιμότητα του υλικού και t το χρονικό διάστημα στο οποίο η ενέργεια μπορεί να διαχυθεί. Αν παραδεχτούμε ότι η ενέργεια (θερμότητα) διαχέεται μόνο καθόσον διαρκεί ο παλμός, τότε έχει αποδειχθεί, μέσω πειραματικών μελετών για τυπικές τιμές D , ότι η θερμικά επηρεαζόμενη ζώνη έχει έκταση μεταξύ 1.5 και 25 μm . Κατά συνέπεια, μία πιθανώς υψηλή τιμή του *βάθους οπτικής διείσδυσης* (optical penetration depth) είναι ενδεικτική της εμφάνισης θερμικής καταστροφής σε μεγάλο βάθος μέσα στο στόχο. Επομένως, οι μορφολογικές παρατηρήσεις μπορούν να παρέχουν ενδείξεις για φωτοθερμικό μηχανισμό, αλλά επηρεάζονται από τις οπτικές και άλλου είδους ιδιότητες του υλικού, με αποτέλεσμα να μην αποτελούν βασικό αποδεικτικό στοιχείο για την εμφάνιση του φωτοθερμικού μηχανισμού.

Προκειμένου να κατανοήσουμε καλύτερα τη διαδικασία της θερμικής διάσπασης των δεσμών, θα πρέπει να επιλύσουμε το πρόβλημα της θερμικής αγωγιμότητας, στην περίπτωση κατά την οποία το υλικό υπόκειται σε θερμική αποσύνθεση. Η θερμική εξίσωση συνήθως περιγράφεται με τη μορφή της ενθαλπίας που αναπαριστά κατάλληλα την αλλαγή φάσης καθώς το υλικό τήκεται. Θεωρώντας κίνηση της διεπιφάνειας κατά τον άξονα των z , το παραπάνω πρόβλημα περιγράφεται από την ακόλουθη διαφορική εξίσωση:

$$\frac{\partial H}{\partial t} - u \frac{\partial H}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \frac{\partial (Ie^{-az})}{\partial z}, \quad H(T) = \rho \int_{T_0}^T C(T') dT' \quad (2.39)$$

Η κύρια οριακή συνθήκη για την παραπάνω εξίσωση είναι η απώλεια ενέργειας στην επιφάνεια, λόγω εκτίναξης του υλικού:

$$k \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = D \frac{\partial H}{\partial z} \Big|_{z=0} = u \left[\Delta H_{vap} - H_s + H^v(T_s) \right] \quad (2.40)$$

Όπου (για τις 2.39 και 2.40):

- v ο ρυθμός απομάκρυνσης του υλικού,
- k η θερμική αγωγιμότητα,
- D ο συντελεστής θερμικής διάχυσης.
- Ο όρος μέσα στην αγκύλη, $\Delta H_{vap} - H_s + H^v(T_s)$, εκφράζει τη διαφορά ενθαλπίας μεταξύ ατμών και συμπυκνωμένης φάσης, ή αλλιώς το άθροισμα της ενθαλπίας στο υπόστρωμα της διεπιφάνειας και της ενθαλπίας ατμών:

$$H_v^s = \rho \int_{T_s}^{T_b} c_p^{(v)}(T') dT' \quad (2.41)$$

2.6.2. Φωτοχημικός μηχανισμός (Photochemical Mechanism)

Η απλούστερη εκδοχή του φωτοχημικού μηχανισμού παραδέχεται ότι η φωτοαποδόμηση είναι αποτέλεσμα της διάσπασης πολλών δεσμών. Γνωρίζουμε ότι κατά τη διάσπαση ενός μορίου της μορφής A-B, το ποσό της ενέργειας του φωτονίου, που υπερβαίνει την ενέργεια του δεσμού, κατανέμεται υπό μορφή κινητικής και εσωτερικής ενέργειας στα θραύσματα A και B. Οι κινητικές ενέργειες των θραυσμάτων αυτών είναι τόσο υψηλές, που ουσιαστικά τείνουν να φέρουν το υλικό προς την αέρια κατάσταση. Αν N_b ο αριθμός των διασπόμενων μορίων και ϕ η κβαντική απόδοση της διάσπασης, τότε θα ισχύει η ακόλουθη σχέση:

$$N_b = \phi(I_0 - I) = \phi I_0 (1 - e^{-\alpha x}) \quad (2.42)$$

Σύμφωνα με το μηχανισμό αυτό, όταν η ένταση I_0 υπερβεί μία συγκεκριμένη τιμή, σχηματίζεται ένας εξαιρετικά υψηλός αριθμός θραυσμάτων. Οι δυνάμεις που εξασκούν αυτά τα θραύσματα είναι αρκετές ώστε να υπερβούν τις δυνάμεις συνοχής μεταξύ των μορίων του υλικού, κάτι που θα έχει ως αποτέλεσμα την εκτίναξή του. Με βάση τα παραπάνω, το βάθος του υλικού που εκτινάσσεται, δ , προσεγγίζεται με τη βοήθεια της ακόλουθης λογαριθμικής σχέσης:

$$\delta = \alpha^{-1} \ln \left(\frac{F}{F_{th}} \right) \quad (2.43)$$

όπου α ο συντελεστής απορρόφησης των σωματιδίων, F η πυκνότητα ενέργειας του Laser και F_{th} το κατώφλι πυκνότητας ενέργειας.

Λαμβάνοντας τώρα υπόψη τις πιο εξελιγμένες εκδοχές του φωτοχημικού μηχανισμού, προτείνεται από διάφορους ερευνητές ότι, κατά την ακτινοβόληση διαφόρων υλικών, ιδιαίτερα των πολυμερών, τα θραύσματα που διασπώνται από τις πολυμερικές αλυσίδες αντιδρούν και σχηματίζουν αέριες ενώσεις,

όπως π.χ. CH₄ ή CO, οι οποίες καταλαμβάνουν μεγαλύτερο όγκο σε σχέση με τις αρχικές ομάδες, όταν η εξέταση του όγκου γίνεται κάτω από τις ίδιες συνθήκες θερμοκρασίας T και πίεσης P . Κατά συνέπεια, σε αυτή την περίπτωση, οι δυνάμεις που οδηγούν στην εκτίναξη του υλικού οφείλονται όχι τόσο στην αρχική κινητική ενέργεια των θραυσμάτων, όπως καταδεικνύει η απλή εκδοχή του φωτοχημικού μηχανισμού, αλλά πολύ περισσότερο στις εσωτερικές πιέσεις που αναπτύσσουν τα παραγόμενα αέρια προϊόντα κατά τη διαστολή τους. Μέσω των εξελιγμένων εκδοχών του φωτοχημικού μηχανισμού μπορεί κατά βάση να εξηγηθεί η παρατήρηση ότι, σε διάφορα συστήματα, κυρίως οργανικών υγρών και πολυμερών, το κατώφλι αποδόμησης δε συμβαδίζει με το σημείο βρασμού αυτών των ενώσεων. Θεωρούμε γενικά ότι η απευθείας φωτοχημική διάσπαση των δεσμών παίζει πολύ σημαντικό ρόλο στη διαδικασία της φωτοαποδόμησης, τουλάχιστον στην περίπτωση χρήσης ακτινοβολίας μικρού μήκους κύματος (κυρίως από 200 nm και κάτω). Σε αυτά τα μήκη κύματος, η ενέργεια των φωτονίων είναι αρκετά υψηλή, με αποτέλεσμα η απορρόφηση ενός ή δύο φωτονίων από τα μόρια του ακτινοβολούμενου υλικού να οδηγεί αρχικά σε διάσπαση δεσμών και, στη συνέχεια, στο σχηματισμό πτητικών μοριακών φωτοπροϊόντων. Όταν όμως το μήκος κύματος της ακτινοβολίας είναι μεγαλύτερο, και μάλιστα μεγαλύτερο από τα 300 nm, η ενέργεια ενός φωτονίου δεν επαρκεί για τη διάσπαση δεσμών. Σε αυτή την περίπτωση, θα πρέπει να εξεταστεί η πιθανότητα διαδικασιών διφωτονιακής ή πολυφωτονιακής απορρόφησης.

Τέλος, ένα ζήτημα που θα πρέπει επίσης να ληφθεί υπόψη, στα πλαίσια της εξέτασης του φωτοχημικού μηχανισμού, είναι η σχέση ανάμεσα στις θερμικές και τις φωτοχημικές διεργασίες. Κατά τη διάρκεια του παλμού, η θερμοκρασία του υποστρώματος αυξάνεται. Η αύξηση αυτή θα πρέπει όμως να επηρεάζει και τις φωτοχημικές διεργασίες. Κατά συνέπεια, το φαινόμενο αυτό δεν μπορεί να αποδοθεί αποκλειστικά στην επίδραση των φωτοθραυσμάτων.

2.6.3. Φωτομηχανικός μηχανισμός (*Photomechanical Mechanism*)

Η έννοια του φωτοχημικού μηχανισμού έχει σχέση με την απότομη διαστολή της περιοχής που επηρεάζεται από την ακτινοβολία Laser, λόγω της μεγάλης και ταχύτατης αύξησης της θερμοκρασίας που αυτή προκαλεί. Το περιβάλλον υλικό δεν προλαβαίνει να προσαρμοστεί σε αυτή την αλλαγή του όγκου, κάτι που θα έχει ως αποτέλεσμα την ανάπτυξη ισχυρών απωστικών δυνάμεων στη θερμικά επηρεαζόμενη ζώνη, επιφέροντας εντέλει την εκτίναξη του υλικού πριν από την τήξη του [95][96]. Το μέγεθος των τάσεων αυτών εξαρτάται από τη σχέση μεταξύ του ρυθμού εναπόθεσης της ενέργειας και του χαρακτηριστικού χρόνου μηχανικής ισορροπίας του όγκου που απορροφάται, τ_s . Όταν ο παλμός Laser διαρκεί λιγότερο ή έχει συγκρίσιμη διάρκεια με το χρόνο που απαιτείται για να επέλθει «μηχανική»

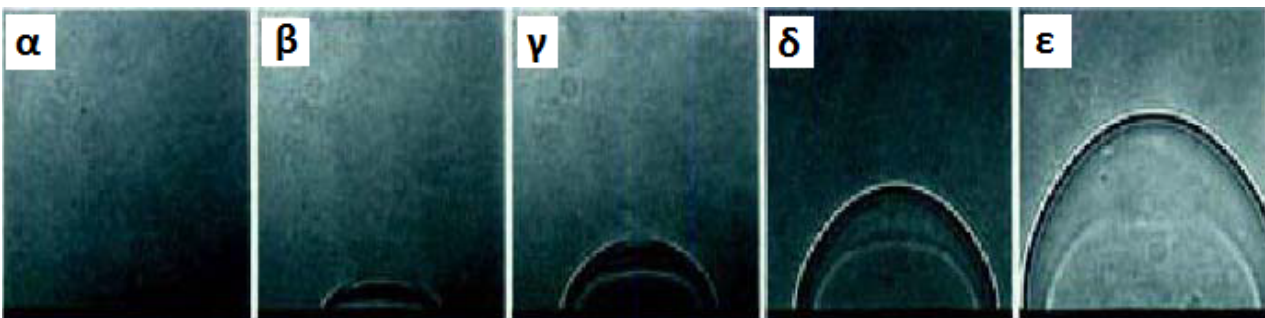
ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

ισορροπία μέσα στον όγκο που απορροφάται, η θέρμανση που λαμβάνει χώρα θεωρείται μία σχεδόν ισόχωρη (ισόογκη) μεταβολή, κάτι που έχει ως συνέπεια την ανάπτυξη υψηλής θερμοελαστικής πίεσης. Η παραπάνω συνθήκη είναι ευρέως γνωστή ως *συνθήκη αδρανούς περιορισμού ή περιορισμού υπό πίεση* (αγγλ. όρος: *Inertial or Stress Confinement*) και μπορεί να εκφραστεί από την παρακάτω Σχέση (2.44):

$$\tau_{pulse} < \tau_{ac} - \frac{L_p}{c_s} \quad (2.44)$$

Στη σχέση αυτή, c_s είναι η ταχύτητα του ήχου στο ακτινοβολούμενο υλικό και L_p το βάθος διείσδυσης της ακτινοβολίας Laser σε αυτό. Μία σειρά από διεξαχθέντες αναλυτικούς υπολογισμούς έχουν δείξει ότι η αναπτυσσόμενη θερμοελαστική πίεση στην περιοχή απορρόφησης μπορεί να οδηγήσει σε αρκετά ισχυρές τάσεις που είναι ικανές ακόμα και να «κατακερματίσουν», κατά κάποιον τρόπο, το εύθραυστο υλικό. Η συνένωση των σχηματιζόμενων μικρορωγμών ή κοιλοτήτων σε όλη τη γύρω ακτινοβολούμενη περιοχή μπορεί συνακόλουθα να οδηγήσει στη μηχανική διάσπαση και εκτίναξη μεγάλων τεμαχίων υλικού, σχετικά χαμηλής θερμοκρασίας. Κατά την κοινή λογική, η παραπάνω διαδικασία θα μπορούσε να πραγματοποιηθεί με αρκετά χαμηλότερη πυκνότητα ενέργειας από την αντίστοιχη που απαιτείται για εξάτμιση. Λόγω της αλλαγής στον όγκο, πραγματοποιείται «γένεση» ωστικών κυμάτων (shock wave generation), τα οποία διαδίδονται στο υλικό. Σε προηγούμενες έρευνες, η ανάπτυξη ωστικών κυμάτων κατά τη φωτοαποδόμηση με Laser έχει προσδιοριστεί με χρήση πιεζοηλεκτρικών κρυστάλλων/ανιχνευτών.

Το παρακάτω Σχήμα 2.8. απεικονίζει μία περίπτωση κατά την οποία ένα πολυμερές ακτινοβολείται με nanosecond παλμό Laser. Στα επιμέρους στιγμιότυπα [α] έως [ε] εμφανίζεται η απεικόνιση του σχηματιζόμενου και αναπτυσσόμενου ωστικού κύματος ορισμένα ns μετά την αρχική επίδραση του παλμού πάνω στο πολυμερές:



Σχήμα 2.8. Συνεχής απεικόνιση του ωστικού κύματος κατά την ακτινοβολήση πολυμερούς Kapton, με παλμό πυκνότητας ενέργειας 4.5 J/cm^2 . Χρόνος μετά την έναρξη του παλμού: α) 50 ns, β) 100 ns, γ) 200 ns, δ) 400 ns, ε) 700 ns.

Τα φωστικά κύματα μπορούν επίσης να παραχθούν από την ανάκρουση της εκτινασόμενης στήλης υλικού. Οι έως τώρα διεξαχθείσες έρευνες δεν έχουν ακόμα προσδιορίσει κατά πόσο ευθύνονται για την εκτίναξη του υλικού. Με βάση τις έρευνες που έχουν γίνει, μπορούμε να διακρίνουμε τρεις πηγές «γένεσης» αυτών των κυμάτων:

Πηγή 1^η: Σχετίζεται με την οπισθο-ανάκρουση που ασκείται κατά την εκτίναξη του υλικού. Αυτό επιφέρει ένα κύμα συμπίεσης που διαδίδεται προς το υπόστρωμα. Ο τρόπος με τον οποίο μεταβάλλεται επακριβώς το πλάτος του κύματος εξαρτάται από το χρόνο εκτίναξης του υλικού και τη φύση της διαδικασίας. Πράγματι, το φαινόμενο της επιφανειακής εξάτμισης επιφέρει την εκτίναξη μεγάλου όγκου του υλικού. Η εξίσωση που μπορεί να περιγράψει με βέλτιστο τρόπο τα παραπάνω είναι η ακόλουθη εξίσωση κίνησης του πιστονιού:

$$P_{\max} \propto \left[\frac{(\gamma_{\text{air}} + 1)\rho_{\text{air}}}{2} \right]^{\frac{1}{3}} \left[\frac{1}{f/2 + 1} \right]^{\frac{2}{3}} \left[\frac{F_L - F_0}{\tau_{\text{pulse}}} \right]^{\frac{2}{3}} \quad (2.45)$$

Όπου:

- P_{\max} το μέγιστο πλάτος του κύματος συμπίεσης,
- F_0 η πυκνότητα της παραμένουσας ενέργειας στο υπόστρωμα υπό μορφή θερμότητας,
- $f = \frac{2c_v}{R}$ με c_v την ειδική μοριακή θερμότητα των ιδανικών αερίων.

Επειδή, για υψηλότερες πυκνότητες ενέργειας, η φωτοαποδόμηση με Laser οδηγεί στην εκπομπή πλάσματος, η Σχέση (2.45) απλοποιείται σημαντικά και μετασχηματίζεται στην ακόλουθη μορφή:

$$P_{\max} \propto F^{\frac{3}{4}} \quad (2.46)$$

Πηγή 2^η: Σχετίζεται με το γεγονός ότι η γρήγορη εναπόθεση θερμότητας από το Laser οδηγεί σε αύξηση της πίεσης, η οποία είναι ανάλογη της πυκνότητας ενέργειας F και του συντελεστή Grüneisen Γ , και εκφράζεται μέσω της ακόλουθης σχέσης:

$$\Delta P = \Gamma a F_L \left(\frac{1 - e^{-\theta}}{\theta} \right) = \frac{\beta a F_L}{\rho k_T c_v} \left(\frac{1 - e^{-\theta}}{\theta} \right) \quad (2.47)$$

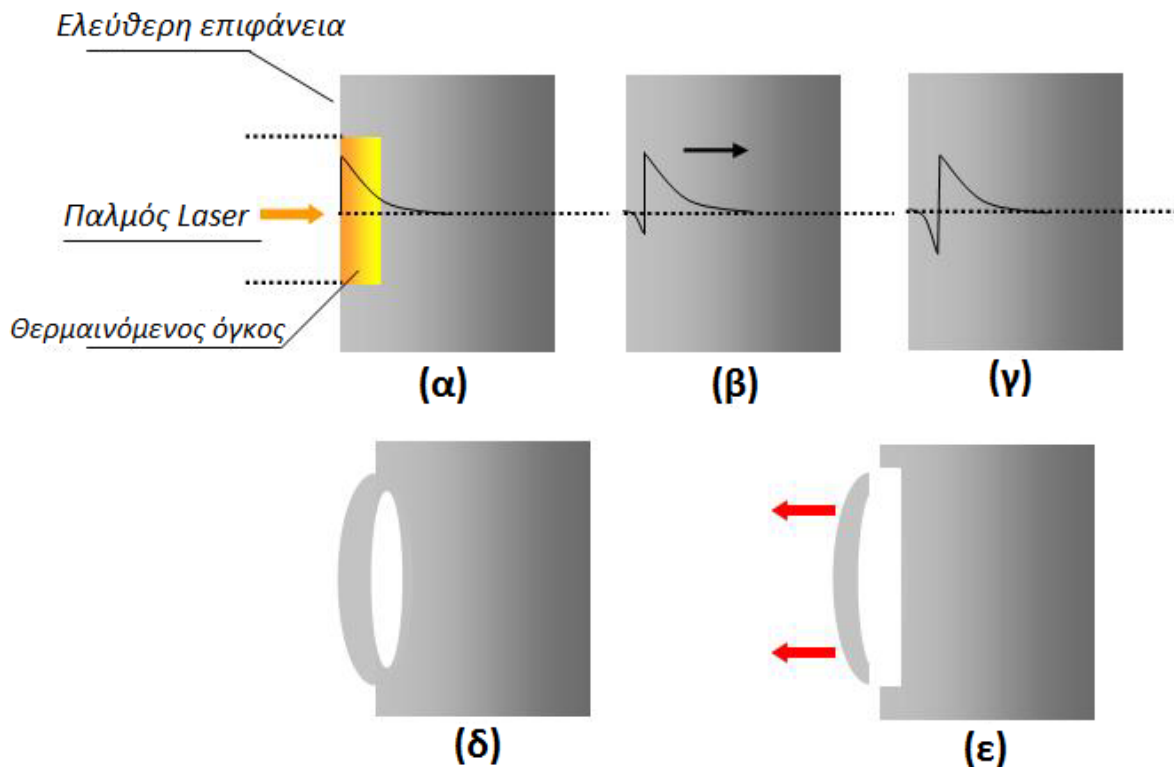
Ο συντελεστής Grüneisen, Γ , εκφράζει την εσωτερική πίεση ανά μονάδα πυκνότητας ενέργειας, η οποία δημιουργείται κατά την εναπόθεση ενέργειας υπό σταθερό όγκο. Στην παραπάνω σχέση 2.47:

- β είναι ο συντελεστής θερμικής διαστολής,
- c_v είναι η θερμοχωρητικότητα ανά σταθερό όγκο,
- k_T είναι ο συντελεστής ισοθερμικής συμπίεστικότητας και

- $\theta = \frac{\tau_{pulse}}{\tau_{ac}}$, όπου τ_{ac} ο χρόνος που απαιτείται ώστε ένα ακουστικό κύμα να διασχίσει τον ακτινοβολούμενο όγκο.

Ο παράγοντας $\frac{1-e^{-\theta}}{\theta}$ παίζει το ρόλο συντελεστή διόρθωσης της ελάττωσης στο πλάτος της πίεσης. Η

ελάττωση αυτή οφείλεται στη διάδοση του κύματος εκτός του ακτινοβολούμενου όγκου, κατά τη διάρκεια του παλμού. Λόγω της πίεσης επάγεται ένα κύμα που διαδίδεται ακτινικά, και του οποίου η επίδραση αμελείται όταν η διάμετρος της δέσμης είναι μεγαλύτερη από το βάθος οπτικής διείσδυσης. Εκτός του παραπάνω κύματος επάγονται και άλλα δύο επίπεδα κύματα που διαδίδονται στον άξονα της δέσμης. Το ένα κατευθύνεται προς τον κυρίως όγκο (bulk) του υλικού και καλείται *κύμα συμπίεσης*, ενώ το άλλο κατευθύνεται προς την ελεύθερη επιφάνεια του υλικού και καλείται *κύμα αποσυμπίεσης*. Το κύμα αποσυμπίεσης που διαδίδεται προς την ελεύθερη επιφάνεια υφίσταται μία σταδιακή αύξηση του πλάτους, η οποία οφείλεται στη διαφορετική ακουστική εμπέδηση ($\rho \cdot c_s$) του μέσου από τον αέρα. Όταν η διαφορά πλάτους των κυμάτων λάβει μια κρίσιμη τιμή, επέρχεται αρχικά αποκόλληση και στη συνέχεια εκτίναξη του «κρύου» υλικού από την κυρίως επιφάνεια. Η παραπάνω διαδικασία περιγράφεται σχηματικά από το Boyd [95], με τη βοήθεια του παρακάτω Σχήματος 2.9.:



Σχήμα 2.9. [α] Η εναπόθεση θερμικής ενέργειας επιφέρει τη δημιουργία ενός κύματος συμπίεσης και ενός κύματος αποσυμπίεσης. [β] Το πλάτος του κύματος αποσυμπίεσης αυξάνεται με το βάθος. [γ] Σε κάποιο

βάθος, η ενέργεια του κύματος υπερβαίνει την ενέργεια συνοχής του υλικού. [δ] Αποκόλληση του υλικού.
[ε] Εκτίναξη του υλικού.

Πηγή 3¹: Σχετίζεται με τη δημιουργία φυσαλίδων, οι οποίες δημιουργούνται από το σχηματισμό αερίων προϊόντων με βάση το φωτοθερμικό ή το φωτοχημικό μηχανισμό.

2.6.4. Εκρηκτικός βρασμός (Explosive Boiling)

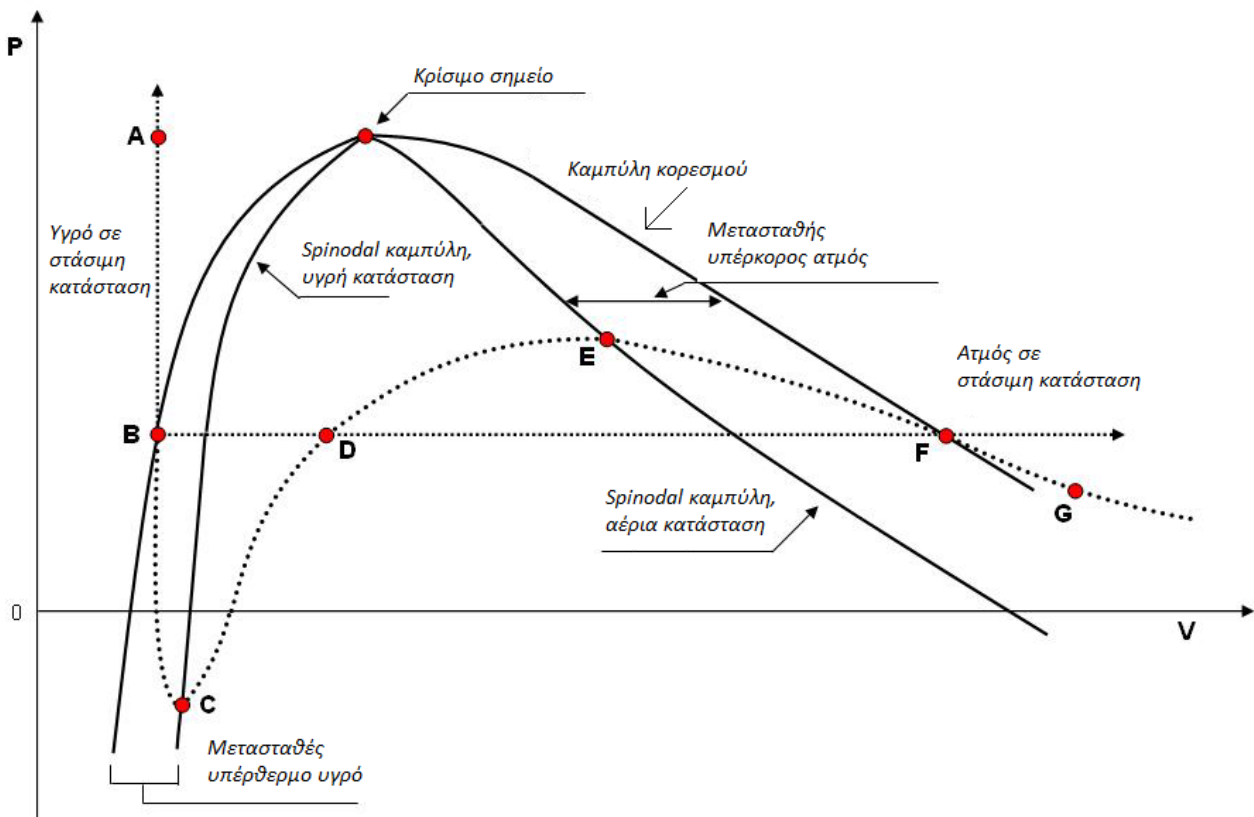
2.6.4.1. Γενικά για τον εκρηκτικό βρασμό

Ορισμένοι ερευνητές έχουν προτείνει ότι τα χαρακτηριστικά της φωτοαποδόμησης μπορούν να αντιστοιχούν σε μία αλλαγή φάσης εκτός ισορροπίας, η οποία ονομάζεται *εκρηκτικός βρασμός*. Σε αυτή την περίπτωση, εισάγεται ακόμα ένα κριτήριο μέσω του οποίου μπορεί να καθοριστεί ότι η εκτίναξη του υλικού γίνεται είτε λόγω θερμικής αποπροσρόφησης είτε λόγω φωτοαποδόμησης. Με άλλα λόγια, το κριτήριο καθορίζει ότι ο ρυθμός σχηματισμού των ομογενών φυσαλίδων ανταγωνίζεται το ρυθμό εξαέρωσης, ή ακριβέστερα, το ρυθμό *ψύξης μέσω εξαέρωσης* (evaporative cooling).

Σύμφωνα με τη Θερμοδυναμική Gibbs, η συμπυκνωμένη φάση καθορίζεται από δύο όρια: την καμπύλη ισορροπίας πίεσης – θερμοκρασίας (P, T) για το υγρό και το αέριο, που ονομάζεται *binodal* γραμμή, καθώς επίσης και το σύνορο της θερμοδυναμικής σταθερότητας της υγρής φάσης, που καλείται *spinodal* γραμμή. Η συνθήκη που καθορίζει τη θέση και την έκταση της spinodal καμπύλης είναι η ακόλουθη:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = 0 \quad (2.48)$$

Το παρακάτω Σχήμα 2.10. παρουσιάζει ένα διαξονικό διάγραμμα πίεσης-όγκου (P, V), στο οποίο εμφανίζονται οι Spinodal καμπύλες και οι μετασταθείς περιοχές του διαγράμματος:



Σχήμα 2.10. Spinodal καμπύλες και μετασταθείς περιοχές ενός διαγράμματος πίεσης-όγκου (P-V).

Ανάμεσα σε αυτές τις συνοριακές συνθήκες υπάρχει μία περιοχή μετασταθούς (υπέρθερμου υγρού), η οποία, όπως βλέπουμε στο παρακάτω Σχήμα 2.10., απεικονίζεται από τα κατώτερα τμήματα των δύο σχεδόν κατακόρυφων καμπύλων αριστερά. Στη spinodal καμπύλη, η υγρή φάση δεν είναι σταθερή, ενώ ταυτόχρονα το σύστημα διασπάται αυθόρμητα σε αέρια και υγρή φάση, δηλαδή μόρια αερίου και σταγονίδια. Ακόμη, η μετασταθής κατάσταση μπορεί να εκφραστεί και με όρους φράγματος δυναμικού για το σχηματισμό φυσαλίδων, οι οποίες είναι απαραίτητες για το βρασμό. Ο σχηματισμός τους οδηγεί το σύστημα σε αύξηση της ελεύθερης ενέργειας Gibbs. Αν αυξήσουμε τη θερμοκρασία πάνω από το σημείο βρασμού, μπορούμε να πετύχουμε μία μετασταθή κατάσταση που χαρακτηρίζεται από δεδομένο ζεύγος πίεσης-θερμοκρασίας (P_0, T) . Σε αυτή την περίπτωση, η μεταβολή της ελεύθερης ενέργειας Gibbs θα δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\Delta G_K = \frac{16\pi\sigma^3}{3(\rho_v \Delta H_{vap} \beta)^2} \quad (2.49)$$

Όπου:

- ρ_v η πυκνότητα του κορεσμένου αερίου,
- ΔH_{vap} η αλλαγή της ενθαλπίας στο σημείο (P_0, T_0) ,

- $\beta = \frac{T - T_0}{T_0}$ η σχετική υπερθέρμανση του συστήματος.

Ο ρυθμός σχηματισμός φυσαλίδων, υπό την παραδοχή της *στάσιμης* κατάστασης, δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$J = J_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_k}{k_B T}\right) \quad (2.50)$$

Στην περίπτωση της φωτοαποδόμησης, εάν λάβουμε υπόψη όλα όσα ειπώθηκαν παραπάνω, παρατηρούμε ότι, για μικρούς ρυθμούς θέρμανσης, δε λαμβάνει χώρα σε έντονο βαθμό υπερθέρμανση του υλικού, αφού πρακτικά ολόκληρη η θερμική ενέργεια καταναλώνεται για το σχηματισμό φυσαλίδων (περίπτωση *συνήθους βρασμού*). Αντίθετα, όταν έχουμε υψηλούς ρυθμούς θέρμανσης, κάτι που συμπίπτει συνήθως με την περίπτωση χρήσης Laser για τη φωτοαποδόμηση, ο χρόνος που απαιτείται για το σχηματισμό και τη διάχυση των φυσαλίδων είναι σαφώς μεγαλύτερος. Σε αυτή την περίπτωση, η αύξηση της θερμοκρασίας είναι πολύ γρήγορη και συντελεί σε τελική θερμοκρασία πολύ υψηλότερη από το σημείο βρασμού. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα η διαδικασία της ομαλής επιφανειακής εξάτμισης που παρατηρείται συνήθως να μετατρέπεται σε μία διαδικασία *εκρηκτικής εξάτμισης* ή *έκρηξης φάσης* (phase explosion), για υψηλές τιμές της πυκνότητας ενέργειας. Επακόλουθο της διαδικασίας αυτής είναι η αυθόρμητη διάσπαση της εκτινασόμενης στήλης πλάσματος που έχει εκπεμφθεί λόγω της φωτοαποδόμησης, σε ένα σύστημα δύο φάσεων, που αποτελείται από μόρια αερίου και υγρά σταγονίδια.

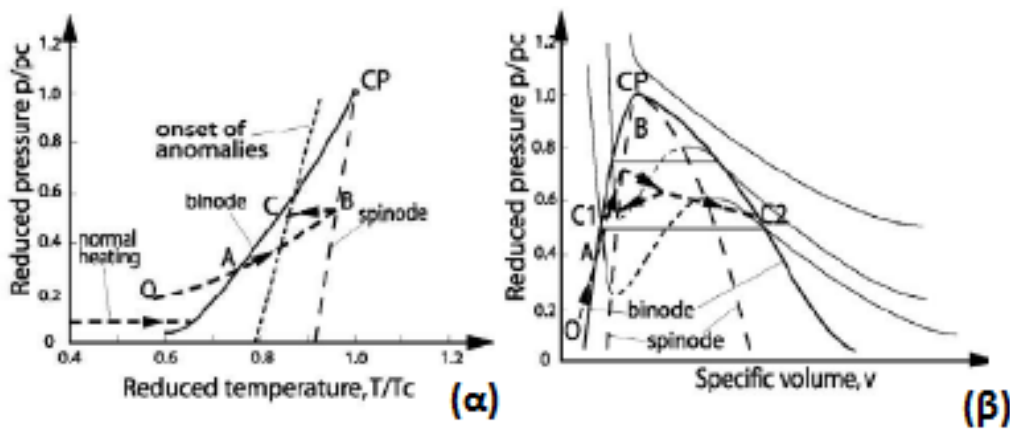
Ως χαρακτηριστικό της φωτοαποδόμησης, η εκτίναξη του υλικού παρατηρείται για πυκνότητες ενέργειας που βρίσκονται τουλάχιστον στην περιοχή των 100 mJ/cm^2 . Αντίθετα, η οπτική εξέταση στη επιφάνεια του υλικού δείχνει ότι η επίδραση πυκνοτήτων ενέργειας στην περιοχή των $40\text{-}50 \text{ mJ/cm}^2$ προκαλεί τήξη πάνω στην επιφάνεια. Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε εντέλει ότι η *φωτοαποδόμηση* παρατηρείται σε θερμοκρασίες πολύ υψηλότερες της θερμοκρασίας τήξης του υλικού. Επίσης συμπεραίνουμε ότι ο εκρηκτικός βρασμός είναι υπεύθυνος για τη φωτοαποδόμηση των στερεών στα οποία τα διάφορα μόρια συνδέονται μεταξύ τους με διαμοριακές δυνάμεις van der Waals.

Αν θέλουμε να συνοψίσουμε λοιπόν την έννοια του εκρηκτικού βρασμού, αναφέρουμε ότι ο *εκρηκτικός βρασμός* λαμβάνει χώρα όταν ένα υγρό υπερθερμαίνεται σε θερμοκρασίες όπου η πίεση κορεσμού είναι μεγαλύτερη από αυτή που ασκείται πάνω στο υγρό.

2.6.4.2. Θεωρία σχηματισμού φυσαλίδων

Σε αυτό το Εδάφιο θα αναφερθούμε συνοπτικά στις θερμοδυναμικές έννοιες που χαρακτηρίζουν τη θεωρία σχηματισμού φυσαλίδων, οι οποίες είναι υπεύθυνες για την εμφάνιση του φαινομένου του εκρηκτικού βρασμού (explosive boiling). Μέσα από την ανάλυση αυτής της θεωρίας θα είμαστε σε θέση να υπολογίσουμε θεωρητικά τις χαρακτηριστικές ποσότητες που σχετίζονται με αυτή. Προκειμένου να υπολογίσουμε τις ανωτέρω ποσότητες, θα βασιστούμε πάνω στο ακόλουθο Σχήμα 3.11., στο οποίο παρουσιάζεται η εξέλιξη της διαδικασίας εκρηκτικής αλλαγής φάσης (*explosive phase change*), σε διαγράμματα πίεσης-θερμοκρασίας (P-T) και πίεσης-όγκου (P-V). Για να είμαστε πιο ακριβείς, το μέγεθος της πίεσης παριστάνεται στα διαγράμματα υπό τη μορφή *ανηγμένης* πίεσης ως προς μία τιμή αναφοράς, $\frac{P}{P_C}$, αυτό της θερμοκρασίας ως *ανηγμένη* θερμοκρασία $\frac{T}{T_C}$ και αυτό του όγκου ως *ειδικός*

όγκος $\nu = \frac{V}{m} = \frac{1}{\rho}$. Σημειώνεται εδώ ότι, κατά τα γνωστά από τη Θερμοδυναμική, τα ανηγμένα μεγέθη πίεσης και θερμοκρασίας είναι *αδιάστατα*.



Σχήμα 2.11. Διαγράμματα εκρηκτικής αλλαγής φάσης [α] στο πεδίο P-T, [β] στο πεδίο P-V.

Τα βασικότερα χαρακτηριστικά της θερμοδυναμικής των φάσεων μπορούν να παρατηρηθούν στο παραπάνω διάγραμμα P-T. Το *τριπλό σημείο* (triple point) είναι εκείνο στο οποίο η στερεή, η υγρή και η αέρια φάση βρίσκονται σε μεταξύ τους ισορροπία. Πάνω στην binodal καμπύλη, η υγρή και η αέρια φάση βρίσκονται σε θερμοδυναμική ισορροπία, κάτι που σημαίνει ότι οι δύο φάσεις χαρακτηρίζονται από ισοδύναμα χημικά δυναμικά, $\mu = \mu_l$. Η πίεση του αερίου, συναρτήσει της θερμοκρασίας, για

συγκεκριμένα μεγέθη αναφοράς (P_0, T_0) και διαφορά ενθαλπίας ΔH , μπορεί να προσδιοριστεί με τη βοήθεια της εξίσωσης Clausius-Clapeyron [97][98]:

$$P = P_0 \exp \left[-\frac{\Delta H}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right] \quad (2.51)$$

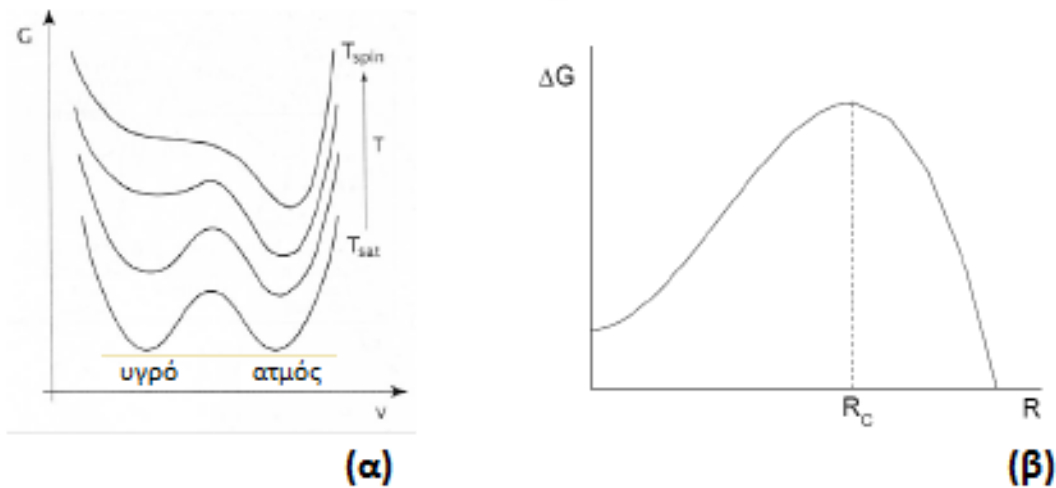
Η binodal καμπύλη καταλήγει στο κρίσιμο σημείο (CP / Critical Point, βλ. Σχήμα 2.11.), πάνω από το οποίο η υγρή και η αέρια φάση δεν παρουσιάζουν μεταξύ τους διαφορές. Παρ'όλα αυτά, ο Gibbs καθώς και άλλοι μεταγενέστεροι επιστήμονες, υποστήριξαν ότι η binodal καμπύλη δεν αποτελεί το όριο ύπαρξης της υγρής φάσης, αλλά ότι η υγρή φάση μπορεί να διατηρηθεί, ως μετασταθή κατάσταση, και σε περιοχές χαρακτηριζόμενες από συγκεκριμένη πίεση και θερμοκρασία T μεγαλύτερη από τη θερμοκρασία κορεσμού, T_{sat} . Η καμπύλη που ορίζει το όριο σταθερότητας της υγρής φάσης είναι η *spinodal*. Το όριο σταθερότητας καθορίζεται από τις παρακάτω συνθήκες (2.52) και (2.53):

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = 0 \quad (2.52)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial S} \right)_P = 0 \quad (2.53)$$

Όμως, οι συνθήκες (2.52) και (2.53), κατά τα γνωστά από τη Θερμοδυναμική, είναι αδύνατο να ισχύουν ταυτόχρονα. Πέρα από τη spinodal καμπύλη, το υπέρθερμο υγρό δεν είναι πλέον σταθερό, κάτι που σημαίνει ότι η υγρή φάση διαχωρίζεται «αυθόρμητα» σε αέριο και υγρά σταγονίδια [99]. Το σημείο τομής της binodal και της spinodal καμπύλης είναι το κρίσιμο σημείο (CP), ενώ ανάμεσα στις δύο καμπύλες υπάρχει μία περιοχή υπέρθερμου υγρού σε μετασταθή κατάσταση.

Προκειμένου να κατανοήσουμε καλύτερα τα παραπάνω, θα εξετάσουμε εδώ το πώς μεταβάλλεται η ελεύθερη ενέργεια Gibbs του συστήματος σε διάφορες θερμοκρασίες, συναρτήσει του όγκου V (Σχήμα 2.12[α]) και της ακτίνας της φυσαλίδας, R (Σχήμα 2.12[β]):



Σχήμα 2.12. [α] Εξάρτηση της ελεύθερης ενέργειας Gibbs από τον (ειδικό) όγκο v . [β] Εξάρτηση της μεταβολής της ελεύθερης ενέργειας Gibbs από την ακτίνα της φυσαλίδας, R .

Όταν η θερμοκρασία είναι ίση με τη θερμοκρασία κορεσμού, η ελεύθερη ενέργεια Gibbs έχει δύο ελάχιστες τιμές, οι οποίες αντιστοιχούν στο κορεσμένο υγρό και στον κορεσμένο ατμό (βλ. Σχήμα 2.12[α]). Παρατηρώντας το Σχήμα αυτό, διαπιστώνουμε ότι η ίδια τιμή ελεύθερης ενέργειας Gibbs G για τα δύο ελάχιστα καταδεικνύει το ότι η υγρή και η αέρια φάση βρίσκονται σε ισορροπία (κάτι που φαίνεται και από τα σημεία A, C στο Σχήμα 2.11[α]). Για συγκεκριμένη πίεση P και θερμοκρασία T υψηλότερη από αυτή που αντιστοιχεί στην binodal καμπύλη, η αέρια κατάσταση προτιμάται, κάτι που φαίνεται από το γεγονός ότι το τοπικό ελάχιστο που αντιστοιχεί στο αέριο είναι μικρότερο από το αντίστοιχο του υγρού, δηλαδή $\mu_g < \mu_l$ [99]. Όμως, προκειμένου να γίνει εφικτή η μετάβαση από την υγρή στην αέρια κατάσταση, θα πρέπει να ξεπεραστεί ένα φράγμα δυναμικού. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι ανασταλτικός παράγοντας για τη μετατροπή από την υγρή φάση στην αέρια είναι η επιφανειακή τάση (surface tension). Η ύπαρξη του φράγματος δυναμικού είναι ακριβώς ο λόγος εκείνος για τον οποίο το υγρό εμφανίζεται σε μετασταθή κατάσταση. Όσο αυξάνεται η θερμοκρασία, τόσο ελαττώνεται η επιφανειακή τάση και, κατά συνέπεια, το φράγμα δυναμικού για τη δημιουργία της φυσαλίδας. Όταν η θερμοκρασία έχει φτάσει το όριο της spinodal καμπύλης, T_{spin} , το φράγμα δυναμικού μηδενίζεται, με αποτέλεσμα το υπέρθερμο υγρό να μη βρίσκεται πια σε μετασταθή αλλά σε ασταθή κατάσταση.

Η εμφάνιση μιας νέας φάσης απαιτεί τη δημιουργία μιας διεπιφάνειας. Ειδικότερα για την περίπτωση του βρασμού, η αέρια φάση θα εμφανιστεί με τη μορφή εμβρυικών φυσαλίδων πολύ μικρού μεγέθους, μέσα στη μετασταθή φάση. Οι μικρές αυτές φυσαλίδες σχηματίζονται ως αποτέλεσμα τυχαίων διακυμάνσεων της πυκνότητας του υλικού, ενώ στη συνέχεια μεγαλώνουν ή υφίστανται κατάρρευση

(collapse). Ο ρυθμός ανάπτυξης των φυσαλίδων μπορεί να ποσοτικοποιηθεί με τη βοήθεια της θεωρίας της *ομογενούς πυρήνωσης*, η οποία, στην κλασική της μορφή, έχει διατυπωθεί από τους Volmer και Weber. Η θεωρία αυτή αποτέλεσε βάση για την προσπάθεια ποσοτικοποίησης του φαινομένου του εκρηκτικού βρασμού από διάφορους ερευνητές, όπως είναι οι Brennen [98], Blander και Katz [99].

2.7. Το φαινόμενο του Plasma Shielding: Βασικά χαρακτηριστικά και ανάλυση

2.7.1. Γενικά

Το *plasma shielding* είναι ένα φαινόμενο που παίζει πολύ σημαντικό ρόλο στην ανάλυση του φαινομένου της φωτοαποδόμησης μεταλλικών στόχων με Laser. Όπως αναφέραμε και σε προηγούμενο Εδάφιο, το πλάσμα που δημιουργείται λόγω της εξάχνωσης (μετάβασης στην *αέρια φάση*) ατόμων του στόχου, τα οποία θερμαίνονται από την προσπίπτουσα ακτινοβολία Laser, θερμαίνεται και διαστέλλεται με τη σειρά του από τους επόμενους παλμούς Laser που προσπίπτουν, δημιουργώντας με αυτό τον τρόπο μία «ασπίδα προστασίας» για την άνω επιφάνεια του υλικού. Η ύπαρξη του πλάσματος προκαλεί την ελάττωση της ενέργειας κάθε επόμενου παλμού Laser (δηλαδή, κάθε παλμού εκτός του *πρώτου* κατά σειρά) που προσπίπτει στο στόχο. Αυτή η ελάττωση της ενέργειας οδηγεί τελικά σε ελάττωση του ρυθμού αύξησης της θερμοκρασίας του στόχου από παλμό σε παλμό, επηρεάζοντας με αυτό τον τρόπο το ρυθμό φωτοαποδόμησης, άρα και τη συνολική απόδοση και ποιότητα του φαινομένου. Διάφορες μελέτες έχουν ασχοληθεί ενδελεχώς με το ζήτημα του plasma shielding, καθ'ότι η δημιουργία και η διαστολή του πλάσματος αποτελούν μαζί ένα από τα βασικά στάδια της πλήρους διαδικασίας φωτοαποδόμησης μεταλλικών στόχων με Laser. Οι πιο σημαντικές μελέτες, από τις οποίες θα αντλήσουμε σημαντικά ποιοτικά και ποσοτικά στοιχεία που θα μας βοηθήσουν να αναπαραστήσουμε αξιόπιστα το φαινόμενο στην παρούσα ανάλυσή μας, είναι οι [26], [28], [69] και [156]. Μάλιστα, η πρώτη και η τελευταία μελέτη, από τους Bulgakov & Bulgakova και από τους Liu & Zhang αντίστοιχα, δίνουν ιδιαίτερη έμφαση στη φωτοαποδόμηση στόχων με *nanosecond laser*, τα οποία θα μας απασχολήσουν στο υπολογιστικό και πειραματικό μέρος της μελέτης μας, όπως θα φανεί και από τα Κεφάλαια 5 έως 7.

Το πρώτο πράγμα που πρέπει να έχουμε κατά νου στη διάρκεια μελέτης του φαινομένου, είναι το γεγονός ότι ένας nanosecond παλμός laser συνήθως συνοδεύεται από το σχηματισμό πλάσματος *χαμηλής θερμοκρασίας*, στο οποίο ενδέχεται να απορροφηθεί ένα σημαντικό τμήμα της ενέργειας του Laser. Αυτό το φαινόμενο επηρεάζει, εκτός από την απόδοση και την ποιότητα της φωτοαποδόμησης, και τα χαρακτηριστικά της σχηματιζόμενης στήλης πλάσματος. Για την περίπτωση των nanosecond παλμών Laser μέτριας έντασης, στην περιοχή μεταξύ 1-10 J/cm² [26], η τοπική εξάχνωση του στόχου

συνοδεύεται και από τη δημιουργία πλάσματος χαρακτηριστικής θερμοκρασίας της τάξης των 10^4 K. Το γεγονός ότι, κατά τη διάρκεια ενός παλμού, οι παράμετροι που καθορίζουν το οπτικό πάχος του πλάσματος, όπως είναι η πυκνότητα ηλεκτρονίων, η θερμοκρασία και το μέγεθος του νέφους πλάσματος, διαφοροποιούνται χαρακτηριστικά καθόσον διαρκεί ο παλμός. Στη μελέτη αυτή, γίνεται μία συνοπτική αναφορά σε προγενέστερα μοντέλα, όπως το [76], τα οποία δεν απαιτούν τη λεπτομερή γνώση των χαρακτηριστικών φωτοαποδόμησης προκειμένου για τη διερεύνηση των χαρακτηριστικών απορρόφησης του πλάσματος, όπως π.χ. του συντελεστή απορρόφησης α , αλλά παρ'όλα αυτά μπορούν να χρησιμοποιηθούν μόνο σε περιορισμένες περιπτώσεις εάν εκληφθεί ότι ο συντελεστής απορρόφησης δεν εξαρτάται από το χρόνο ή ότι η θερμοκρασιακή κατανομή στο πλάσμα είναι εξολοκλήρου ομοιόμορφη. Προφανώς, στην περίπτωση παραδοχής του αντιθέτου (χρονοεξαρτώμενος συντελεστής α ή ανομοιόμορφη θερμοκρασιακή κατανομή), το πρόβλημα της διερεύνησης των επιδράσεων του plasma shielding παρουσιάζει σαφώς αυξημένο βαθμό πολυπλοκότητας. Επιπλέον, στην περίπτωση των παλμών μέτριας έντασης (κυρίως υπέρυθρης ακτινοβολίας, όπου παίζει σημαντικό ρόλο το φαινόμενο της αντίστροφης ακτινοβολίας πέδησης), ο συντελεστής απορρόφησης του πλάσματος χαμηλής θερμοκρασίας εξαρτάται έντονα από τη θερμοκρασία, με αποτέλεσμα ακόμα και η σε μικρό βαθμό θέρμανση του πλάσματος να οδηγήσει σε έντονη απορρόφηση της ακτινοβολίας, κάτι που, με τη σειρά του, προκαλεί ακόμα εντονότερη θέρμανση του πλάσματος κ.ο.κ..

Το μοντέλο των Bulgakov και Bulgakova έχει ως σκοπό να εκτιμήσει την απορρόφηση ακτινοβολίας στο θερμασμένο πλάσμα. Αποτελεί μιας πρώτης τάξης ευκαιρία να ποσοτικοποιήσουμε το φαινόμενο του plasma shielding και τις συνέπειες αυτού. Το συγκεκριμένο μοντέλο βασίζεται στην υπόθεση ότι μία αύξηση στην απορρόφηση, ως συνέπεια της θέρμανσης του πλάσματος, μπορεί να χαρακτηριστεί με τη βοήθεια μιας μόνο παραμέτρου, η οποία είναι η πυκνότητα της απορροφούμενης ακτινοβολίας, E_a . Καθώς ο χαρακτηριστικός χρόνος της ανταλλαγής ενέργειας μεταξύ ηλεκτρονίων και ιόντων, για θερμοκρασίες της τάξης των 10^4 K και πυκνότητες ιόντων της τάξης των 10^{19} cm⁻³, είναι πολύ μικρότερος από τις διάρκειες παλμού των nanosecond Laser, γίνεται εδώ η παραδοχή ότι η ενέργεια E_a ανακατανέμεται ακαριαία και ομοιόμορφα μεταξύ όλων των εξατμισμένων σωματιδίων. Η αύξηση της θερμοκρασίας του πλάσματος, ως αποτέλεσμα της απορρόφησης, δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\Delta T = \frac{(\gamma-1)E_a}{kN} = \frac{(\gamma-1)mE_a}{k \cdot \Delta z \cdot \rho} \quad (2.55)$$

Όπου:

- γ ο ενεργός αδιαβατικός εκθέτης,
- k η σταθερά του Boltzmann,
- N ο αριθμός των εξατμισμένων σωματιδίων (ατόμων) από μία ενιαία επιφάνεια,

- m η μάζα ενός ατόμου,
- ρ η πυκνότητα του στόχου.

Εάν τώρα γίνει η υπόθεση ότι ένας παλμός Laser, αρχικής έντασης $I_0(t)$, κατευθύνεται κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα z , με σκοπό την πρόσπτωσή του πάνω στο στόχο, τότε η ένταση της ακτινοβολίας που τελικώς θα προσπέσει στην επιφάνεια του στόχου, έπειτα από τη διέλευση αυτής διαμέσου της σχηματισμένης στήλης πλάσματος,, θα δίνεται από την παρακάτω σχέση, η οποία αναφέρεται και από τους Vasantgadkar *et al.* στη βιβλιογραφία [68]:

$$I(t) = I_0(t) \exp[-\Lambda(t)] = I_0(t) \exp\left[-\int_0^{\infty} a(n, T) dz\right] \quad (2.56)$$

Όπου:

- Λ το συνολικό οπτικό πάχος της στήλης φωτοαποδόμησης,
- $n = n(z, t)$ η αριθμητική πυκνότητα σωματιδίων,
- $T = T(z, t)$ η θερμοκρασία του πλάσματος.

Όταν η θερμοκρασία του πλάσματος είναι χαμηλή, και το πλάσμα βρίσκεται σε κατάσταση ισορροπίας, η απορρόφηση είναι ανάλογη με την πυκνότητα σωματιδίων, κάτι που σημαίνει ότι μπορεί να εκφραστεί ως γινόμενο της πυκνότητας αυτής και μίας αύξουσας με τη θερμοκρασία συνάρτησης, $f(T)$:

$$a = n \cdot f(T) \quad (2.57)$$

Αναπτύσσοντας την παραπάνω σχέση, με σκοπό να περιέχει όρους που εξαρτώνται από τη θερμοκρασιακή μεταβολή ΔT , και λαμβάνοντας υπόψη μόνο τους χρονοεξαρτούμενους όρους *πρώτης τάξης*, προκύπτει η ακόλουθη σχέση για το οπτικό πάχος της στήλης φωτοαποδόμησης:

$$\Lambda(t) = A \cdot \Delta z(t) + B \cdot E_a(t) \quad (2.58)$$

με την ποσότητα $\Delta z(t)$ να αναπαριστά το βάθος διείσδυσης ανά παλμό.

Οι συντελεστές A και B εξαρτώνται από τη θερμοκρασία εξάτμισης των σωματιδίων, T_v , και εκφράζονται ως εξής:

$$A = \frac{\rho f(T_v)}{m}, \quad B = (\gamma - 1) \left. \frac{\partial f}{\partial T} \right|_{T_v} \cdot k^{-1} \quad (2.59)$$

Κατά γενική ομολογία, η θερμοκρασία εξάτμισης των σωματιδίων εξαρτάται από το χρόνο. Όμως, στην περίπτωση των nanosecond παλμών Laser, η T_v αλλάζει ελάχιστα κατά τη διάρκεια επίδρασης του παλμού (η οποία είναι και αυτή πολύ μικρή), μην υπερβαίνοντας το 85% ή το 90% της απόλυτης κρίσιμης θερμοκρασίας του υλικού-στόχου, T_c . Παραδεχόμενοι ότι η θερμοκρασία T_v είναι σταθερή και

αντιστοιχεί σε μία χαρακτηριστική θερμοκρασία εξάτμισης, μπορούμε να λάβουμε στη συνέχεια υπόψη ότι το μέγεθος D του σημείου (ή της «κουκκίδας») ακτινοβολήσης είναι αρκετά μεγάλο, έτσι ώστε, μετά το τέλος της επενέργειας ενός παλμού, να ισχύει ότι:

$$L_z \approx \tau \left(\frac{8kT_v}{\pi m} \right)^{1/2} = L_{x,y} \approx D \quad (2.60)$$

όπου L_z και $L_{x,y}$ είναι αντίστοιχα η διαμήκης και η εγκάρσια διάσταση του νέφους εξατμισμένων σωματιδίων. Η μονοδιάστατη διαστολή αυτού του νέφους λαμβάνει χώρα κατά μήκος του επιπέδου του στόχου, ενώ ταυτόχρονα ισχύει ότι:

$$\int_0^\infty ndz \approx N = \frac{\rho \Delta z}{m} \quad (2.61)$$

Εκτιμάται [26] ότι οι θερμοκρασίες εξάτμισης της τάξης των 10^4 K, ως αποτέλεσμα της επενέργειας παλμών Laser διάρκειας περί τα 10 ns, οδηγούν στο σχηματισμό μιας κουκκίδας μεγέθους συνήθως $0.1 \leq D \leq 0.5$ [nm], με την τιμή να εξαρτάται και από την ατομική μάζα του στόχου.

Με βάση την Εξίσωση (2.58), συμπεραίνουμε ότι το στιγμιαίο ολικό οπτικό πάχος του πλάσματος, $A(t)$, είναι ανάλογο με το βάθος αποδόμησης, με αποτέλεσμα η απορροφούμενη ενέργεια να είναι μία αυτοσυνεπής ποσότητα, καθώς:

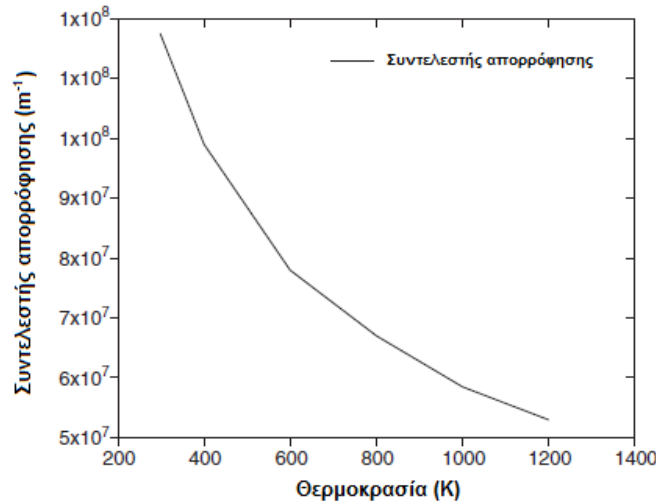
$$E_a(t) = \int_0^t I_0(t') [1 - \exp(-\Lambda(t'))] dt' \quad (2.62)$$

2.7.2. Επίδραση του Plasma Shielding σε χαρακτηριστικά ενός μεταλλικού στόχου υπό φωτοαποδόμηση

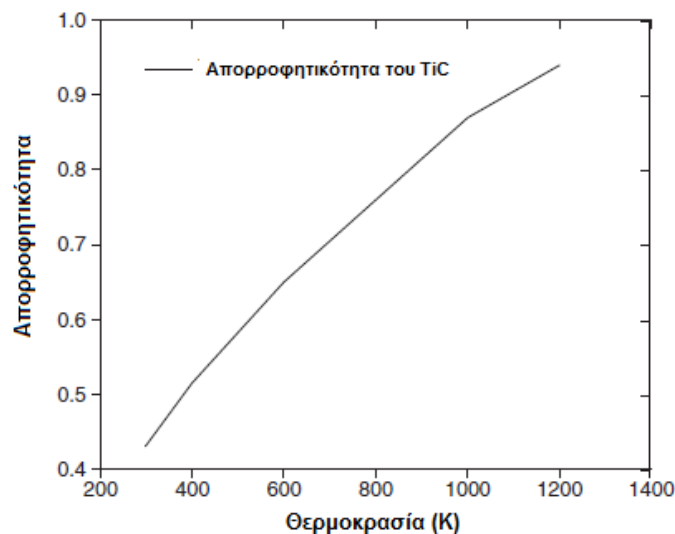
Προκειμένου για την εκτίμηση του πώς επηρεάζονται διάφορες παράμετροι, σχετικές με το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης, από το φαινόμενο του plasma shielding και την απορρόφηση μέρους της ακτινοβολίας λόγω του δημιουργούμενου νέφους πλάσματος, αξίζει να ανατρέξουμε και πάλι στη μελέτη [68], ώστε να έχουμε μία ποσοτική εικόνα για το πώς μεταβάλλεται η θερμοκρασία του στόχου συναρτήσει του χρόνου, για διαφορετικές τιμές ροής ακτινοβολίας Laser και λαμβάνοντας υπόψη ή αμελώντας το φαινόμενο του plasma shielding, καθώς επίσης και για το πώς μεταβάλλονται οι τιμές της θερμοκρασίας του πλάσματος και της απορροφούμενης από το πλάσμα ενέργειας Laser καθόσον διαρκεί η διαδικασία αφαίρεσης υλικού με Laser. Οι ενδείξεις για τις μεταβολές των παραπάνω μεγεθών προέκυψαν κατόπιν της διεξαγωγής ενός πειράματος, στο οποίο εφαρμόστηκαν διαφορετικές τιμές της ενέργειας Laser πάνω σε έναν στόχο από καρβίδιο του τιτανίου (TiC), πάνω στον οποίο προσπίπτουν nanosecond παλμοί Laser προκαλούμενοι από ένα *Excimer Laser* (σημειώνεται εδώ ότι, κατά τη διάρκεια της πειραματικής και θεωρητικής ανάλυσης που θα ακολουθήσουμε σε επόμενα κεφάλαια, το Laser που

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

θα χρησιμοποιηθεί θα είναι *Nd:YAG*). Για τη μελέτη των επιθυμητών μεταβολών, λαμβάνεται υπόψη το γεγονός ότι ο συντελεστής απορρόφησης και η απορροφητικότητα του TiC εξαρτώνται έντονα από τη θερμοκρασία, κάτι που αντικατοπτρίζεται και στα ακόλουθα Σχήματα 2.13. και 2.14.:



Σχήμα 2.13. Εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης του TiC από τη θερμοκρασία [69].

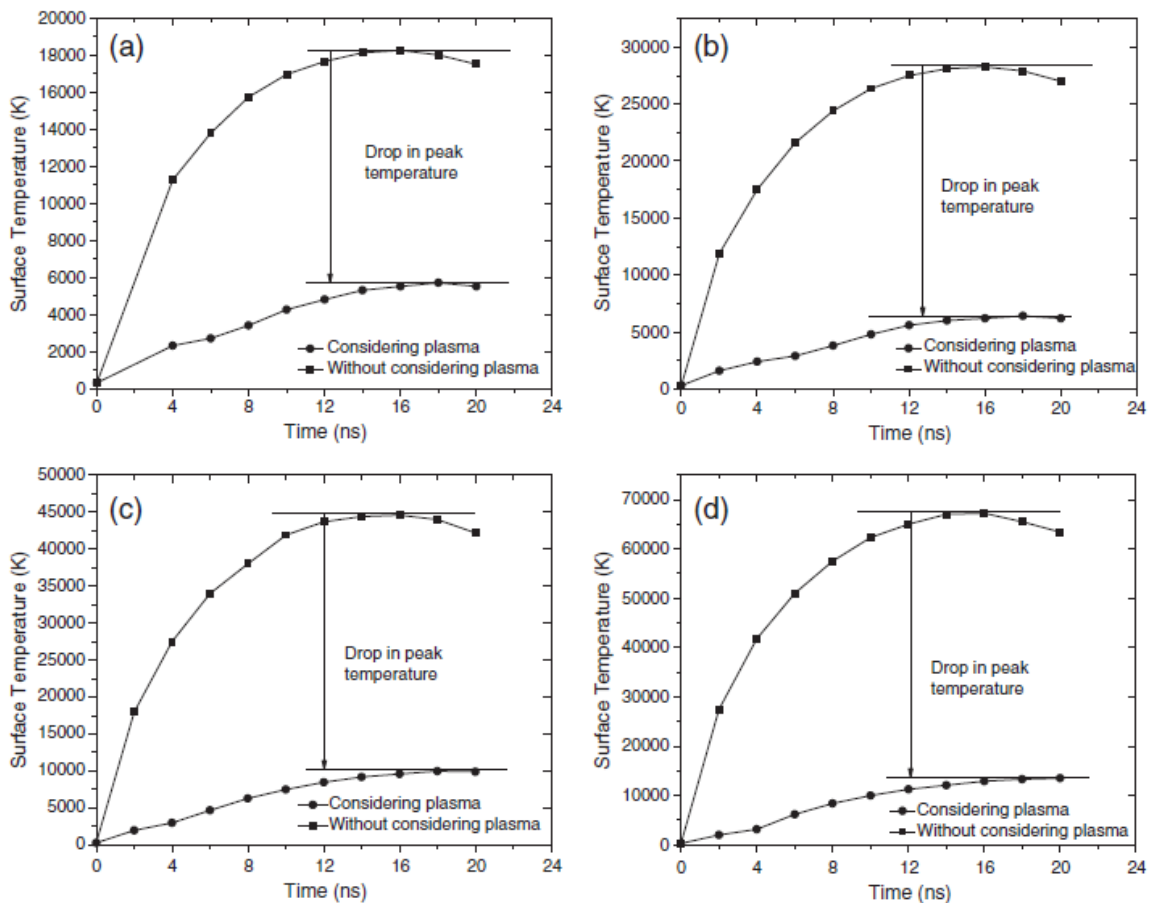


Σχήμα 2.14. Εξάρτηση της απορροφητικότητας του TiC από τη θερμοκρασία [69].

Όπως παρατηρούμε στα παρακάτω Σχήματα 2.15.[α] έως [δ], εάν εκληφθεί το φαινόμενο του plasma shielding υπόψη, η αύξηση της θερμοκρασίας με το χρόνο και, κατά συνέπεια, η μέγιστη θερμοκρασία που θα λάβει η επιφάνεια του στόχου μετά την επενέργεια του παλμού, θα είναι σαφώς χαμηλότερη από ό,τι στην περίπτωση κατά την οποία το φαινόμενο αγνοηθεί. Πιο συγκεκριμένα, εάν ληφθεί υπόψη το plasma shielding, τότε η μέγιστη (*peak*) τιμή της απόλυτης θερμοκρασίας (σε βαθμούς *Kelvin*) του στόχου πέφτει κατά 4 με 6 φορές συγκριτικά με την περίπτωση αμέλησης του φαινομένου. Η εξέλιξη της θερμοκρασίας του στόχου λόγω του Plasma Shielding μπορεί να αναλυθεί ως εξής: με την αύξηση της

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

θερμοκρασίας, αυξάνει σταδιακά ο αριθμός των εξατμιζόμενων σωματιδίων του στόχου, κάτι που, με τη σειρά του, αυξάνει την απώλεια ενέργειας στην επιφάνεια. Επίσης, η ενέργεια που απορροφάται από το πλάσμα αυξάνει σταδιακά με τη θερμοκρασία, κάτι που οδηγεί σε χαμηλότερη ροή ακτινοβολίας Laser στην επιφάνεια του στόχου, άρα και σε ελάττωση της θερμοκρασίας του. Κατά συνέπεια, συμπεραίνουμε ότι η επίδραση του plasma shielding στη φωτοαποδόμηση είναι εξέχουσας σημασίας. Για παράδειγμα, όπως θα δούμε συγκρίνοντας τα Σχήματα 2.15.[c] και 2.15.[d], η αύξηση της ροής (πυκνότητας έντασης) της ακτινοβολίας Laser από τα 10 στα 15 J/cm², αυξάνει ανάλογα (κατά 1.5 φορές) τη μέγιστη τιμή της απόλυτης θερμοκρασίας της επιφάνειας του στόχου, πηγαίνοντάς την στους 60000 K από 40000 K που ήταν πριν την αύξηση της ακτινοβολίας, εάν το φαινόμενο του plasma shielding αμεληθεί. Αντίθετα, η αύξηση της θερμοκρασίας λόγω του plasma shielding είναι σαφώς λιγότερο έντονη, με τη θερμοκρασία να μεταπίπτει από τους 8679 K στους 10520 K για τις ίδιες εξεταζόμενες περιπτώσεις.



Σχήμα 2.15. Μελέτη της μεταβολής της θερμοκρασίας στην επιφάνεια του στόχου TiC [69], αμελώντας (*without considering*) και λαμβάνοντας υπόψη (*considering*) το φαινόμενο του plasma shielding, εάν η ροή (πυκνότητα έντασης) της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας από το Excimer Laser είναι ίση με: (a) 4 J/cm², (b) 7 J/cm², (c) 10 J/cm² και (d) 15 J/cm².

2.8. Εμφάνιση κρουστικών κυμάτων (shock waves) κατά την αλληλεπίδραση της ακτινοβολίας Laser με την ύλη

Το φαινόμενο της εμφάνισης κρουστικών κυμάτων, το οποίο παρατηρείται σε συχνή βάση καθόσον η ακτινοβολία Laser επιδρά με το υλικό-στόχο στο οποίο προσπίπτει, έχει εξεταστεί διεξοδικά από διάφορους μελετητές, και πολύτιμες πληροφορίες επί του θέματος παρέχονται κατά κύριο λόγο στη βιβλιογραφία [16]. Τα βασικότερα στοιχεία της μελέτης αυτής εμφανίζονται στην παρούσα Υποενότητα.

Είναι πολύ σημαντικό, στα πλαίσια της μελέτης της φωτοαποδόμησης, να διερευνήσουμε τα χαρακτηριστικά της «δυναμικής» (όπως αποκαλείται στη βιβλιογραφία [16]) εξέλιξη των κρουστικών κυμάτων. Αυτά παρατηρούνται κατά κύριο λόγο ως συνέπεια του *περιβάλλοντος αερίου* στο οποίο γίνεται η κατεργασία. Η ιδανική κατάσταση, στην οποία δεν παρατηρείται ο σχηματισμός κρουστικών κυμάτων, είναι αυτή στην οποία η κατεργασία γίνεται *υπό κενό*. Σημαντικό είναι να αναφερθεί ότι και άλλες διεργασίες συνοδεύουν το σχηματισμό κρουστικών κυμάτων, όπως είναι η επιβράδυνση, εξασθένηση και θερμοποίηση των τηγμένων σωματιδίων, τα φαινόμενα θερμικής διάχυσης και επανασύνδεσης σωματιδίων (recombination), η γένεση πολλαπλών μετώπων, η οπίσθια κίνηση της στήλης πλάσματος και το φαινόμενο *διαχωρισμού της στήλης πλάσματος* (plume splitting), επηρεάζοντας στο σύνολό τους, σε πολύ σημαντικό βαθμό, την κατεργασία αλλά και τη διαδικασία εναπόθεσης πάνω στο υλικό-υπόστρωμα, ειδικά όταν η διαδικασία φωτοαποδόμησης με παλμικό Laser χρησιμοποιείται ως τμήμα της παλμικής εναπόθεσης με Laser (Pulsed Laser Deposition – PLD) για εργαστηριακές και βιομηχανικές εφαρμογές.

Ορίζουμε τα *κρουστικά κύματα* (shock waves) ως ταχείες μηχανικές μεταβατικές διαταραχές, που προκαλούνται από έντονες κρούσεις ή εκρήξεις σχετιζόμενες με την πολύ γρήγορη αύξηση στην πίεση και τη θερμοκρασία. Εναλλακτικά, θεωρούμε ότι τα κρουστικά κύματα είναι αποτέλεσμα μίας αυξανόμενης υδροδυναμικής αντίδρασης μεταξύ της στήλης πλάσματος και του αερίου περιβάλλοντος, λαμβάνοντας μεγάλη σημασία όταν η μάζα του περιβάλλοντος αερίου είναι συγκρίσιμη με αυτή της στήλης.

Η μελέτη της εμφάνισης κρουστικών κυμάτων έχει γίνει από διάφορους ερευνητές πριν τη σύνταξη της μελέτης [16]. Καταρχήν, οι Bulgakov και Bulgakova (1995) [171] ασχολήθηκαν με την ανάλυση πολλαπλών κρουστικών κυμάτων. Σε μελέτη που δημοσιεύτηκε το 1998 έδωσαν ιδιαίτερη προσοχή στην αναλογία μεταξύ μιας στήλης πλάσματος και ενός ατελώς διεσταλμένου στρώματος αερίων ατόμων κινούμενων με υπερηχητική ταχύτητα. Οι Le *et al.* (2000) [172] βάσισαν τη μελέτη τους στα φυσικά φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα κατά τη διαστολή του πλάσματος μέσω Laser, μέσω αριθμητικής προσομοίωσης. Πιο συγκεκριμένα, ανέπτυξαν ένα μοντέλο που λαμβάνει υπόψη του τη διάχυση

θερμότητας και τη μεταφορά της μέσω αγωγής, το ιζώδες και πιθανές επιδράσεις ιονισμού. Τέσσερα χρόνια αργότερα (το 2004), οι Zhang και Gogos [173] εξήγησαν, σε μελέτη τους, την επίδραση του αερίου περιβάλλοντος και της έντασης του Laser στη φωτοαποδόμηση. Κοινό στοιχείο των παραπάνω μελετών είναι το γεγονός ότι δεν αναφέρονται ρητά στο σχηματισμό κρουστικών κυμάτων, τη διάδοση και εξασθένησή τους, την αντίδραση του κρουστικού κύματος με τη στήλη φωτοαποδόμησης, την επίδραση του βάθους οπτικής απορρόφησης σε αυτό, ή την επίδραση άλλων παραγόντων όπως το πλάτος του παλμού Laser, η πυκνότητα ενέργειάς του και το είδος του περιβάλλοντος αερίου, γι' αυτό το λόγο και δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν με επάρκεια προκειμένου να περιγράψουν τα φαινόμενα σχηματισμού κρουστικών κυμάτων.

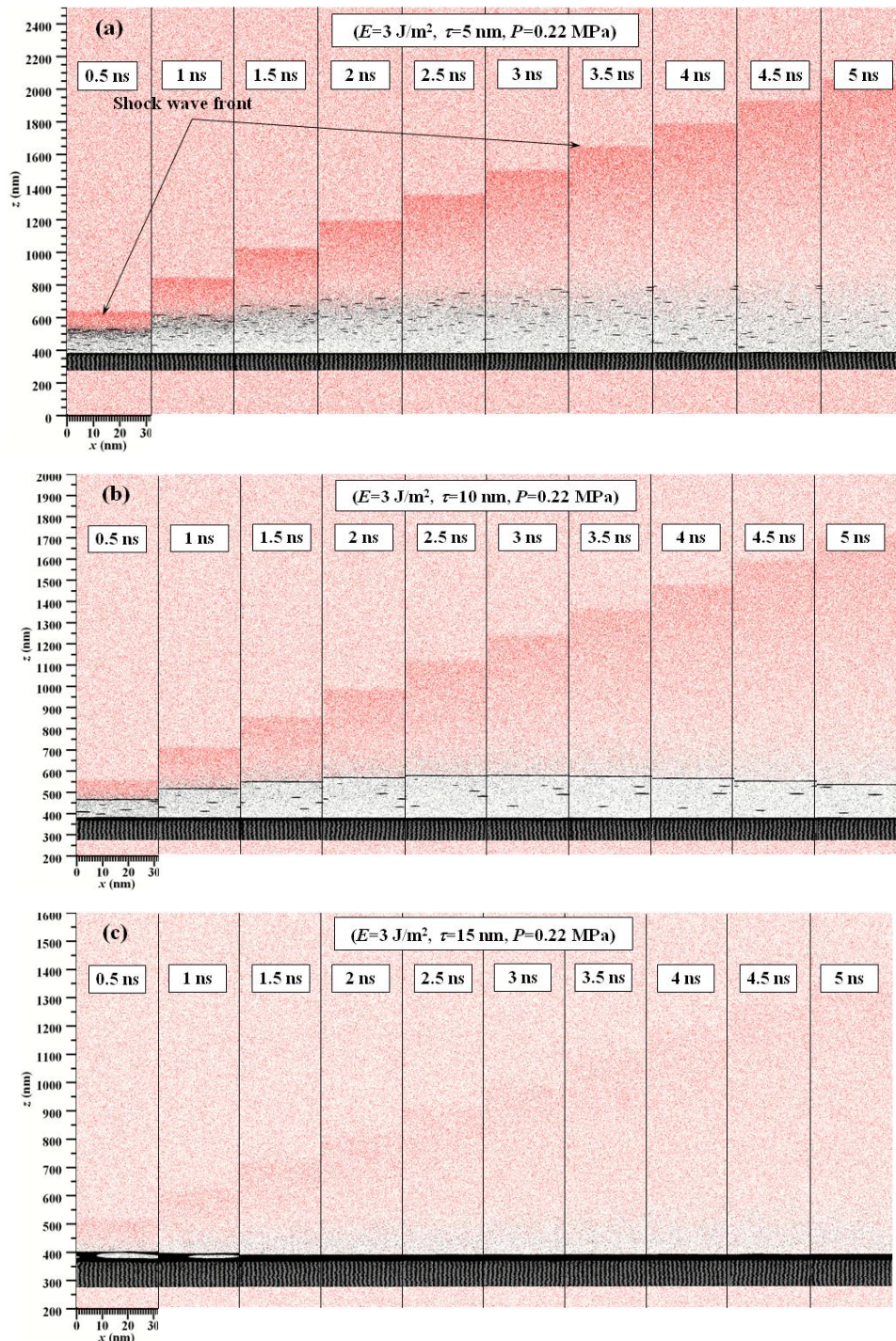
2.8.1. Γενική εικόνα του σχηματισμού και της εξέλιξης των κρουστικών κυμάτων

Σύμφωνα με τα γραφόμενα στη μελέτη [16] και τα οποία ανταποκρίνονται σε πραγματικές συνθήκες κατεργασιών φωτοαποδόμησης, η πραγματοποίηση της κατεργασίας σε εξωτερικό περιβάλλον αερίου αποσκοπεί στο να βελτιώσει σημαντικά τα επιθυμητά χαρακτηριστικά των υλικών και της τελικής επιφάνειάς τους. Η κύρια επίδραση που ασκεί το περιβάλλον αέριο, σε συνδυασμό με τα δημιουργούμενα κρουστικά κύματα, έχει να κάνει με τη δυναμική συμπεριφορά της στήλης πλάσματος που απορρέει από τη διαδικασία φωτοαποδόμησης, ενώ μία σειρά από θεωρητικές αλλά και πειραματικές μελέτες έχουν διεξαχθεί με σκοπό να διερευνήσουν τις επιδράσεις των κρουστικών κυμάτων στο υλικό (με βάση τα παραπάνω). Δύο από τις κυριότερες ανήκουν τόσο στους Bulgakov *et al.* [174], οι οποίοι έδωσαν έμφαση στα παλμικά χαρακτηριστικά της διαστολής της στήλης πλάσματος και παρατήρησαν ταλαντώσεις σήματος μορφής «χρόνου πτήσης» (Time-of-Flight, ToF) λόγω της γένεσης πρωτογενών και δευτερογενών κρουστικών κυμάτων κατά την αλληλεπίδραση της στήλης πλάσματος με το περιβάλλον αέριο, όσο και στους Leboeuf *et al.* [175], οι οποίοι διερεύνησαν θεωρητικά το φαινόμενο της διάσπασης της στήλης (plume splitting) σε αέρια περιβάλλοντος χαμηλής πίεσης. Παρά το γεγονός ότι υπάρχουν πολλές διαθέσιμες πειραματικές και θεωρητικές μελέτες πάνω στα φαινόμενα σχηματισμού κρουστικών κυμάτων κατά τη φωτοαποδόμηση με Laser, δεν έχει γίνει επαρκής εξέταση του φαινομένου των δευτερογενών κρουστικών κυμάτων (και του σχηματισμού τους υπό μορφή εσωτερικών κυμάτων, σε ατομιστικό επίπεδο) στη βιβλιογραφία.

Ο σχηματισμός κρουστικών κυμάτων έχει διερευνηθεί στη βιβλιογραφία [16] με βάση μία κατάσταση κατά την οποία η ενέργεια του Laser ανά μονάδα επιφάνειας ισούται με 3 J/m^2 , το βάθος απορρόφησης λαμβάνει μεταβλητές τιμές μεταξύ 5, 10 και 15 nm και η πίεση του περιβάλλοντος αερίου είναι ελάχιστα μεγαλύτερη των 2 ατμοσφαιρών. Τα αποτελέσματα πάνω στα οποία εξήχθησαν τα τελικά συμπεράσματα

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

παρουσιάζονται διαγραμματικά στα Σχήμα 2.16. [a] έως [c] και απεικονίζονται στο επίπεδο $x-z$ σε διαφορετικές χρονικές στιγμές.



Σχήμα 2.16. Σύγκριση στιγμιοτύπων σχετικά με τη δυναμική του σχηματισμού και της εξέλιξης κρουστικών κυμάτων, για πυκνότητα ενέργειας Laser 3 J/m^2 και πίεση 0.22 MPa , σε τρία διαφορετικά βάθη απορρόφησης: (a) 5 nm , (b) 10 nm , (c) 15 nm . Το μαύρο χρώμα αντιπροσωπεύει το υλικό-στόχο και το κόκκινο το περιβάλλον αέριο.

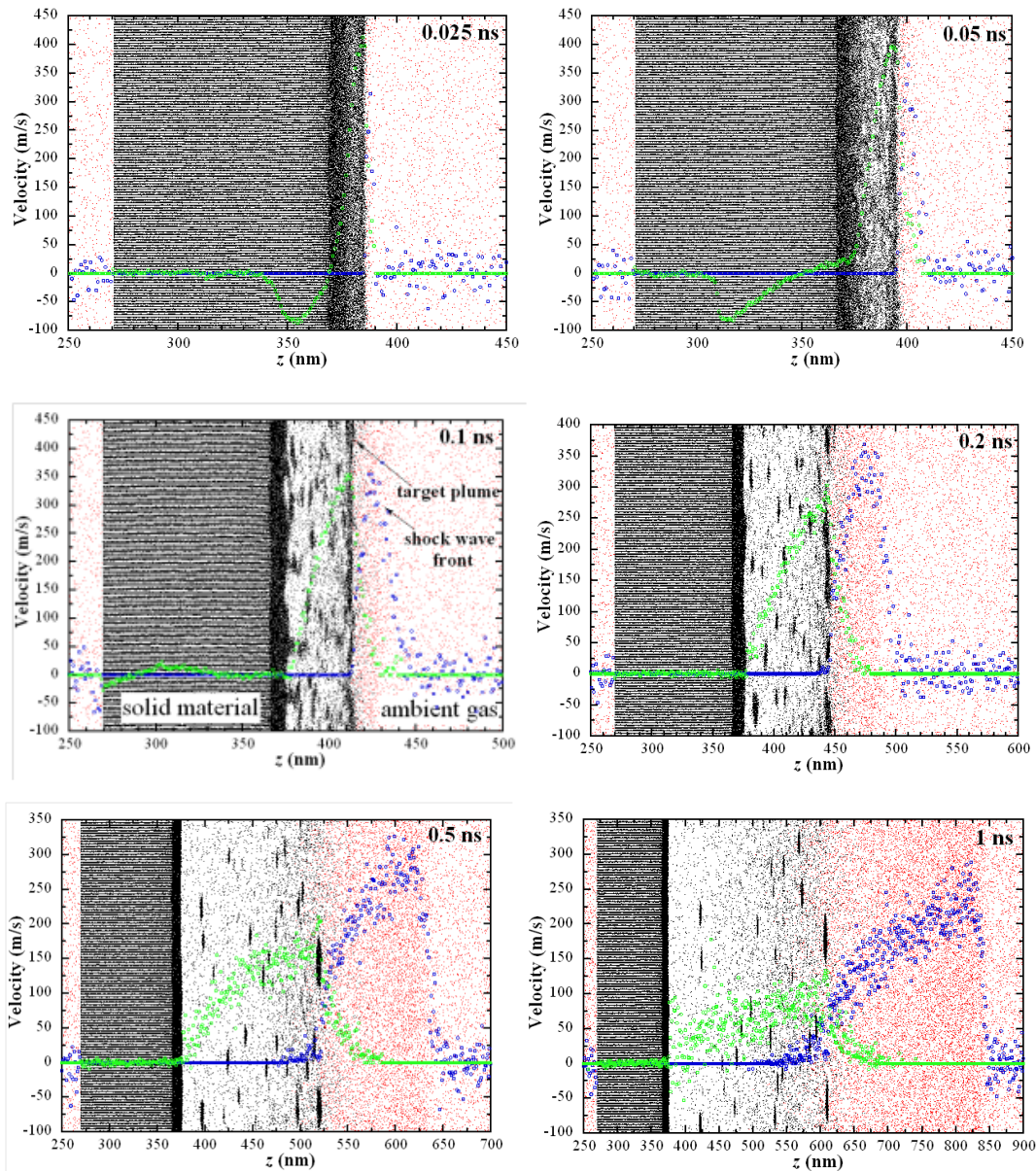
Από το παραπάνω Σχήμα έχουμε αρκετά πράγματα να παρατηρήσουμε. Καταρχήν, στα 0.5 ns εμφανίζεται μία περισσότερο πυκνή περιοχή με κόκκινο χρώμα, η οποία αναπαριστά το μέτωπο διαστολής του κρουστικού κύματος (εμφανίζεται στο Σχήμα με *βέλη*). Η εφαρμοζόμενη δέσμη Laser αναγκάζει το υλικό του στόχου να εξατμιστεί, επειδή η έντασή της (ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας) ξεπερνά το κατώφλι φωτοαποδόμησης για το υλικό, οδηγώντας στη γένεση ενός εμφανώς ισχυρού κρουστικού κύματος, αποτελούμενου από ένα στρώμα συμπιεσμένου αερίου, ευρισκόμενο σε γειτονική θέση πάνω από το στόχο.

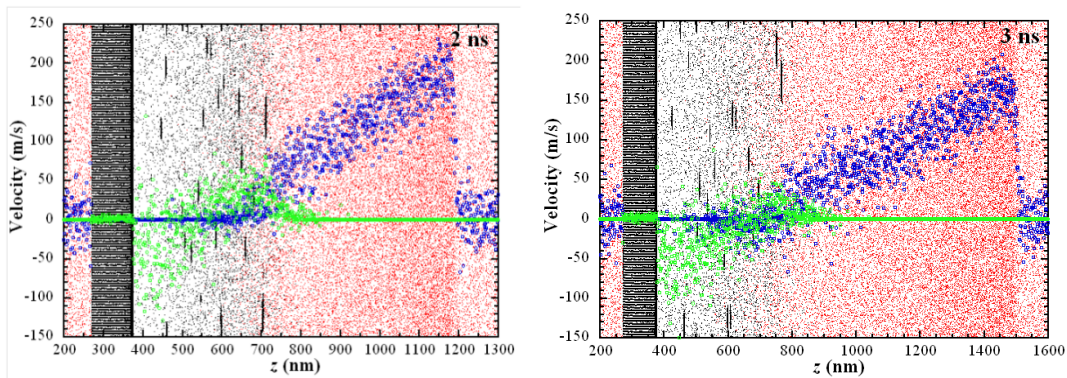
Στα αρχικά στάδια, η εκτοπισμένη δέσμη, η οποία προκαλείται από την υψηλή πίεση που κυρίως οφείλεται στην έντονη έκρηξη φάσης, κινείται προς τα μπροστά και διαστέλλεται εντός της περιοχής του περιβάλλοντος αερίου, μέχρι να σταματήσει ο παλμός να εκπέμπεται. Σε επόμενα στάδια της φωτοαποδόμησης, δημιουργούνται συσσωματώματα νανο-σωματιδιακής μορφής, κυρίως λόγω έκρηξης φάσης και συμπύκνωσης. Όταν η στήλη υψηλής ενέργειας διαδίδεται διαμέσου του αερίου περιβάλλοντος, παίζει ολοένα και μεγαλύτερη σημασία η συσχέτιση μεταξύ στερεάς και αέριας φάσης. Περισσότερη μάζα του περιβάλλοντος αερίου αρχίζει να βρίσκεται εντός της περιοχής επιρροής του μετώπου του κρουστικού κύματος. Ταυτόχρονα, η θερμοποίηση της στήλης λαμβάνει χώρα επειδή η επιβράδυνση της ταχύτητας της στήλης οδηγεί στη μετατροπή της κινητικής της ενέργειας σε θερμική. Καθώς ο χρόνος προχωράει, το κοινό μήκος που ανήκει ταυτόχρονα στη στήλη πλάσματος και το περιβάλλον αέριο αυξάνει, λόγω της σχετικής κίνησης μεταξύ της στήλης και του αερίου. Ένα πολύ ενδιαφέρον φαινόμενο, το οποίο παρατηρείται στο Σχήμα 2.16.[a] αφορά την επιβράδυνση της χωρικής διαστολής της στήλης, σε σημαντικό βαθμό, από τη στιγμή που έχουν παρέλθει 3 ns από την έναρξη εκπομπής του παλμού και μετά. Επιπλέον, κάποια από τα σωματίδια ή συσσωματώματα της στήλης αρχίζουν να κινούνται προς τα κάτω, με κατεύθυνση την επιφάνεια του στόχου, παρά το γεγονός ότι το μέτωπο του κρουστικού κύματος συνεχίζει να διαδίδεται προς τα έξω. Αυτός ο τύπος της όπισθεν κίνησης της στήλης έχει εξεταστεί, στη βιβλιογραφία [16], μέσω Μοριακής Δυναμικής προσομοίωσης, η οποία κρίνεται επιτακτική στα πλαίσια της θεωρητικής μελέτης λόγω του μεγάλου πλήθους και εύρους υπολογισμών που απαιτείται. Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι, κατά τα χρονικά διαστήματα μεταξύ 3 και 5 ns, ορισμένα συσσωματώματα ή σωματίδια δεν κινούνται πλέον προς τα έξω, αλλά επιπλέον και αναμειγνύονται με το περιβάλλον αέριο.

2.8.2. Ταχύτητα ατόμων εντός του κρουστικού κύματος

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Ελάχιστη βιβλιογραφία είναι διαθέσιμη έως και σήμερα σχετικά με τη μέση κατανομή της ατομικής ταχύτητας, κυρίως λόγω των μεγάλων δυσκολιών που παρατηρούνται στην εύρεση και μελέτη των εσωτερικών ταχυτήτων των ατόμων. Όμως, η μελέτη [16] έχει, ως έναν από τους σκοπούς της, να διερευνήσει σε βάθος την κατανομή των ταχυτήτων, βοηθώντας στην εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων μέσω των διαγραμματικών αποτελεσμάτων που παρατίθενται στο ακόλουθο Σχήμα 2.17.:





Σχήμα 2.17. Στιγμιότυπα ατομικών θέσεων, σε συνδυασμό με την εξέλιξη της ταχύτητας των ατόμων του υλικού-στόχου και του αερίου, κατά μήκος της διεύθυνσης z , για ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας 3 J/m^2 , βάθος απορρόφησης 5 nm και πίεση 0.22 MPa . Οι χρονικές στιγμές έπεται από την έναρξη εκπομπής του παλμού, που εξετάζονται εδώ, κυμαίνονται από τα 0.05 ns στα 3 . Με πράσινο χρώμα παριστάνεται η ταχύτητα των ατόμων του υλικού-στόχου, ενώ με μπλε αυτή των ατόμων του περιβάλλοντος αερίου. Τα άτομα του στόχου αυτά καθαυτά εμφανίζονται με μαύρες κουκκίδες, ενώ αυτά του αερίου με κόκκινες.

Μία σειρά από ιδιαίτερα ενδιαφέροντα φαινόμενα εμφανίζονται στην κατανομή της εσωτερικής ταχύτητας. Στις εικόνες που παριστάνουν τα 0.025 , 0.05 και 0.1 ns , ένα αρνητικό κύμα ταχύτητας παρατηρείται στο στερεό στόχο. Αυτό το κύμα κινείται προς την πίσω πλευρά του στόχου και προκαλείται από το τοπικό κύμα τάσης. Αυτή η αρνητική ταχύτητα δεν αντιπροσωπεύει την τοπική ταχύτητα διάδοσης του κύματος, αλλά σχετίζεται με την αποκόλληση των τοπικών ατόμων κάτω από την επίδραση της φόρτισης (τάσης).

Όταν αυτό το κύμα φτάσει στην πίσω πλευρά του στόχου, απλά εξαφανίζεται και δεν ανακλάται προς τα πίσω, κάτι που έχει να κάνει με την εφαρμογή μιας συνοριακής συνθήκης που σχετίζεται με την απορρόφηση τάσεων, στο αριστερό σύνορο της περιοχής προσομοίωσης, όπως αυτή έχει οριστεί στη βιβλιογραφία [16]. Η απορρόφηση του κύματος λόγω της συγκεκριμένης συνοριακής συνθήκης προκαλεί ουσιαστικά την «εξαφάνιση» της καθαρής (net) ταχύτητας των ατόμων, κάτι που αποδεικνύει ότι το φαινόμενο ανάκλασης των κρουστικών κυμάτων μπορεί πλέον να εξαλειφθεί.

Η αρχική ταχύτητα της στήλης πλάσματος στην περιοχή της επιφάνειας είναι θετική, λόγω του φαινομένου της φωτοαποδόμησης. Εάν η στήλη έχει τη δυνατότητα να προκαλέσει ένα κρουστικό κύμα, θα πρέπει η ταχύτητά της να είναι πολύ υψηλότερη από την ταχύτητα του ήχου εντός του περιβάλλοντος αερίου. Για το στιγμιότυπο του Σχήματος 2.17. που αντιστοιχεί στη χρονική στιγμή των 0.025 ns , η στήλη πλάσματος που σχηματίζεται διαδίδεται με μία ταχύτητα μετώπου λίγο πάνω από 400 m/s , περίπου τρεις φορές μεγαλύτερη από τα 132 m/s , που είναι η ταχύτητα του ήχου στο περιβάλλον αέριο, για θερμοκρασία 50 K (-223°C). Στα αρχικά στιγμιότυπα, είναι εύκολο να παρατηρηθεί ότι στερεά άτομα

εκτοπίζονται από τον κυρίως όγκο του στόχου με πολύ υψηλή ταχύτητα, κάτι που συνοδεύεται από το φαινόμενο του *εκρηκτικού βρασμού* (το οποίο θα εξεταστεί στο Κεφάλαιο 3, που μελετά το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης σε συνδυασμό με μία σειρά από αριθμητικές προσομοιώσεις (οι οποίες περιλαμβάνουν και τη Μοριακή Δυναμική – MD)). Η γειτονική περιοχή του αερίου υφίσταται στη συνέχεια μία εμφανή συμπίεση, επειδή το μέτωπο της στήλης σπρώχνει έντονα τις περιβάλλουσες περιοχές, με συνέπεια το σχηματισμού ενός *κρουστικού κύματος* (shock wave) υψηλής ενέργειας. Το μέτωπό του είναι ήδη εμφανές κατά τη χρονική στιγμή 0.1 ns, κάτι που οφείλεται στο γεγονός ότι η στήλη μεταφέρει ένα μεγάλο τμήμα της κινητικής της ενέργειας στο κρουστικό κύμα. Σε αυτή τη στιγμή, τόσο το κύμα όσο και η στήλη κινούνται με μία εξαιρετικά υψηλή (και σίγουρα *υπερηχητική*) ταχύτητα, της τάξης των 350 m/s. Είναι πάντως σημαντικό να αναφέρουμε ότι η ταχύτητα, στη διεπιφάνεια στήλης / αερίου, παρουσιάζει ασυνέχειες. Αυτό έχει πρακτικά μία λογική βάση επειδή η μεταφορά ορμής και ενέργειας από τη στήλη στο δημιουργούμενο κρουστικό κύμα λαμβάνει χώρα ήδη από την αρχή της εφαρμογής του παλμού. Πολλά άτομα του αερίου έχουν σπρωχθεί προς τα έξω με μεγάλη ταχύτητα, κατά τρόπο αντίστοιχο μιας υπερηχητικής αντλίας. Αυτό σημαίνει ότι τα – πρακτικά λιγιστά – άτομα που έχουν υποστεί ελάχιστο ως καθόλου σπρώξιμο, παραμένουν πίσω από το μέτωπο του κρουστικού κύματος. Κάτι τέτοιο προκαλεί μία ανομοιόμορφη κατανομή ταχυτήτων στο συμπιεσμένο ατμοσφαιρικό αέριο, όπου το μέτωπο του κρουστικού κύματος παρουσιάζει τη μέγιστη ταχύτητα.

Κατά τη χρονική στιγμή των 0.2 ns, το κρουστικό κύμα ήδη αποκτά την απαραίτητη ορμή προκειμένου να διασταλεί, την ίδια στιγμή κατά την οποία αρχίζει να συντελείται επιβράδυνση της στήλης. Στην ίδια στιγμή, η μέγιστη ταχύτητα των ατόμων στο συμπιεσμένο αέριο είναι ακόμα μεγαλύτερη από ό,τι στη στήλη πλάσματος. Η επιβράδυνση της στήλης προκαλείται από τη συγκεντρωμένη μάζα του συμπιεσμένου αερίου της ατμόσφαιρας, η οποία (μάζα) αποκτά πλέον μία τιμή συγκρίσιμη με τη μάζα της στήλης. Κάτι τέτοιο οδηγεί τελικά στο να μειωθεί η ταχύτητα της στήλης. Είναι σημαντικό να ληφθεί υπόψη ότι, κατά τη διάρκεια των επόμενων σταδίων της ακτινοβολήσης, η τιμή της ταχύτητας της στήλης γίνεται και πάλι αρνητική (μεταξύ 2 και 5 ns). Κάτι τέτοιο σημαίνει ότι η στήλη αρχίζει πάλι να κινείται προς τα πίσω, με κατεύθυνση την επιφάνεια του στόχου, με την οποία ενδέχεται να επανασυνδεθεί. Πλέον, το πυκνότερο μέτωπο του κρουστικού κύματος, που έχει επιταχυνθεί, διαδίδεται με μία ταχύτητα που παρουσιάζει ένα έντονο μέγεθος, ενώ η πίσω πλευρά του κύματος διαχέεται μαζί με τις συνιστώσες της στήλης. Είναι εμφανές ότι η επιβράδυνση και «απόσβεση» του μετώπου του κρουστικού κύματος οφείλεται, κατά κύριο λόγο, στην απώλεια ορμής εντός του ακίνητου περιβάλλοντος αερίου. Όταν έχουν παρέλθει 5 ns από την έναρξη του παλμού, η ταχύτητα των ατόμων εντός του κρουστικού κύματος επανέρχεται σε επίπεδα πολύ κοντά στην ταχύτητα του ήχου διαμέσου του αερίου, δηλαδή στα 132 m/s, όπως έχει ήδη αναφερθεί.

2.8.3. Επίδραση της απορρόφησης της δέσμης Laser στο σχηματισμό του κρουστικού κύματος

Η μελέτη [16] χρησιμοποιεί ένα ογκομετρικό μοντέλο απορρόφησης της ενέργειας του Laser για να προσδιορίσει το πώς η απορροφητικότητα της δέσμης επεμβαίνει στο σχηματισμό των κρουστικών κυμάτων. Κύριο στοιχείο της μελέτης είναι η αυξημένη έμφαση που δίνεται σε κβαντομηχανικές επιδράσεις. Ένα θετικό στοιχείο του μοντέλου αυτού έχει να κάνει με τη σαφώς μικρότερη χρονική κλίμακα (κάτω από 1 ps) της απορρόφησης της ενέργειας Laser, συγκριτικά με τη διάρκεια παλμού (της τάξης των ns).

Το Σχήμα 2.16, το οποίο έχει παρατεθεί παραπάνω, χρησιμοποιεί διαφορετικά βάθη απορρόφησης (μεταξύ 5, 10 και 15 nm), ώστε να μελετηθεί η δυναμική και η εξέλιξη των κρουστικών κυμάτων που διαδίδονται. Είναι ζωτικής σημασίας να διαπιστώσουμε ότι η επίδραση που ασκεί το βάθος απορρόφησης είναι πάρα πολύ σημαντική, αναφορικά με το σχηματισμό του κρουστικού κύματος. Αρχίζοντας με το στιγμιότυπο [a] (για βάθος απορρόφησης $d = 5 \text{ nm}$), ο σχηματισμός και η διάδοση του κρουστικού κύματος είναι δύο προβλέψιμες διαδικασίες. Αυτές όμως παύουν να υφίστανται όταν αυξηθεί η τιμή του d . Αυξημένο βάθος απορρόφησης σημαίνει ότι η ακτίνα του Laser διεισδύει σε μεγαλύτερο βαθμό μέσα στο δείγμα, προκαλώντας με αυτό τον τρόπο αφαίρεση υλικού σε μεγαλύτερο πάχος, καθ'ότι αφαιρείται μεγαλύτερη μάζα υλικού από υψηλότερο όγκο, αλλά με χαμηλότερη ταχύτητα. Όπως μπορούμε να δούμε στο στιγμιότυπο [b] του προαναφερθέντος Σχήματος (για $d = 10 \text{ nm}$), ένα λεπτό στρώμα υλικού-στόχου εκτοπίζεται και παραμένει κατά κύριο λόγο στη θέση όπου βρίσκεται το μέτωπο της στήλης. Το περιβάλλον αέριο σπρώχνεται προς τα μπροστά από τη στήλη πλάσματος σαφώς υψηλότερης πυκνότητας, προκαλώντας με αυτόν τον τρόπο ένα ισχυρό κρουστικό κύμα. Επίσης, λόγω της υψηλής πίεσης που αποκτά εντέλει το περιβάλλον αέριο (μετά από τουλάχιστον 3 ns επενέργειας του παλμού), και η οποία εμποδίζει την κίνηση του συσσωματώματος ατόμων στόχου και της στήλης πλάσματος προς τα έξω, το στρώμα φωτοαποδομημένου υλικού αρχίζει να κινείται πάλι προς τα πίσω, με κατεύθυνση την κύρια επιφάνεια του στόχου.

Αξίζει τέλος να σημειωθεί ότι, όταν το βάθος απορρόφησης αυξηθεί ακόμα περαιτέρω (στα 15 nm, βλ. στιγμιότυπο [c]), είναι πολύ δύσκολο να παρατηρηθεί οπτικά ο σχηματισμός της στήλης πλάσματος. Στα αρχικά στάδια, παρατηρούμε ότι ένα λεπτό στρώμα υμενίου εκτοπίζεται προς τα έξω (για 0.5 και 1 ns), ενώ δημιουργείται μία σχετικά μεγάλη φυσαλίδα κάτω από την επιφάνεια. Όμως, φαίνεται ότι το εκτοπισμένο υλικό δεν έχει λάβει αρκετά μεγάλη ενέργεια ώστε να υπερνικήσει δύο δυνάμεις: αυτή της έλξης από το λιωμένο υλικό, καθώς επίσης και αυτή της συγκράτησης από το περιβάλλον αέριο. Κατά συνέπεια, το αέριο σπρώχνεται προς τα πίσω στο 1 ns και, σε επόμενα βήματα, υπάρχουν μόνο λίγα παρατηρήσιμα σωματίδια που φεύγουν προς τα έξω. Παρά το γεγονός ότι έχει σχηματιστεί ένα

κρουστικό κύμα, έχει πολύ μικρή ενέργεια διάδοσης και διαχέεται γρήγορα στο περιβάλλον αέριο, κάτι που μπορεί να παρατηρηθεί κατά τη χρονική στιγμή των 5 ns, όταν πλέον είναι πολύ δύσκολο να παρατηρηθεί το κρουστικό κύμα.

Μία σειρά από διεξαχθείσες προσομοιώσεις MD είχαν ως σκοπό να βοηθήσουν στην καλύτερη κατανόηση του σχηματισμού κρουστικών κυμάτων σε νανοκλίμακα, με ιδιαίτερη έμφαση στις δυναμικές παραμέτρους τους. Τα μεγέθη που εξετάζονται σε αυτές τις προσομοιώσεις είναι κατά κύριο λόγο η θέση του μετώπου του κρουστικού κύματος και η ταχύτητα των ατόμων εντός αυτού, καθώς μεταβάλλεται το βάθος απορρόφησης από τα 5 στα 15 nm. Η ταχύτητα διάδοσης του κρουστικού κύματος διαπιστώθηκε ότι μπορεί να βρεθεί μέσω της χρονικής παραγώγου της θέσης του μετώπου του κρουστικού κύματος, και μέσω αυτής της διαπίστωσης βρέθηκε ότι αυξάνεται, επειδή ένα μικρότερο βάθος απορρόφησης θα οδηγήσει σε λιγότερο έντονη φωτοαποδόμηση, αλλά με μεγαλύτερη ταχύτητα. Οι διεξαχθείσες προσομοιώσεις οδήγησαν στο επιπλέον συμπέρασμα ότι η διάδοση του κύματος είναι πάντα ταχύτερη συγκριτικά με την τοπική ταχύτητα των ατόμων, λόγω τόσο της κίνησης των ατόμων στο μέτωπο όσο και λόγω της διεργασίας ενσωμάτωσης των γειτνιαζόντων ατόμων του περιβάλλοντος αερίου στο μέτωπο του κρουστικού κύματος, προκειμένου αυτό να γίνει πιο παχύ. Ο υπολογισμός της κατανομής των ταχυτήτων έγινε με βάση δύο θεωρητικές σχέσεις που προτάθηκαν στη βιβλιογραφία [173] και οι οποίες, για λόγους πληρότητας, παρατίθενται εδώ:

$$M = \frac{u_f}{a} = \sqrt{\frac{\gamma+1}{2\gamma} \left(\frac{p_2}{p_1} - 1 \right) + 1} \Rightarrow u_f = a \sqrt{\frac{\gamma+1}{2\gamma} \left(\frac{p_2}{p_1} - 1 \right) + 1} \quad (2.63)$$

$$u_{av} = \frac{a}{\gamma} \left(\frac{p_2}{p_1} - 1 \right) \sqrt{\frac{\frac{2\gamma}{\gamma+1}}{\frac{p_2}{p_1} + \frac{\gamma-1}{\gamma+1}}} \quad (2.64)$$

Όπου:

- u_f η ταχύτητα διάδοσης του κρουστικού κύματος,
- u_{av} η ταχύτητα μάζας (μέση τιμή – average),
- a η ταχύτητα του ήχου στο περιβάλλον αέριο,
- M ο αριθμός Mach, ο οποίος ορίζεται ως ο λόγος της ταχύτητας διάδοσης του κρουστικού κύματος προς την ταχύτητα του ήχου στο περιβάλλον αέριο,
- p_1 η πίεση περιβάλλοντος,
- $\gamma = \frac{5}{3}$ ο λόγος ειδικών θερμοτήτων για το περιβάλλον αέριο,

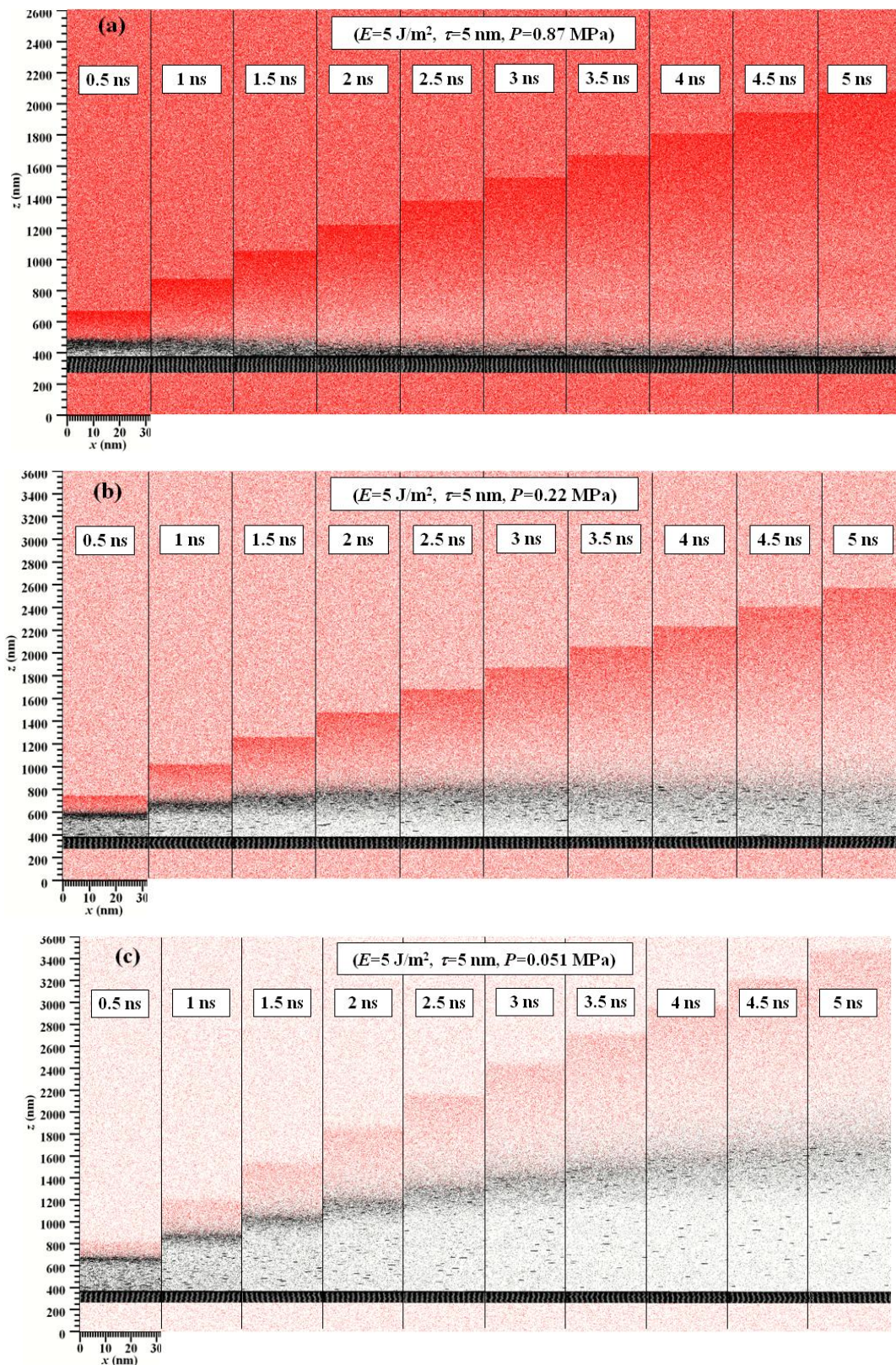
- $p_2 = p_{mm} = \frac{1}{\Delta V} \left(\sum_{i \neq j}^N r_{ij,m} F_{ij,m} + Nk_b T \right)$ η πίεση του μετώπου του κρουστικού κύματος, η οποία εξήχθη μέσα από προσομοιώσεις Μοριακής δυναμικής (ΔV ο όγκος μιας μικρής περιοχής που μας ενδιαφέρει, k_b η σταθερά Boltzmann, $Nk_b T$ η πίεση που προκαλείται από την κίνηση των ατόμων και m θετική ακέραια σταθερά, που μπορεί να λάβει μία εκ των τιμών 1, 2 ή 3).

Γενικά, μπορούμε να πούμε ότι η μείωση του βάθους οπτικής απορρόφησης προκαλεί εντονότερη και ευρύτερη αλληλεπίδραση μεταξύ της στήλης πλάσματος και του περιβάλλοντος αερίου. Κάτι τέτοιο συμβαίνει λόγω της ταχύτερης κίνησης της στήλης, δίνοντας τη δυνατότητα στα άτομα αυτής να διεισδύσουν ακόμα βαθύτερα μέσα στο περιβάλλον αέριο. Η μεταβολή του πάχους της στήλης, για βάθη απορρόφησης 5 έως 10 nm, είναι σχεδόν γραμμική με το χρόνο, κάτι όμως που δε συμβαίνει όταν αυξηθεί περαιτέρω το βάθος απορρόφησης, καθώς, παρά το γεγονός ότι η πυκνότητα του μετώπου της στήλης είναι υψηλή, δεν επιτρέπει τη διείσδυση ατόμων ή συσσωματωμάτων του περιβάλλοντος αερίου εντός της στήλης, οδηγώντας σε μία στενότερη περιοχή αλληλεπίδρασης στήλης και αερίου, η οποία στενεύει ακόμα περισσότερο όταν αυξηθεί το βάθος απορρόφησης στα 15 nm, κάτι που συνοδεύεται και από την κατάσταση κορεσμού (saturation) στην οποία φτάνει η ζώνη αλληλεπίδρασης, κάτι που οφείλεται ταυτόχρονα και στην αδυναμία τόσο της στήλης πλάσματος όσο και του κρουστικού κύματος.

2.8.4. Επίδραση της απορρόφησης της δέσμης Laser στο σχηματισμό του κρουστικού κύματος

Η μελέτη [16] έχει αποδείξει ότι οι μεταβολές στην πίεση περιβάλλοντος ασκούν μία πολύ σημαντική επίδραση στις παραμέτρους ελέγχου των χαρακτηριστικών της στήλης πλάσματος, όπως είναι η κατανομή αυτής στο χώρο, ο ρυθμός εναπόθεσης, αλλά και η κατανομή της κινητικής ενέργειας των εναποτιθέμενων σωματιδίων, που παρουσιάζει ιδιαίτερα υψηλή διαφοροποίηση από άτομο σε άτομο λόγω διασποράς, εξασθένησης και θερμοποίησης της στήλης πλάσματος. Το Σχήμα 2.18. θα μας βοηθήσει να κατανοήσουμε, σε σημαντικό βαθμό, την εξέλιξη του κρουστικού κύματος αλλά και της έκτασης της στήλης πλάσματος, για τρεις διαφορετικές πιέσεις περιβάλλοντος αερίου:

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ



Σχήμα 2.18. Σύγκριση στιγμιότυπων σχετικών με τη δυναμική του σχηματισμού κρουστικών κυμάτων, καθώς επίσης και της εξέλιξής τους, για ενέργεια παλμού Laser ανά μονάδα επιφάνειας ίση με 5 J/m², βάθος απορρόφησης 5 nm και τρεις διαφορετικές πιέσεις περιβάλλοντος: [a] 0.87 MPa, [b] 0.22 MPa, [c] 0.051 MPa.

Είναι εμφανές ότι η αύξηση της πίεσης προκαλεί εντονότερο σχηματισμό κρουστικών κυμάτων, τα οποία χαρακτηρίζονται από αυξημένη ισχύ και σημαντική όξυνση των μετώπων τους. Πράγματι, η αύξηση της πίεσης περιβάλλοντος ενδυναμώνει τις συγκρούσεις μεταξύ ατόμων του περιβάλλοντος αερίου και του πλάσματος, εντός της περιοχής της επεκτεινόμενης στήλης. Μπορούμε επίσης να παρατηρήσουμε ότι η επέκταση της στήλης στο χώρο είναι περιορισμένη για υψηλές τιμές της πίεσης (βλ. περίπτωση [α]).

Για την περίπτωση [α], μπορούμε να παρατηρήσουμε κίνηση της στήλης πλάσματος προς τα πίσω, με κατεύθυνση την υγρή επιφάνεια, κατά τη χρονική στιγμή 1 ns. Στα 5 ns πρακτικά παρατηρείται ελάχιστη έκταση της στήλης στο χώρο. Η οπισθοκίνηση της στήλης εμφανίζεται στα 3.5 ns όταν η πίεση ελαττωθεί στα 0.22 MPa (περίπτωση [b]), ενώ ταυτόχρονα εκλύεται πολύ μεγαλύτερη ποσότητα πλάσματος. Η περαιτέρω μείωση της πίεσης στα 0.051 MPa (περίπτωση [c]) οδηγεί σε έντονη κίνηση της στήλης προς τα *μπροστά*, ενώ η συγκεκριμένη πίεση προκαλεί το «πέταγμα» της στήλης στο χώρο, σε ύψος 1.6 μm, κατά τη χρονική στιγμή 5 ns.

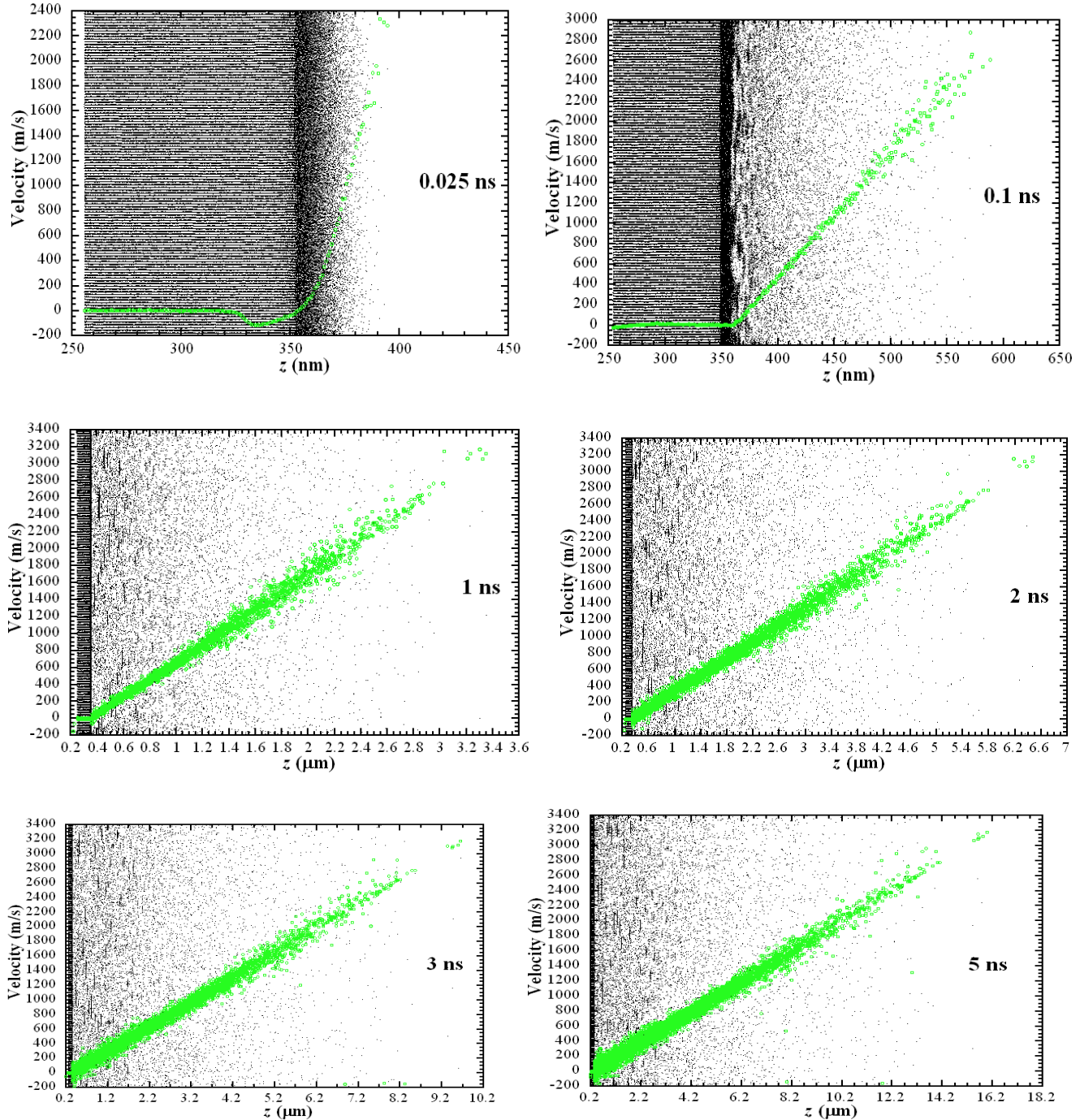
Στα πλαίσια της επέκτασης της μελέτης [16], διαπιστώθηκε, μέσω Μοριακών Δυναμικών (MD) αναλύσεων, για τις οποίες γίνεται εκτενέστερος λόγος στο Κεφάλαιο 3, ότι η ελάττωση της πίεσης οδηγεί σε περαιτέρω διάδοση και επέκταση του κρουστικού κύματος, επειδή αυτή περιορίζεται όλο και λιγότερο από το περιβάλλον αέριο λόγω του γεγονότος ότι η πίεση πέφτει. Για τον ίδιο ακριβώς λόγο, η ελάττωση της πίεσης μπορεί να οδηγήσει σε πολύ ταχεία διάδοση του κρουστικού κύματος, τη στιγμή που, προφανώς, η μείωση της πίεσης προκαλεί μία επιβραδυντική επίδραση στο κρουστικό κύμα, ελαττώνοντας την ταχύτητα διάδοσής του, λόγω υψηλότερης διασποράς και περισσότερες συγκρούσεις της στήλης πλάσματος με άτομα του περιβάλλοντος αερίου. Τέλος, αξίζει να σημειωθεί ότι η εξάπλωση της περιοχής αλληλεπίδρασης πλάσματος και αερίου είναι εντονότερη σε συνθήκες χαμηλότερης πίεσης, τη στιγμή που η υψηλή πίεση των 0.87 MPa οδηγεί στην επανασύνδεση μεγάλου τμήματος του πλάσματος με την τηγμένη (λόγω θέρμανσης από το Laser) επιφάνεια.

2.8.5. Σύγκριση με την αλληλεπίδραση Laser και ύλης υπό κενό

Η κατάσταση κατά την οποία δεν υπάρχει περιβάλλον αέριο κατά τη διαδικασία της φωτοαποδόμησης και του σχηματισμού πλάσματος, που ουσιαστικά αντιπροσωπεύει την κατάσταση πραγματοποίησης της διεργασίας *υπό κενό*, είναι μία ιδανική και συνάμα ακραία περίπτωση κατά την οποία η στήλη πλάσματος διαστέλλεται ελεύθερα, χωρίς να δημιουργείται κάποιος περιορισμός στη διάδοση. Το Σχήμα 2.19. δίνει τη δυνατότητα προσδιορισμού της ταχύτητας των στοιχείων της στήλης φωτοαποδόμησης, για ενέργεια

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

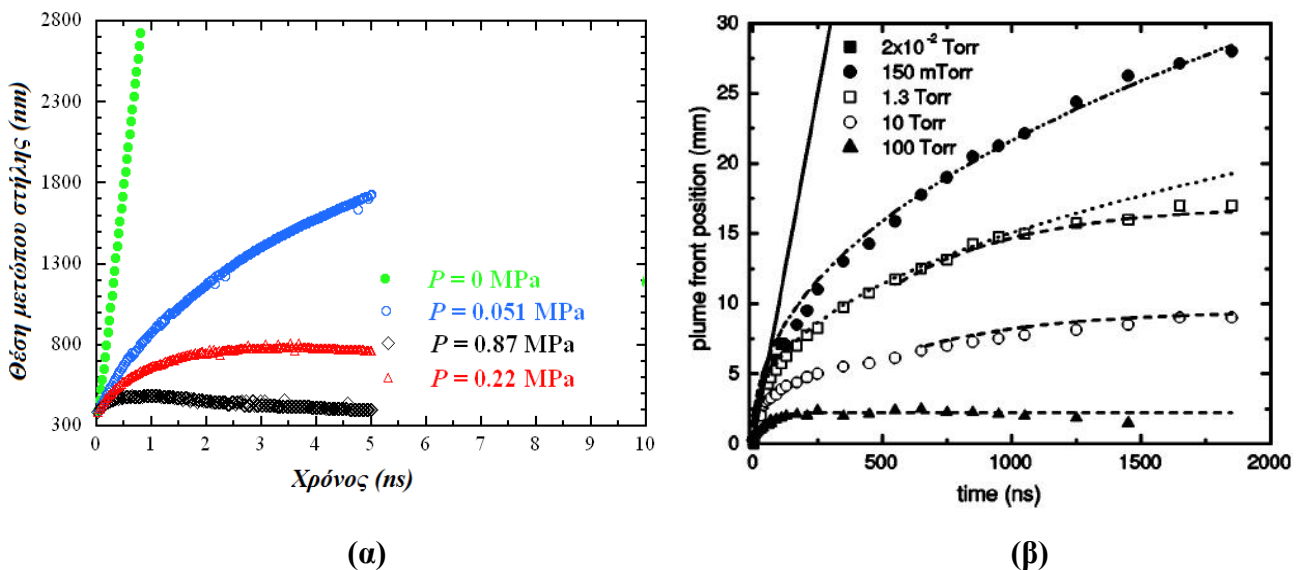
παλμού ανά μονάδα επιφάνειας 5 J/m^2 , βάθος απορρόφησης 5 nm και μηδενική πίεση περιβάλλοντος (συνθήκες κενού), σε διάφορες χρονικές στιγμές (από τα 0.025 έως τα 5 ns , σε σχέση με τη στιγμή έναρξης εκπομπής του παλμού:



Σχήμα 2.18. Στιγμιότυπα ατομικών θέσεων, σε συνδυασμό με την εξέλιξη της κατανομής της ταχύτητας του υλικού-στόχου κατά μήκος της διεύθυνσης z , υπό κενό ($E = 5 \text{ J/m}^2$, $d = 5 \text{ nm}$). Με πράσινο χρώμα απεικονίζεται η ταχύτητα των ατόμων του στόχου, ενώ τα άτομα του στόχου αυτά καθαυτά απεικονίζονται με μαύρες κουκκίδες.

Παρατηρείται καταρχήν ότι τα άτομα του στόχου που εκτοπίζεται από το υλικό κατά τη φωτοαποδόμηση φτάνουν σε μήκος (οριζόντια διάσταση στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων καθενός από τα στιγμιότυπα του παραπάνω Σχήματος) έως 16 μm πάνω από την επιφάνεια του στόχου, κατά τη χρονική στιγμή 5 ns, κάτι που καταδεικνύει πολύ υψηλή ταχύτητα των ατόμων, με δεδομένη και την παρέλευση ενός πολύ μικρού χρονικού διαστήματος.

Αυτό όμως που αξίζει να παρατηρηθεί, σε σαφώς μεγαλύτερο βαθμό, είναι η σύγκριση της ακτινοβολήσης του στόχου με Laser υπό την ιδανική συνθήκη του κενού, και αυτή της ακτινοβολήσης παρουσία αερίου μεταβλητής πίεσης (με τις πιθανές τιμές να έχουν παρατεθεί στο παραπάνω Εδάφιο 2.8.4.). Το Σχήμα 2.19. θα μας βοηθήσει σε πολύ σημαντικό βαθμό στην προσπάθειά μας να κάνουμε μία αποδεκτή και ικανοποιητική σύγκριση:



Σχήμα 2.19. (α) Θέση του μετώπου της στήλης φωτοαποδόμησης ($E = 5 \text{ J/m}^2$, $d = 5 \text{ nm}$) για τέσσερις διαφορετικές συνθήκες: πίεσης περιβάλλοντος μεταξύ 0.051, 0.22 και 0.87 MPa και μηδενικής πίεσης (συνθήκες κενού). (β) Αναπαράσταση υπολογισθεισών τιμών για τη θέση του μετώπου στην περίπτωση φωτοαποδόμησης στόχου από Al, για διαφορετικές πιέσεις που έχουν μετρηθεί σε Torr ($1 \text{ Torr} = 133.322368 \text{ Pa}$) [176].

Από το Σχήμα [α] και την εξέτασή του τόσο από μόνο του όσο και παράλληλα με το [β], μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι οι διαφορές στο φαινόμενο της εξάπλωσης της στήλης, για συνθήκες κενού και συνθήκες ύπαρξης περιβάλλοντος αερίου υπολογίσιμης πίεσης, είναι πολύ σημαντικές. Το μέτωπο της στήλης σε κενό παρουσιάζει πολύ γρήγορη αύξηση στη θέση κατά τον άξονα των z, συγκριτικά με τις

περιπτώσεις της πίεσης περιβάλλοντος, επιδεικνύοντας με αυτό τον τρόπο ελεύθερη εξάπλωση. Όταν όμως η πίεση του περιβάλλοντος αερίου ληφθεί υπόψη, και στη συνέχεια αυξηθεί, εμφανίζονται περιορισμοί στην εξάπλωση της στήλης, οδηγώντας με αυτό τον τρόπο σε μείωση του ενεργού μήκους, με το φαινόμενο αυτό να είναι παρατηρήσιμο κατά κύριο λόγο στην περίπτωση της μέγιστης εξεταζόμενης πίεσης των 0.87 MPa, ήδη από την αρχή της εκπομπής του παλμού. Τα αποτελέσματα είναι σχετικά συγκρίσιμα με τη μελέτη των Harilal *et al.* [176] και παρουσιάζουν μία σχετική συμφωνία, παρά το γεγονός ότι η εξέταση στις πηγές [16] και [176] διαφέρει όσον αφορά το υλικό, τη διάρκεια παλμού και τη χρονική κλίμακα αναλύσεων.

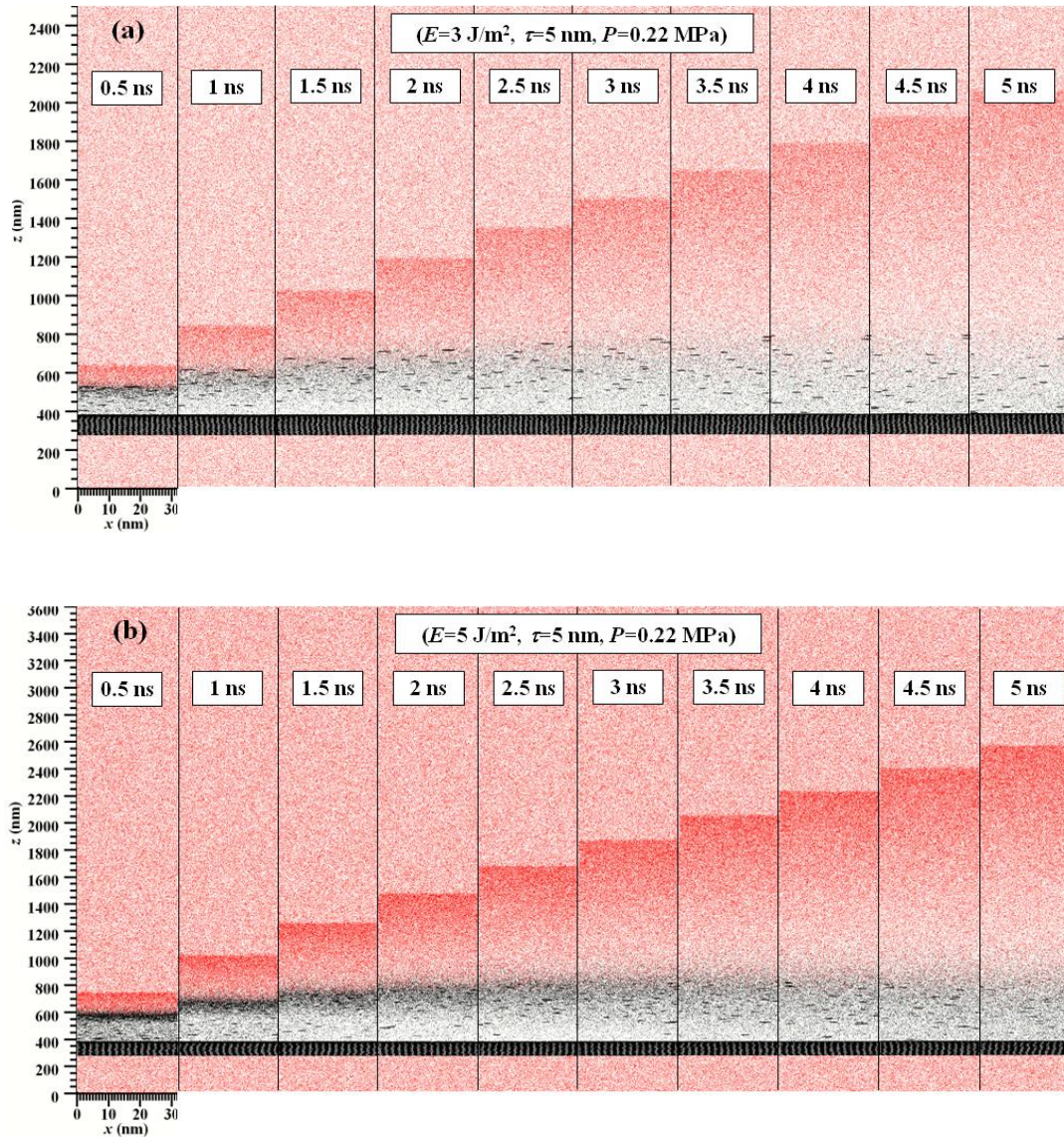
Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι, σε αντίθεση με την περίπτωση ακτινοβολίας υπό κενό, όταν η πίεση είναι υπολογίσιμη παρατηρείται κίνηση ατόμων του φωτοαποδομημένου υλικού-στόχου προς τα πίσω, με κατεύθυνση την κυρίως επιφάνεια του στόχου (που περιλαμβάνει τα άτομα που δεν έχουν υποστεί φωτοαποδόμηση). Η αύξηση της πίεσης εντείνει αυτό το φαινόμενο και οδηγεί στην εναπόθεση του αποβλημένου υλικού στην επιφάνεια του στόχου, οδηγώντας σε θερμοδυναμικές διεργασίες που περιλαμβάνουν, μεταξύ άλλων, τη θερμοποίηση και τη στερεοποίηση τηγμένων σωματιδίων. Η τοπική θερμοκρασία και πίεση παίζουν πολύ σημαντικό ρόλο στις παραπάνω διεργασίες, ενώ έπειτα από τη δημοσίευση της μελέτης [16] έχουν γίνει αρκετές προσπάθειες, πολλές εκ των οποίων δεν έχουν ολοκληρωθεί, προκειμένου να διερευνηθούν οι αλλαγές φάσης στα άτομα του ακτινοβολημένου στόχου, έπειτα από την εκ νέου εναπόθεσή τους στο υλικό.

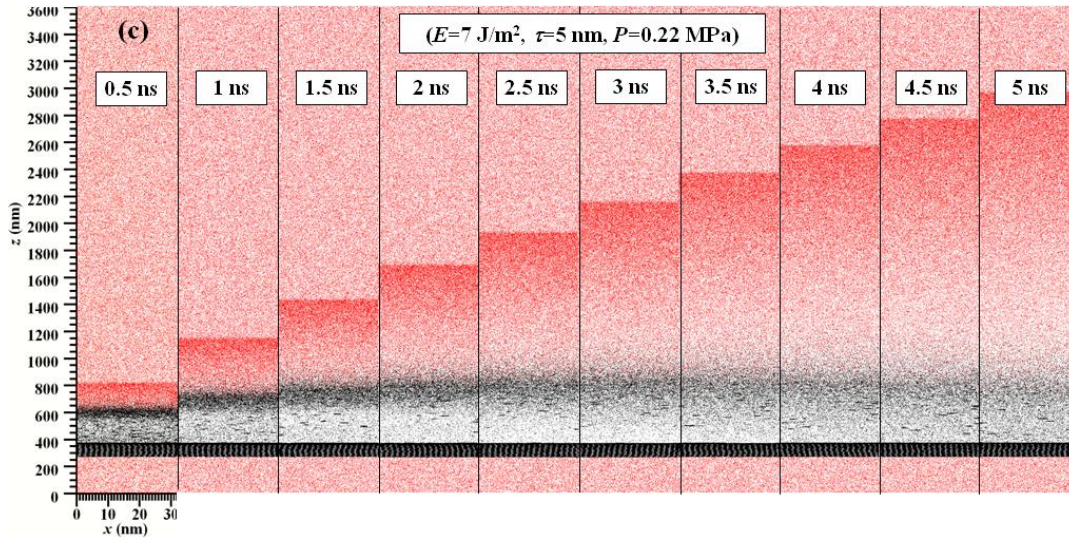
2.8.6. Επίδραση της ροής ακτινοβολίας Laser (*Laser Fluence*) στην εμφάνιση κρουστικών κυμάτων

Η μελέτη που διεξάγεται στο παρόν Εδάφιο πραγματοποιείται στην προσπάθεια ικανοποίησης της απαίτησης που υπάρχει, κατά τη διάρκεια πραγματοποίησης κατεργασιών φωτοαποδόμησης με Laser, να λάβει χώρα απομάκρυνση υλικού σε ικανοποιητικό βαθμό και με τη μέγιστη δυνατή ποιότητα κατεργασίας, χωρίς να υπερθερμανθεί ολόκληρος ο στόχος αλλά ούτε και να υποστεί τήξη ως συνέπεια / παρενέργεια της υπερθέρμανσης αυτής. Σε αυτή τη μελέτη, το μέγεθος που παίζει σημαντικό ρόλο είναι αυτό του *κατωφλίου φωτοαποδόμησης* (ablation threshold / threshold fluence of ablation), που είναι η ελάχιστη τιμή ενέργειας Laser για την οποία μπορεί να λάβει χώρα φωτοαποδόμηση, έστω και σε μερικό βαθμό (η περίπτωση μερικής φωτοαποδόμησης εξετάζεται στα πλαίσια των πειραματικών αναλύσεων που θα παρουσιαστούν στο Κεφάλαιο 6). Το σημαντικό στοιχείο που συνδέει τη ροή ακτινοβολίας Laser με το σχηματισμό κρουστικών κυμάτων είναι το γεγονός ότι η αύξηση της πυκνότητας ενέργειας / ροής ακτινοβολίας (*Laser Fluence*) πολύ πάνω από το κατώφλι φωτοαποδόμησης, προκαλεί τη γένεση ενός εντονότερου κρουστικού κύματος. Το παραπάνω συμπέρασμα μπορεί να αποδειχθεί παρατηρώντας το

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Σχήμα 2.20., στο οποίο παρουσιάζονται οι διαφορές στο σχηματισμό, την εξέλιξη και το μέγεθος του κρουστικού κύματος για τρεις διαφορετικές τιμές της πυκνότητας ενέργειας Laser, μεταξύ 3, 5 και 7 J/m^2 , διατηρώντας τα μεγέθη του βάθους απορρόφησης και της πίεσης περιβάλλοντος στα 5 nm και 0.22 MPa αντίστοιχα:





Σχήμα 2.20. Σύγκριση στιγμιότυπων αναφορικά με τη δυναμική του σχηματισμού και της εξέλιξης των κρουστικών κυμάτων για $P = 0.22 \text{ MPa}$, $d = 5 \text{ nm}$, και τρεις διαφορετικές τιμές της πυκνότητας ενέργειας (fluence) του Laser: [a] 3 J/m^2 , [b] 5 J/m^2 , [c] 7 J/m^2 .

Από το παραπάνω Σχήμα μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι, καθώς αυξάνεται η πυκνότητα ενέργειας Laser που εκπέμπεται από την πηγή (π.χ. τη συσκευή Nd:YAG Laser, που χρησιμοποιείται σε πολλές εφαρμογές και για την οποία θα γίνει αναφορά σε μεταγενέστερα Κεφάλαια), αποδομούνται λιγότερα σωματίδια μεγάλου μεγέθους από τον κυρίως όγκο του υλικού-στόχου, με αποτέλεσμα να δημιουργηθεί εντέλει μία περισσότερο ομοιόμορφη στήλη. Όταν η ροή ακτινοβολίας είναι αυξημένη, η φωτοαποδόμηση του υλικού γίνεται ταχύτερα όσον αφορά τη χρονική διάρκεια, με αποτέλεσμα το μέτωπο της στήλης αλλά και του κρουστικού κύματος να είναι περισσότερο συγκεντρωμένο, ενώ ταυτόχρονα η διάδοση των κρουστικών κυμάτων είναι ευκολότερα παρατηρήσιμη. Αυτό μπορούμε να το διαπιστώσουμε έχοντας υπόψη τις αριθμητικές ενδείξεις στον άξονα των y , σε κάθε ένα από τα στιγμιότυπα του Σχήματος 2.20.. Επιπλέον, το γεγονός ότι η διάδοση των κρουστικών κυμάτων είναι εντονότερη για την υψηλή ροή ακτινοβολίας των 7 J/m^2 δείχνει ότι το μεγαλύτερο ποσό ενέργειας προκαλεί, με τη σειρά του, ένα περισσότερο έντονο κρουστικό κύμα, ενώ ταυτόχρονα αυξάνει σε πολύ σημαντικό βαθμό την έκταση αλληλεπίδρασης του Laser με την ύλη. Από τις παραπάνω παρατηρήσεις μπορεί να δικαιολογηθεί κάτι που φαντάζει σχετικά αυτονόητο, το ότι δηλαδή η αύξηση της ενέργειας της προσπίπτουσας δέσμης αυξάνει με τη σειρά της τη μάζα του αποδομούμενου υλικού, με αποτέλεσμα να αποβάλλεται υλικό σε ολοένα και μεγαλύτερο βάθος. Η μελέτη [16] μπορεί να δώσει μία ιδιαίτερα αξιόπιστη εικόνα όχι μόνο του σχηματισμού των κρουστικών κυμάτων, αλλά και της διαδικασίας της φωτοαποδόμησης γενικά, καθώς κρίνεται ότι παρέχει ικανοποιητικά αποτελέσματα που ανταποκρίνονται στις πραγματικές συνθήκες κάτω από τις οποίες λαμβάνει χώρα η φωτοαποδόμηση.

3. Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ (MOLECULAR DYNAMICS – MD): ΒΑΣΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ – ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ – ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ ΓΙΑ ΦΩΤΟΑΠΟΔΟΜΗΣΗ ΜΕ LASER

3.1. Η σημασία της προσομοίωσης στην ανάλυση και μελέτη διαφόρων διεργασιών

Ένας μεγάλος αριθμός παρατηρούμενων φυσικών και χημικών φαινομένων χαρακτηρίζεται πολλές φορές από πολύπλοκες διεργασίες των οποίων η συμπεριφορά δεν είναι εύκολα προβλέψιμη. Η συμπεριφορά κατά την πραγματοποίηση αυτών των διεργασιών εξαρτάται από παραμέτρους, μεταβλητές λειτουργίας και μεγέθη παρεμβολής εξωτερικών παραγόντων, των οποίων οι τιμές διαφέρουν σημαντικά ανάλογα με ένα σημαντικό πλήθος συνθηκών. Στην προσπάθεια υπερπήδησης των όποιων εμποδίων εμφανίζονται στην προσπάθεια επακριβώς μελέτης ενός φαινομένου, κρίθηκε και εξακολουθεί να κρίνεται αναγκαία, από ένα μεγάλο πλήθος ερευνητών ανά τον κόσμο, η θέσπιση μιας σειράς από μοντέλα που έχουν ως σκοπό την όσο το δυνατό πιο αληθοφανή και ακριβή προσέγγιση του εκάστοτε μελετώμενου φαινομένου [105]:

- με τον απλούστερο αλλά και πληρέστερο δυνατό τρόπο,
- με τον ελάχιστο δυνατό φόρτο εργασίας,
- με το ελάχιστο δυνατό κόστος.

Το εργαλείο εκείνο που πληροί στο μέγιστο δυνατό βαθμό τις παραπάνω προϋποθέσεις και, ως εκ τούτου, παρουσιάζει ολοένα και πιο διαδεδομένη χρήση σε ένα ευρύ φάσμα επιστημονικών τομέων και όψεων, είναι η προσομοίωση (simulation). Σε γενικές γραμμές, η προσομοίωση αναπαριστά τη συμπεριφορά μιας φυσικής, βιομηχανικής, βιολογικής, οικονομικής, κοινωνικής ή στρατιωτικής διεργασίας, μέσω υλικού υποδείγματος, του οποίου οι παράμετροι και οι μεταβλητές αντικατοπτρίζουν τις αντίστοιχες μεθόδους της υπό μελέτη διεργασίας. Με πιο απλά λόγια, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η προσομοίωση αποτελεί ένα είδος μιμητικής αναπαράστασης ενός πραγματικού συστήματος ή μιας πραγματικής διεργασίας, συναρτήσει του χρόνου.

Η προσομοίωση μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μία σειρά από διαδεδομένες εφαρμογές, μερικές από τις οποίες είναι οι εξής:

- Προσομοίωση τεχνολογικών συστημάτων και κατασκευών για βελτιστοποίηση απόδοσης.
- Επιστημονική μοντελοποίηση φυσικών ή ανθρώπινων συστημάτων, με σκοπό την εμφάνιση στον τρόπο λειτουργίας τους.
- Πρόβλεψη των αποτελεσμάτων που θα επιφέρουν ενδεχόμενες μελλοντικές καταστάσεις, καθώς επίσης και παρουσίαση των πιθανών μεθόδων δράσεις που θα πρέπει να ακολουθηθούν για την αντιμετώπισή τους.
- Ανάπτυξη νέων υλικών καθώς επίσης και νέων μεθόδων παραγωγής τους.
- Βιοτεχνολογία και νανοτεχνολογία.

Σε γενικές γραμμές, τα δεδομένα εισόδου μιας προσομοίωσης είναι μεταβλητές απόφασης που καθορίζουν το σχεδιασμό της διαδικασίας, όπως π.χ. η πρόωση και η ταχύτητα κοπής ενός κοπτικού εργαλείου ή η πυκνότητα ενέργειας και η διάρκεια παλμού ενός Laser. Τα δεδομένα / αποτελέσματα εξόδου είναι δείκτες αποφάσεων, δηλαδή χαρακτηριστικές μεταβλητές της διαδικασίας και των οποίων οι τιμές εξαρτώνται από αυτές που έχουμε ορίσει για τα δεδομένα εισόδου [100]. Ένα τέτοιο δεδομένο εξόδου είναι ο ρυθμός αποβολής υλικού.

Κάθε Μηχανικός που δραστηριοποιείται σε διαφορετικό πεδίο ειδίκευσης θα μπορούσε να ορίσει την έννοια της προσομοίωσης με διαφορετικό τρόπο. Κοινό στοιχείο όμως όλων των επιμέρους ορισμών είναι το ότι η προσομοίωση αφορά τεχνικές που επιτρέπουν τη δυναμική μελέτη των μηχανισμών κίνησης των σωματιδίων ενός συστήματος σε μικροσκοπική λεπτομέρεια, καθώς επίσης και τον προσδιορισμό μακροσκοπικών ποσοτήτων από αυτούς τους μηχανισμούς [101][102]. Σε γενικές γραμμές, η προσομοίωση εξυπηρετεί τους εξής τρεις σκοπούς:

- Περιγραφή της συμπεριφοράς ενός συστήματος.
- Διερεύνηση των ιδιοτήτων ενός υποθετικού συστήματος.
- Σχεδίαση ενός καλύτερου συστήματος από το ήδη υπάρχον.

Ένα παράδειγμα εφαρμογής της προσομοίωσης αφορά την επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Newton σε *μικροσκοπική* κλίμακα. Μέσω της επίλυσης αυτής μπορούμε να αντιληφθούμε και να κατανοήσουμε τη *μακροσκοπική* συμπεριφορά ενός συστήματος [103]. Σε αυτή την τεχνική επίλυσης στηρίζεται η ιδιαίτερα διαδεδομένη μέθοδος προσομοίωσης της *Μοριακής Δυναμικής* (Molecular Dynamics – MD) [104], η οποία θα περιγραφεί σε επόμενη Υποενότητα.

3.2. Μοριακές προσομοιώσεις με H/Y – Επισκόπηση βασικών μεθόδων μοριακής μοντελοποίησης

3.2.1. Γενικά

Με τον όρο *προσομοίωση με Η/Υ* (Computer Simulation) ή *υπολογιστική μοντελοποίηση* (Computational Modeling), αναφερόμαστε στη μοντελοποίηση φυσικών συστημάτων και τη μελέτη και προσομοίωσή τους με υπολογιστικές μεθόδους. Αυτές οι μέθοδοι απαιτούν τη χρήση ενός ηλεκτρονικού υπολογιστή (Η/Υ) για την επίλυσή τους, λόγω της υψηλής πολυπλοκότητας αυτών αλλά και του μεγάλου αριθμού εξισώσεων που πρέπει να επιλυθούν για την εξαγωγή ενός ή περισσότερων τελικών αποτελεσμάτων. Πιο συγκεκριμένα, μία υπολογιστική μοντελοποίηση προσπαθεί να προσομοιώσει μία πραγματική ή υποθετική κατάσταση μέσω ενός κώδικα Η/Υ, με σκοπό να μελετηθεί η κατάσταση και να εξαχθούν πληροφορίες για τα χαρακτηριστικά ενός συστήματος και το πώς αυτά επηρεάζονται στην περίπτωση κατά την οποία μεταβάλλουμε τις τιμές μίας ή περισσότερων μεταβλητών. Η διενέργεια των παραπάνω μεταβολών μπορεί να βοηθήσει το Μηχανικό να κάνει προβλέψεις για τη συμπεριφορά του συστήματος.

Παραδοσιακά, οι πλέον διαδεδομένες μέθοδοι μοντελοποίησης συστημάτων καταστρώνονται με βάση ένα μαθηματικό μοντέλο, το οποίο αποσκοπεί στην εύρεση αναλυτικών λύσεων για το εκάστοτε πρόβλημα. Σε αυτή την περίπτωση, η πρόβλεψη της συμπεριφοράς του συστήματος καθίσταται εφικτή όταν στο υπολογιστικό μοντέλο εισάγονται οι παράμετροι, οι αρχικές και οι συνοριακές συνθήκες που περιγράφουν βέλτιστα το πρόβλημα. Η προσομοίωση με Η/Υ μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως συμπλήρωμα ή ως υποκατάστατο συστημάτων μοντελοποίησης για τα οποία δεν είναι δυνατή η εξαγωγή αναλυτικών λύσεων κλειστού τύπου [18]. Σε όλους τους διαφορετικούς τύπους υπολογιστικής μοντελοποίησης που χρησιμοποιούνται, το κοινό στοιχείο είναι η προσπάθεια γένεσης ενός δείγματος από αντιπροσωπευτικά σενάρια για ένα μοντέλο, στο οποίο είναι αδύνατη η πλήρης απαρίθμηση όλων των πιθανών καταστάσεων που ενδέχεται να προκύψουν.

Ένα από τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης με Η/Υ είναι η ικανότητα μελέτης *μακροσκοπικών* συστημάτων μέσω της ενσωμάτωσης *μικροσκοπικών* μοντέλων. Το μικροσκοπικό μοντέλο καθορίζεται με βάση τη μοριακή δομή και τις αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα μόρια. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων συγκρίνονται με τις αναλυτικές προβλέψεις και τα πειραματικά δεδομένα, με σκοπό την εξέταση της ακρίβειας του μοντέλου. Για αυτό το λόγο, οι υπολογιστικές προσομοιώσεις μπορούν, εφόσον έχουν εφαρμοστεί σωστά, να δώσουν μία ικανοποιητική εικόνα για ένα φαινόμενο ή μία κατάσταση, πολύ κοντά στη θεωρητική περιγραφή. Βέβαια, είναι σημαντικό εδώ να ληφθεί υπόψη το γεγονός ότι η προσπάθεια για πρόβλεψη των ιδιοτήτων ενός ή περισσότερων υλικών μέσω προσομοίωσης με Η/Υ μπορεί να υπόκειται σε περιορισμούς που σχετίζονται με χαρακτηριστικά του εκάστοτε Η/Υ, όπως η ταχύτητα και η μνήμη του επεξεργαστή, αλλά και η ακρίβεια του

υπολογιστικού κώδικα που θα χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση [18]. Συγκεκριμένα, όσο ταχύτερο είναι το υπολογιστικό σύστημα, τόσο πιο γρήγορα μπορεί να λάβει χώρα μία υπολογιστική μοντελοποίηση. Επίσης, όσο υψηλότερη είναι η υπολογιστική ισχύς τόσο το πλήθος των απαιτούμενων προσεγγίσεων τείνει να μειωθεί, με αποτέλεσμα την εξαγωγή ακριβέστερων αποτελεσμάτων. Ειδικά στην περίπτωση κατά την οποία χρησιμοποιούνται περισσότεροι από ένας H/Y σε συστοιχία, ο φόρτος εργασίας που πρέπει να αναληφθεί διαμοιράζεται εξίσου σε όλους τους H/Y, με τη συνολική υπολογιστική ισχύ να είναι κάτι παραπάνω από επαρκής προκειμένου για την ανάλυση και μελέτη πολύπλοκων συστημάτων που, υπό άλλες συνθήκες, θα ήταν πολύ πιο δύσκολο να προσομοιωθούν ικανοποιητικά.

Για την απεικόνιση, την περιγραφή και τον υπολογισμό της δομής ή των ιδιοτήτων ενός ή περισσότερων μορίων, μπορεί να πραγματοποιηθεί μία σειρά από διαδικασίες που εμπίπτουν στη γενική κατηγορία της *μοριακής μοντελοποίησης* (Molecular Modeling) ή *μοριακής προσομοίωσης* (Molecular Simulation). Η πλήρης ανάλυση και εξαγωγή συμπερασμάτων για οποιοδήποτε μελετώμενο φαινόμενο, καθώς επίσης και για την εξέλιξή του, είναι συνήθως αποτέλεσμα της συνδυασμένης εφαρμογής των πειραμάτων σε εργαστηριακό περιβάλλον και της μοριακής μοντελοποίησης. Η μοντελοποίηση μπορεί να υποδείξει, να αποδεχτεί, να αμφισβητήσει ή να απορρίψει πιθανά μοντέλα που περιγράφουν τις φυσικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα σε μοριακό επίπεδο, καθώς επίσης και να εξηγήσει και τους εσωτερικούς μηχανισμούς που διέπουν, σε ατομικό επίπεδο, αυτές τις διεργασίες. Αυτό σημαίνει ότι η προσομοίωση συμβάλλει στην καλύτερη κατανόηση των μηχανισμών που λαμβάνουν χώρα όσο εξελίσσεται το πείραμα, καθώς επίσης και στον καθορισμό των συνθηκών κάτω από τις οποίες λαμβάνει χώρα η πειραματική διαδικασία.

Οι μέθοδοι προσομοίωσης που χρησιμοποιούνται για διάφορες εφαρμογές και μελέτες φυσικών διεργασιών μπορούν να απευθύνονται είτε σε *μακροσκοπικό* είτε σε *μικροσκοπικό* επίπεδο. Οι μακροσκοπικές προσομοιώσεις μπορούν να προσεγγίσουν αρκετά ικανοποιητικά τις εκάστοτε πειραματικές συνθήκες, όσον αφορά το σύνολό τους, όμως οι μικροσκοπικές προσομοιώσεις μπορούν να παραγάγουν πολύ πιο ικανοποιητικά και ακριβή αποτελέσματα. Κάτι τέτοιο επιβεβαιώνεται στην περίπτωση των *μοριακών προσομοιώσεων*, καθώς ασχολούνται με τη μελέτη της συμπεριφοράς της ύλης σε *μοριακό* και *ατομικό* – άρα *μικροσκοπικό* – επίπεδο. Η παραπάνω πρόταση δικαιολογεί την ολοένα και αυξανόμενη τάση μελέτης και προσομοίωσης διαφόρων φυσικών ή χημικών διεργασιών μέσω μοριακής προσομοίωσης. Μάλιστα, αυτού του είδους η μελέτη πετυχαίνει την καλύτερη κατανόηση και αιτιολόγηση των εξαχθέντων αποτελεσμάτων, σε μακρομοριακό επίπεδο.

Οι κυριότερες μέθοδοι μοριακής προσομοίωσης που έχουν αναπτυχθεί σημαντικά και χρησιμοποιούνται σε ένα μεγάλο εύρος εφαρμογών είναι οι ακόλουθες τρεις:

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

- *Μοριακή Μηχανική* (Molecular Mechanics – MM).
- *Προσομοίωση Monte Carlo* (Monte Carlo Simulation – MC).
- *Μοριακή Δυναμική* (Molecular Dynamics – MD).

Κάθε μία από αυτές τις μεθόδους χρησιμοποιείται κατά κόρον για να επιτελέσει διαφορετικούς σκοπούς και να παράσχει πληροφορίες για διαφορετικά στοιχεία που αφορούν το σύστημα. Ο παρακάτω Πίνακας 3.1. συνοψίζει χαρακτηριστικά τα κυριότερα στοιχεία που αφορούν την κάθε μία από τις τρεις προαναφερθείσες μεθόδους προσομοίωσης:

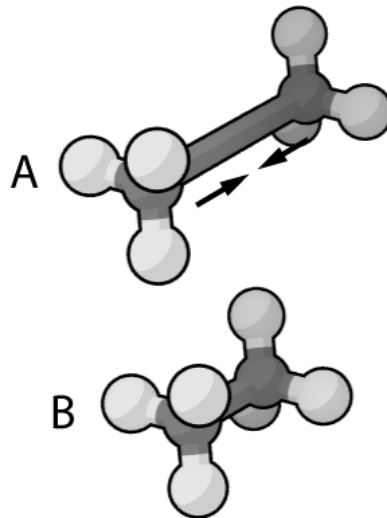
Μέθοδος	Σύνολα εφαρμογής μεθόδου	Αποτελέσματα μεθόδου
<i>Μοριακή Μηχανική (MM)</i>	Μεμονωμένα μόρια ή μικρά μοριακά συστήματα (οργανικά μόρια)	Βελτιστοποίηση γεωμετρίας Ελαχιστοποίηση ενέργειας Δυνατότητα χαρτογράφησης δυναμικού
<i>Monte Carlo (MC)</i>	Μεγάλος αριθμός ατόμων ή μορίων (κράματα, υγρά, αέρια)	Προσδιορισμός θερμοδυναμικών ιδιοτήτων και κίνησης σωματιδίων
<i>Μοριακή Δυναμική (MD)</i>	Μεγάλος αριθμός ατόμων ή μορίων (ανόργανα και οργανικά μόρια, όλες οι καταστάσεις της ύλης: στερεά / υγρή / αέρια)	Προσδιορισμός θερμοδυναμικών ιδιοτήτων και κίνησης σωματιδίων, καθώς επίσης και τη δυναμική μεταβολή των ιδιοτήτων

Η κύρια μέθοδος προσομοίωσης που θα μας απασχολήσει κατά τη διάρκεια της μελέτης μας είναι η *Μοριακή Δυναμική*. Παρ'όλα αυτά, αξίζει εδώ να κάνουμε μία συνοπτική παρουσίαση των άλλων δύο μεθόδων προσομοίωσης και των εφαρμογών στις οποίες χρησιμοποιούνται.

3.2.2. *Μοριακή Μηχανική (Molecular Mechanics – MM)*

Ως *Μοριακή Μηχανική* ορίζεται εκείνη η υπολογιστική μέθοδος που χειρίζεται τα άτομα των μορίων ως σύνολα αλληλεπιδρώντων μαζών. Η μοντελοποίηση των μοριακών συστημάτων, με χρήση της Μοριακής Μηχανικής, γίνεται με χρήση εξισώσεων και παραδοχών της κλασικής μηχανικής. Σε όλα τα συστήματα που μοντελοποιούνται με χρήση της Μοριακής Μηχανικής, η ενέργεια δυναμικού υπολογίζεται με χρήση *δυναμικών πεδίων* (force fields), τα οποία αναφέρονται στη μορφή και τις παραμέτρους του συνόλου των μαθηματικών εξισώσεων που υπολογίζουν την ενέργεια δυναμικού. Πιο συγκεκριμένα, ένα δυναμικό πεδίο περιλαμβάνει μαθηματικές συναρτήσεις των ατομικών

συντεταγμένων ή άλλων δομικών παραμέτρων, μέσω των οποίων μπορούν οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων να περιγραφούν αναλυτικότερα. Όπως φαίνεται και στο ακόλουθο Σχήμα 3.1., τα δυναμικά πεδία μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την ελαχιστοποίηση της ενέργειας έκτασης δεσμού ενός μορίου:



Σχήμα 3.1. Χρήση δυναμικού πεδίου για την ελάττωση της ενέργειας έκτασης του δεσμού που συνδέει τις δύο ρίζες $CH_3 - CH_3$ σε ένα μόριο αιθανίου (C_2H_6).

Τα βασικά χαρακτηριστικά των προσομοιώσεων με χρήση της Μοριακής Μηχανικής είναι τα εξής:

- Κάθε άτομο προσομοιώνεται σαν ένα μοναδικό σωματίδιο. Πιο συγκεκριμένα, τα φορτία του πυρήνα και των ηλεκτρονίων στο άτομο δε διαχωρίζονται, αλλά δίνουν ένα συνιστάμενο χαρακτήρα σημειακού ηλεκτρικού φορτίου στο άτομο, με την τιμή του φορτίου να είναι το άθροισμα όλων των επιμέρους φορτίων (μηδέν για ουδέτερα άτομα, μη μηδενικό για ιόντα).
- Για κάθε άτομο-σωματίδιο ορίζεται μία ακτίνα (τυπικά η ακτίνα *Van Der Waals*), μία πολικότητα και ένα συνεχές καθαρό φορτίο, το οποίο υπολογίζεται είτε πειραματικά είτε μέσω κβαντικών υπολογισμών.
- Η αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων εκφράζεται με δυνάμεις μεταξύ δέσμιων ατόμων που περιγράφονται μέσω αρμονικών ή πιο περίπλοκων συναρτήσεων, καθώς και με ηλεκτροστατικές δυνάμεις και δυνάμεις Van Der Waals μεταξύ μη-δέσμιων ατόμων.
- Οι αλληλεπιδράσεις μέσω δεσμών λαμβάνονται υπόψη ως «ελατήρια», για τα οποία η απόσταση ισορροπίας είναι ίση με το πειραματικό ή το υπολογισμένο μήκος δεσμού.

Η μέθοδος της Μοριακής Μηχανικής είναι ίσως η απλούστερη μέθοδος μοριακής προσομοίωσης όσον αφορά την εφαρμογή της, καθώς έχει ως σκοπό την ελαχιστοποίηση της ενέργειας του μορίου ως προς

όλους τους μικροσκοπικούς βαθμούς ελευθερίας του. Στα πλαίσια αυτής της μεθόδου, ένα ή περισσότερα μόρια τοποθετούνται μέσα στον κρύσταλλο, ενώ ελαχιστοποιείται η συνολική ενέργεια ελαχιστοποιείται ως προς τις θέσεις, τους προσανατολισμούς, τα μήκη και τις γωνίες δεσμών και περιστροφής των μορίων, αλλά και ως προς τις θέσεις των επιμέρους ατόμων από τα οποία απαρτίζονται τα μόρια. Οι Press et al. [106] προτείνουν μία σειρά από μεθόδους με τη βοήθεια των οποίων μπορεί να ελαχιστοποιηθεί η ενέργεια στα πλαίσια μιας προσομοίωσης MM. Η ανάλυση των πιθανών τρόπων ελαχιστοποίησης εκτείνεται πέραν των ορίων της παρούσας μελέτης μας. Μπορούμε όμως να αναφέρουμε συνοπτικά ότι η μόνη συνιστώσα της ελεύθερης ενέργειας Gibbs που λαμβάνεται υπόψη κατά την ελαχιστοποίηση της ενέργειας είναι αυτή της ενθαλπίας, την οποία και αναπαριστά το δυναμικό πεδίο. Παρ'όλα αυτά, η ανάλυση ισορροπίας μεταξύ διαφορετικών καταστάσεων απαιτεί επίσης να περιλαμβάνεται και η *διαμορφωτική εντροπία* (conformational entropy), με τον υπόψη όρο να αφορά την εντροπία που σχετίζεται με τη φυσική διεύθετηση των μονομερών μέσα σε μία πολυμερική αλυσίδα. Πάντως, η συμπερίληψη της διαμορφωτικής εντροπίας στην ελαχιστοποίηση της ενέργειας είναι ένα φαινόμενο σπάνιο μολονότι εφικτό.

3.2.3. Προσομοίωση Monte Carlo (Monte Carlo Simulation, MC)

Ο όρος *προσομοίωση Monte-Carlo* αναφέρεται σε μία σειρά από υπολογιστικούς αλγορίθμους που βασίζονται πάνω σε επαναλαμβανόμενη και τυχαία δειγματοληψία για τον υπολογισμό των επιθυμητών αποτελεσμάτων. Οι επιμέρους μέθοδοι που εμπίπτουν στη συγκεκριμένη κατηγορία χρησιμοποιούνται συχνά σε υπολογιστικές προσομοιώσεις φυσικών και μαθηματικών συστημάτων, εφαρμόζονται ικανοποιητικά με χρήση πακέτων λογισμικού H/Y και τείνουν να χρησιμοποιηθούν όταν είναι αδύνατος ο υπολογισμός ακριβών αποτελεσμάτων με χρήση αιτιοκρατικών (ντετερμινιστικών) αλγορίθμων.

Η προσομοίωση Monte Carlo είναι χρήσιμη ειδικά για την προσομοίωση συστημάτων με πολλούς συζευγμένους βαθμούς ελευθερίας, όπως συμβαίνει με υγρά, ανομοιογενή υλικά, ισχυρά συζευγμένα στερεά και κυτταρικές δομές. Χρησιμοποιούνται για τη μοντελοποίηση φαινομένων για τα οποία η αβεβαιότητα στα δεδομένα εισόδου είναι υψηλή, όπως π.χ. στην περίπτωση υπολογισμού του ρίσκου σε οικονομικές και επενδυτικές εφαρμογές. Χρησιμοποιούνται επίσης έντονα στα μαθηματικά, με ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα να αποτελεί την αξιολόγηση πολυδιάστατων ορισμένων ολοκληρωμάτων με περίπλοκες συνοριακές συνθήκες. Τέλος, σε εφαρμογές εξερεύνησης του διαστήματος ή κοιτασμάτων πετρελαίου, η χρήση της μεθόδου Monte Carlo συμβάλλει αποτελεσματικά στην επίτευξη των στόχων που τίθενται.

Η μέθοδος Monte Carlo θεσπίστηκε κατά τη δεκαετία του 1940 από τους Von Neumann, Ulam και Metropolis, στα πλαίσια εργασιών τους στο Εθνικό Εργαστήριο των Los Alamos (ΗΠΑ) για την κατασκευή πυρηνικών όπλων. Έλαβε την ονομασία της από το καζίνο του *Monte Carlo* (Μονακό), μαρτυρώντας με αυτό τον τρόπο ότι η μέθοδος χρησιμοποιεί τυχαία δεδομένα και αριθμούς, επομένως μπορεί να αντιμετωπιστεί σαν ένα παιχνίδι τύχης. Γι' αυτό το λόγο η μέθοδος αυτή κατατάσσεται στις *στοχαστικές* (stochastic methods).

Η γενική διαδικασία που ακολουθείται για την πραγματοποίηση της μεθόδου Monte Carlo απαρτίζεται από 4 σημεία-βήματα:

Βήμα 1^ο: Ορισμός ενός πεδίου πιθανών δεδομένων εισόδου.

Βήμα 2^ο: Τυχαία γένεση νέων δεδομένων εισόδου μέσω ορισμού πιθανοτήτων για κάθε ένα από αυτά, εντός του πεδίου που καθορίστηκε στο 1^ο Βήμα.

Βήμα 3^ο: Διενέργεια αιτιοκρατικού υπολογισμού στα δεδομένα εισόδου.

Βήμα 4^ο: Συγκέντρωση όλων των επιμέρους αποτελεσμάτων, με σκοπό την εξαγωγή ενός τελικού συμπεράσματος.

Η θέσπιση της μεθόδου Monte Carlo ως εναλλακτικής της Μοριακής Μηχανικής προέκυψε λόγω της ανάγκης προσδιορισμού ενός ολικού ελαχίστου στην τιμή της ενέργειας των δεσμών μεταξύ ατόμων. Πράγματι, η μέθοδος Monte Carlo αποσκοπεί στη στοχαστική διερεύνηση της επιφανειακής δυναμικής ενέργειας, μέσω *τυχαίας* τροποποίησης της διάταξης του μοριακού συστήματος. Πιο συγκεκριμένα, η ενέργεια κάθε διάταξης συγκρίνεται με την ενέργεια της προηγούμενης. Εάν αυτή είναι χαμηλότερη, τότε γίνεται αποδεκτή ως ενέργεια της τρέχουσας διάταξης, με δεδομένο ότι αποσκοπούμε στη συνεχή μείωση της επιφανειακής ενέργειας, μέχρι να φτάσουμε τελικά στην ελαχιστοποίησή της. Εάν αυτή είναι υψηλότερη, μην ικανοποιώντας επομένως την απαίτηση για ελαχιστοποίηση της ενέργειας, επιλέγεται τυχαία μια άλλη διάταξη.

Η μέθοδος Monte Carlo έχει ένα σημαντικό πλεονέκτημα, το οποίο αφορά τη δυνατότητα υπέρβασης πολλών ενεργειακών φραγμάτων από τη στοχαστική διερεύνηση. Μπορεί επίσης, μεταξύ άλλων, να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό του *ολοκληρώματος απεικονίσεων* (configurational integral) για ένα μόριο, μία διαδικασία που θα αποβεί χρήσιμη στην προσπάθεια προσομοίωσης και υπολογισμούς της θερμοδυναμικής της ρόφησης. Η μέθοδος αυτή αποτελεί ένα πολύ ισχυρό εργαλείο στα χέρια ενός ερευνητή ή Μηχανικού, για τον υπολογισμό θερμοδυναμικών ιδιοτήτων σε κατάσταση ισορροπίας, καθώς οι κινήσεις μπορούν να σχεδιαστούν κατά τέτοιο τρόπο ώστε να επιτρέπουν αξιόπιστη και αποτελεσματική δειγματοληψία της επιθυμητής πυκνότητας πιθανότητας. Τέλος, αναφέρουμε ότι οι Zhigilei et al. [12] παρουσιάζουν την τεχνική άμεσης προσομοίωσης Monte Carlo (*Direct Simulation*

Monte Carlo – DSMC) ως μία προτεινόμενη – και όχι απαραίτητα βέλτιστη – τεχνική περιγραφής της διαστολής της εξατμιζόμενης στήλης πλάσματος μετά το πέρας της φωτοαποδόμησης με Laser.

Η ολοκλήρωση Monte Carlo βασίζεται πάνω στην ακόλουθη Εξίσωση (3.1), η οποία δίνει το ολοκλήρωμα των απεικονίσεων για ένα σύστημα που περιγράφεται από ένα διάνυσμα N γενικευμένων συντεταγμένων q :

$$Z = \int \exp[-\beta V(q)] d^N q \quad (3.1)$$

όπου $\beta = (k_B T)^{-1}$, T η θερμοκρασία του όγκου προσομοίωσης και $d^N q$ ένας στοιχειώδης όγκος στο χώρο των απεικονίσεων, ο οποίος περιέχει την Ιακωβιανή (Jacobian) του μετασχηματισμού από τις καρτεσιανές στις γενικές συντεταγμένες.

Επιλέγουμε αρχικά μία τυχαία απεικόνιση q και στη συνέχεια υπολογίζουμε τη δυναμική ενέργεια που αντιστοιχεί στην απεικόνιση αυτή. Αμέσως μετά υπολογίζουμε τον παράγοντα Boltzmann k_B και την ποσότητα β . Η διαδικασία επαναλαμβάνεται N_T φορές, όπου N_T ο αριθμός των δοκιμών που διεξάγονται κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Τελικά, μία εκτιμώμενη τιμή για το ολοκλήρωμα απεικόνισης μπορεί να δοθεί μέσω της παρακάτω σχέσης (3.2):

$$Z = \frac{\Omega}{N_T} \sum_{i=1}^{N_T} \exp[-\beta V(q_i)] \quad (3.2)$$

με το συνολικό όγκο του χώρου απεικονίσεων, Ω , να δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\Omega = \int d^N q \quad (3.3)$$

Έχοντας τώρα υπολογίσει το ολοκλήρωμα απεικόνισης Z από τη Σχέση (3.2), μπορούμε πλέον να υπολογίσουμε το συντελεστή Henry, ο οποίος αντιπροσωπεύει την κλίση της καμπύλης ισόθερμης ρόφησης στο όριο των μηδενικών πιέσεων:

$$K_H = \frac{M_S}{RT\rho_S} \frac{Z}{Z^{ig}} \quad (3.4)$$

Η μέθοδος Monte Carlo πλεονεκτεί σημαντικά έναντι των παραδοσιακών τεχνικών ολοκλήρωσης, όσον αφορά τον υπολογισμό του ολοκληρώματος απεικόνισης. Όμως, δεν μπορεί να δώσει ακριβή και αξιόπιστα αποτελέσματα όταν ο αριθμός βαθμών ελευθερίας είναι μεγαλύτερος του 10. Κάτι τέτοιο συμβαίνει επειδή, όταν σε ένα σύστημα ο αριθμός βαθμών ελευθερίας είναι πολύ μεγάλος, τυχαία δημιουργημένες απεικονίσεις είναι εξαιρετικά πιθανό να αλληλοεπικαλυφθούν με τα όρια του κρυστάλλου. Κατά συνέπεια, η τιμή του παράγοντα Boltzmann γίνεται πολύ μικρή σε μία τέτοια περίπτωση, με αποτέλεσμα να καθίσταται αναποτελεσματικός ο υπολογισμός του Z και να αυξάνονται σημαντικά οι χρόνοι υπολογισμού που απαιτούνται, ώστε η προσομοίωση να φτάσει τις απεικονίσεις

χαμηλής ενέργειας, των οποίων η συνεισφορά στο ολοκλήρωμα απεικόνισης είναι σημαντική. Για τον υπολογισμό τέτοιων ολοκληρωμάτων, καλύτερα αποτελέσματα δίνει η χρήση *μεροληπτικών τεχνικών* (biased techniques), για τις οποίες δίνονται μεταξύ άλλων πληροφορίες στη βιβλιογραφία [107]-[110]. Μέσω των τεχνικών αυτών μπορούν να δημιουργηθούν απεικονίσεις που έχουν τη δυνατότητα επιλεκτικής δειγματοληψίας των περιοχών του χώρου των απεικονίσεων που συνεισφέρουν στο ολοκλήρωμα Z.

Στη Στατιστική Μηχανική, οι μακροσκοπικές ιδιότητες προσδιορίζονται ως μέσες τιμές ποσοτήτων που χαρακτηρίζουν τις μοριακές απεικονίσεις, ως προς μία κατανομή πιθανοτήτων των απεικονίσεων που υπαγορεύονται από τους εξωτερικούς περιορισμούς που επιβάλλει το κάθε σύστημα (κατανομή στατιστικού συνόλου ισορροπίας). Ο υπολογισμός αυτών των μέσων τιμών μπορεί να γίνει με τη βοήθεια ενός αλγορίθμου Monte Carlo, ο οποίος δημιουργεί μία ακολουθία απεικονίσεων ασυμπτωτικής δειγματοληψίας της επιθυμούμενης κατανομής πιθανοτήτων και τον οποίο έχουν προτείνει οι Metropolis et al. στη βιβλιογραφία [111]. Το τελικό αποτέλεσμα του αλγορίθμου Metropolis, το οποίο επιτυγχάνεται έπειτα από εκτενή επαναληπτική διαδικασία, εξασφαλίζει ότι οι απεικονίσεις που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό μέσων όρων είναι κατανεμημένες σύμφωνα με το κανονικό στατιστικό σύνολο. Με άλλα λόγια, ο συγκεκριμένος αλγόριθμος πραγματοποιεί δειγματοληψία των απεικονίσεων σύμφωνα με μία *προδιαγεγραμμένη* κατανομή, αυτή του κανονικού στατιστικού συνόλου. Οι μέσοι όροι που εξάγονται κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης είναι ισοδύναμη με τους μέσους όρους στατιστικού συνόλου (*ensemble averages*). Η αναλυτική διατύπωση και εφαρμογή του αλγορίθμου περιγράφεται στη βιβλιογραφία [111] και η εκτενής αναφορά μας σε αυτή εκτείνεται έξω από τα όρια της παρούσας μελέτης μας.

3.3. Η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής (Molecular Dynamics – MD): Αρχές και εφαρμογές

3.3.1. Εισαγωγή - Ορισμός

Η θέσπιση και η ανάπτυξη της μεθόδου της *Μοριακής Δυναμικής* (Molecular Dynamics – MD) άρχισαν να λαμβάνουν χώρα λόγω της ανάγκης να συμπεριλαμβάνεται η μεταβλητή του *χρόνου* στην εξέλιξη ενός υπό εξέταση συστήματος. Πράγματι, έχει πολύ μεγάλη σημασία ο εκάστοτε ερευνητής να μπορεί να παρατηρήσει όλες τις μεταβολές που μπορεί να πραγματοποιούνται σε ένα σύστημα καθώς περνάει ο χρόνος. Μέχρι το 1956, οπότε και αναπτύχθηκε αρχικά η μέθοδος από τους Adler και

Wainwright [112], οι έως τότε ανεπτυγμένες μέθοδοι υπολογιστικής προσομοίωσης αδυνατούσαν να δώσουν απευθείας πληροφορίες για τη δυναμική κατάσταση των συστημάτων, λόγω της μη συμπερίληψης του χρόνου στην εξέλιξη του συστήματος.

Η μέθοδος MD ανήκει στις *αιτιοκρατικές* (ντετερμινιστικές) μεθόδους προσομοίωσης, σε αντίθεση με τις στοχαστικές μεθόδους, των οποίων βασικός εκπρόσωπος είναι η μέθοδος Monte Carlo. Πρόκειται για μία ολοένα και περισσότερο χρησιμοποιούμενη προσέγγιση μέσω της οποίας προσομοιώνονται οι πραγματικοί μηχανισμοί συμπεριφοράς των υλικών, όπως προκύπτουν λόγω αλληλεπιδράσεων στο θεμελιώδες μοριακό επίπεδο. Πρόκειται για μία μέθοδο που μπορεί να παρουσιάσει με ιδιαίτερα υψηλή αξιοπιστία τα διάφορα δεδομένα, προσεγγίζοντας εξαιρετικά την πραγματικότητα, ενώ ταυτόχρονα μπορεί να βελτιώσει σημαντικά της υπολογιστικές δυνατότητες του πακέτου προσομοίωσης που χρησιμοποιείται στην κάθε περίπτωση [12][18][105][113]-[115][E1]. Μάλιστα, η συγκεκριμένη μέθοδος έχει αναπτυχθεί σε πολύ μεγάλο βαθμό τα τελευταία χρόνια, ειδικά στον τομέα της αλληλεπίδρασης Laser-υλικών [12][16] και της φωτοαποδόμησης με Laser βραχέων παλμών [2][3][19] και υπερβραχέων παλμών [3][5][7][8][12][15][28][117]. Αποτελεί επίσης σημαντικό εργαλείο για τη μελέτη της διαδικασίας σχηματισμού υλικών και προσδιορισμού των ιδιοτήτων τους, καθώς επίσης και για τη μελέτη προβλημάτων μετάδοσης ενέργειας [118]-[121] στα οποία η χρήση της Μοριακής Μηχανικής ή της μεθόδου Monte Carlo κρίνεται ανεπαρκής. Μάλιστα, η ανάπτυξη της μεθόδου MD σε βάρος των δύο προαναφερθεισών, οφείλεται επίσης σε μεγάλο βαθμό στη ραγδαία ανάπτυξη της υπολογιστικής ισχύος των σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων. Επίσης, η μη ανάγκη για τη διατύπωση παραδοχών όσον αφορά το χαρακτήρα των υπό εξέταση διεργασιών, αποτελεί ένα σημαντικό πλεονέκτημα που κάνει τη μέθοδο MD ικανή να ανακαλύψει νέα φυσικά φαινόμενα και διεργασίες, απλά με τη βοήθεια ενός υπολογιστικού πειράματος.

Η Μοριακή Δυναμική ορίζεται ως *μία τεχνική υπολογιστικής προσομοίωσης που επιτρέπει την πρόβλεψη της χρονικής εξέλιξης ενός συστήματος από σωματίδια που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους (άτομα, μόρια, κόκκοι κλπ.)* [12][114][115]. Πρόκειται για μία μέθοδο που συνδέει την υπολογιστική προσομοίωση με τη Στατιστική Μηχανική, με σκοπό τον υπολογισμό των ιδιοτήτων ισορροπίας και μεταφοράς ενός *κλασικού* συστήματος αποτελούμενου από πολλά σώματα [18]. Οι ιδιότητες ισορροπίας περιλαμβάνουν την ενέργεια, τη θερμοκρασία και την πίεση ενός συστήματος, ενώ οι ιδιότητες μεταφοράς περιλαμβάνουν το συντελεστή διάχυσης, τη διατμητική συνεκτικότητα (*shear viscosity*) και τη θερμική αγωγιμότητα ενός συστήματος.

3.3.2. Ιστορική αναδρομή

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, οι Adler και Wainwright ανέπτυξαν πρώτοι τη μέθοδο MD το 1956, ενώ μέχρι τα τέλη της δεκαετίας του 1950 συνέταξαν επαρκές βιβλιογραφικό υλικό ικανό να περιγράψει τις γενικές αρχές που χαρακτηρίζουν τη μέθοδο [112][116]. Η μέθοδος αυτή αναπτύχθηκε με σκοπό την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Newton, για ένα σύστημα N ατόμων τα οποία υποτίθεται ότι αλληλεπιδρούν μεταξύ τους με κάποιο γνωστό δυναμικό. Οι μελέτες των Adler και Wainwright οδήγησαν στη διατύπωση και καθιέρωση νέων απόψεων μεγάλης σημασίας για τον τρόπο με τον οποίο συμπεριφέρονται τα απλά υγρά.

Το 1964, ο Rahman διεξήγαγε την πρώτη προσομοίωση MD σε ένα ρεαλιστικό σύστημα, κάτι που αποτέλεσε το επόμενο μεγάλο βήμα για την καθιέρωση της μεθόδου αυτής ως κυρίαρχη για τη διεξαγωγή προσομοιώσεων. Η προσομοίωση αυτή, της οποίας η αναλυτική περιγραφή γίνεται από τον ίδιο στη βιβλιογραφία [122], χρησιμοποιεί εξισώσεις που εκφράζουν αρκετά ρεαλιστικά τις διαμοριακές δυνάμεις στο αργό (Ar), σε υγρή κατάσταση. Μία ακόμα ρεαλιστική προσομοίωση MD σε υγρό έγινε από τους Rahman και Stillinger [123] το 1974, με το υγρό αυτό να είναι το νερό (H_2O). Η ολοένα και αυξανόμενη χρήση των ηλεκτρονικών υπολογιστών, ήδη από τα μέσα της δεκαετίας του 1970, επέτρεψε στους McCammon et al. [124] να προχωρήσουν στις προσομοιώσεις MD για πρωτεΐνες, με την εξομοίωση του παρεμποδιστή της παγκρεατικής θρυψίνης (*Bovine Pancreatic Trypsin Inhibitor, BPTI*).

Έως σήμερα, υπάρχουν διαθέσιμες πολυάριθμες μελέτες προσομοίωσης MD για διαλύματα πρωτεϊνών-DNA και συστημάτων λιπιδίων, μεταλλάξεων σε μικροοργανισμούς (π.χ. ιός STMV – *Satellite Tobacco Mosaic Virus*, «δορυφορικός μωσαϊκός ιός καπνού») και θρεπτικά στοιχεία (π.χ. νόσος *Gaucher*, η οποία οφείλεται στη μετάλλαξη της πρωτεΐνης N370S), καθώς επίσης και για τη μελέτη της συμπεριφοράς των επιφανειών αλλά και των σωματιδίων που τις απαρτίζουν, όταν έχει λάβει χώρα ακτινοβολήση των επιφανειών με χρήση συνεχούς ή παλμικού Laser, ή ακόμα και φωτοαποδόμησή τους με Laser (*Laser Ablation*).

3.3.3. Χαρακτηριστικά και ανάλυση της μεθόδου MD

Σε γενικές γραμμές, μία προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, για ένα σύστημα αποτελούμενο από πολλά σωματίδια, μπορεί να λάβει χώρα σε τρία διακριτά βήματα:

- **Βήμα 1^ο:** Καθορισμός των αρχικών θέσεων και της ορμής των σωματιδίων του συστήματος. Τα σωματίδια αλληλεπιδρούν μεταξύ τους κάτω από ένα ενσωματωμένο δυναμικό. Κατά συνέπεια, το

δυναμικό αυτό καθορίζει το βαθμό στον οποίο τα αποτελέσματα της προσομοίωσής μας αναπαριστούν το σύστημα που μας ενδιαφέρει.

- **Βήμα 2^ο:** Εξέλιξη του συστήματος με βάση το δεύτερο νόμο του Newton, του οποίου η γενική μορφή παρουσιάζει τη δύναμη που ασκείται σε κάθε σωματίδιο i ως ανάλογη της επιτάχυνσής του και της μάζας του, δηλαδή $F_i = m_i a_i$. Από την οπτική σκοπιά, τα σωματίδια κινούνται γύρω-γύρω στο κουτί προσομοιώσεων, με κάθε ένα από αυτά να ακολουθεί μια καθορισμένη διαδρομή στο χώρο.
- **Βήμα 3^ο:** Μέτρηση φυσικών ποσοτήτων συναρτήσει της θέσης και της ορμής των σωματιδίων.

Η διενέργεια μιας προσομοίωσης MD απαιτεί τη συγκέντρωση γνώσεων που σχετίζονται με τη *δυναμική κατάσταση* ενός συστήματος, δηλαδή τον τρόπο με τον οποίο αυτό εξελίσσεται στο πεδίο του χρόνου. Για αυτό το λόγο, είναι απαραίτητο ο ερευνητής να ακολουθήσει μία διαφορετική προσέγγιση από αυτή που χαρακτηρίζει άλλες μεθόδους υπολογιστικής προσομοίωσης (π.χ. Monte Carlo ή Μοριακή Μηχανική), λαμβάνοντας υπόψη ως κυριότερο χαρακτηριστικό τη δυνατότητα αναπαράστασης της χρονικής εξέλιξης του συστήματος, όσον αφορά την τελική επιλογή της προσέγγισης που θα χρησιμοποιηθεί.

Αν επιθυμούμε να αναζητήσουμε μία μέθοδο προσομοίωσης στην οποία η διαδικασία και τα αποτελέσματα προσεγγίζουν βέλτιστα την πραγματική πειραματική διαδικασία, τότε η Μοριακή Δυναμική αντιστοιχεί καλύτερα σε αυτή την προσπάθεια βέλτιστης προσέγγισης. Η εξήγηση για την παραπάνω πρόταση είναι η εξής:

- **Περίπτωση Πειραματικής Διαδικασίας**

Αρχικά προετοιμάζουμε το υλικό που θα μελετηθεί. Φέρουμε το δείγμα σε μία διάταξη συνδεδεμένη με κάποιο όργανο μέτρησης, το οποίο μπορεί να μετρήσει αξιόπιστα το μέγεθος που μας ενδιαφέρει (π.χ. θερμομέτρο για τη θερμοκρασία). Πραγματοποιούμε μέτρηση της ζητούμενης ιδιότητας για ένα συγκεκριμένο χρονικό διάστημα, διαφορετικό κατά περίπτωση. Σε περίπτωση που αυτές οι μετρήσεις υπόκεινται σε στατιστικό θόρυβο (*statistical noise*), ένα συχνότατα εμφανιζόμενο φαινόμενο που αφορά την εμφάνιση εμβόλιμων μετρήσεων που δεν ακολουθούν ένα γενικό στατιστικό μοτίβο που χαρακτηρίζει την πλειονότητα των μετρήσεων, αυξάνουμε τον αριθμό των μετρήσεων και λαμβάνουμε το μέσον όρο αυτών ως προς το χρόνο. Με αυτό τον τρόπο η ακρίβεια των μετρήσεων αυξάνεται.

- **Περίπτωση προσομοίωσης MD**

Οι ακολουθούμενες διαδικασίες στην προσομοίωση MD και στην πραγματική διαδικασία είναι ταυτόσημες. Αρχικά προετοιμάζεται το υπό μελέτη δείγμα, μέσω της βέλτιστης και πλέον αξιόπιστης επιλογής του φυσικού συστήματος που περιγράφεται. Επειδή, όπως αναφέρθηκε ήδη, η μέθοδος MD βασίζεται πάνω στην επίλυση των εξισώσεων του Newton, εάν έχουμε ένα σύστημα που αποτελείται από

N σωματίδια εφαρμόζουμε επαναληπτική επίλυση των εξισώσεων για όλα τα σωματίδια του συστήματος, μέχρις ότου να μην υπάρχει πλέον μεταβολή στις ιδιότητες του συστήματος με την πάροδο του χρόνου. Η λήψη των μετρήσεων λαμβάνεται από τη στιγμή που έχει επέλθει πλήρης ισορροπία στο σύστημα.

Στην πραγματικότητα, πολλά από τα κοινά σφάλματα που λαμβάνουν χώρα σε μία υπολογιστική μέθοδο έχουν χαρακτήρα παρόμοιο με τα σφάλματα που μπορούν να γίνουν και σε ένα πραγματικό πείραμα. Για παράδειγμα, το δείγμα μπορεί να μην έχει προετοιμαστεί κατάλληλα, η χρονική περίοδος στην οποία λαμβάνει χώρα η ανάλυση μπορεί να είναι πολύ μικρή, κάποια από τις μεταβολές που γίνονται κατά τη διάρκεια της ανάλυσης να είναι μη αντιστρεπτή ή τελικά να μην έχει επιτευχθεί η μέτρηση του επιθυμητού μεγέθους.

Συνοψίζοντας τα παραπάνω, αναφέρουμε ότι η βασική ιδέα που χαρακτηρίζει τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής είναι η εξής: *από τη στιγμή που κάθε υλικό ή ουσία σχηματίζεται από στοιχειώδη σωματίδια, τότε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε στατιστικές μεθόδους για τον καθορισμό των μακροσκοπικών φυσικών ιδιοτήτων των υλικών/ουσιών, εφόσον έχουμε καθορίσει τις βασικές δυναμικές παραμέτρους των σωματιδίων από τα οποία αποτελούνται.*

Η ερμηνεία των στιγμιαίων μετρήσεων MD, όπως περιγράφηκαν στα πλαίσια του Βήματος 3, υπό τη μορφή ιδιοτήτων ισορροπίας, γίνεται μέσω της εφαρμογής μεθόδων Στατιστικής Μηχανικής (*statistical mechanics*). Στη Στατιστική Μηχανική, μία μακροσκοπική ιδιότητα ενός συστήματος αποτελεί το μέσο όρο αυτής της ιδιότητας σε όλες τις πιθανές κβαντικές καταστάσεις. Κάτι τέτοιο αναφέρεται με τον όρο *ολικός μέσος* (*ensemble average*). Η ακολουθούμενη υπόθεση εργασίας αναφέρει ότι οι χρονικά σταθμισμένες ιδιότητες ενός πραγματικού συστήματος είναι ίσες με τους ολικούς μέσους των ιδιοτήτων αυτών. Επομένως, από τη λήψη του μέσου όρου όλων των μετρήσεων μέσα σε μία προσομοίωση MD μπορούν να προκύψουν οι μακροσκοπικές ιδιότητες του συστήματος. Επίσης, οι ιδιότητες μεταφοράς μπορούν να υπολογιστούν μέσα από τα δεδομένα επειδή είναι διαθέσιμες οι πλήρεις διαδρομές των σωματιδίων. Οι ιδιότητες αυτές ορίζονται υπό μορφή χρονοεξαρτώμενων συναρτήσεων συσχέτισης, σε ατομικό επίπεδο.

Η μέθοδος MD επιτρέπει σε έναν ερευνητή να ακολουθήσει την εξέλιξη ενός συστήματος N σωματιδίων στο χρόνο, μέσω της επίλυσης ενός συνόλου από κλασικές εξισώσεις κίνησης για όλα τα σωματίδια του συστήματος. Εάν για κάθε σωματίδιο i μέσα στο σύστημα ορίσουμε ως $\overset{\mathbf{u}}{F}_i$ το διάνυσμα της δύναμης που ασκείται στο σωματίδιο, λόγω της αλληλεπίδρασής του με άλλα σωματίδια μέσα στο σύστημα, m_i τη μάζα του και $\overset{\mathbf{u}}{r}_i$ τη χωρική του θέση, τότε το σύνολο των εξισώσεων που θα πρέπει να επιλυθούν διατυπώνεται ως εξής:

$$m_i \frac{d^2 \overset{\mathbf{u}}{r}_i}{dt^2} = \overset{\mathbf{u}}{F}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.5)$$

Όσο για τη δύναμη που ασκείται στο i -οστό σωματίδιο σε μία δεδομένη χρονική στιγμή, αυτή μπορεί να ληφθεί από το δυναμικό διασωματιδιακής αλληλεπίδρασης, $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$, το οποίο είναι γενικώς μία συνάρτηση των θέσεων όλων των σωματιδίων, όπως φαίνεται και από την παρακάτω σχέση:

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (3.6)$$

Αυτή η συνάρτηση δυναμικού είναι πολύ σημαντικό να χρησιμοποιηθεί λόγω της ηλεκτρικής και ηλεκτρομαγνητικής φύσης των δυνάμεων. Μάλιστα, στις περισσότερες περιπτώσεις, λαμβάνεται υπόψη η αλληλεπίδραση μεταξύ δύο ή τριών σωματιδίων και όχι περισσότερων. Εάν υπάρχουν στο σύστημα περισσότερα από τρία σωματίδια, είτε θα αμεληθεί η συνεισφορά τους είτε θα παρουσιαστούν υπό μορφή διορθωτικού συντελεστή στην εξίσωση δυναμικού.

Όταν θα έχουν οριστεί οι αρχικές συνθήκες, δηλαδή οι αρχικές θέσεις και ταχύτητες όλων των σωματιδίων του συστήματος, καθώς επίσης και το δυναμικό αλληλεπίδρασης, οι εξισώσεις κίνησης (3.5) θα μπορούν να επιλυθούν μέσω ολοκλήρωσης, με αποτέλεσμα να ληφθούν εντέλει η ταχύτητα και η μετατόπιση. Αν οι ολοκληρώσεις αυτές γίνουν για κάθε άτομο και σε διάφορα χρονικά διαστήματα σε σχέση με μία αρχική κατάσταση, τότε μπορούμε να συγκεντρώσουμε μία σειρά από πληροφορίες, όπως η κίνηση του κάθε ατόμου αλλά και η χωρική και η χρονική εξέλιξη των δομικών και θερμοδυναμικών μοτίβων του συστήματος. Για παράδειγμα, μπορούν να εξαχθούν πληροφορίες για την ανάλυση της εξέλιξης των ελαττωματικών δομών ή των μετασχηματισμών φάσης σε ατομικό επίπεδο, καθώς επίσης και να συσχετιστούν με τις μεταβολές θερμοκρασίας και πίεσης στο σύστημα.

Ο νόμος του Newton δεν μπορεί να δώσει επαρκή και ακριβή αποτέλεσμα όταν η γεωμετρία πάνω στην οποία θα εφαρμοστεί η μέθοδος MD είναι περίπλοκη. Ανάλογα με τον τύπο μοριακού μοντέλου που χρησιμοποιείται, υπάρχει η δυνατότητα χρήσης μιας γενικευμένης εξίσωσης του Newton. Μια τέτοια εξίσωση μπορεί για παράδειγμα να χρησιμοποιηθεί στην περίπτωση χρήσης του μοντέλου στερεού σώματος, όπου πρέπει να ληφθεί υπόψη η περιστροφή των μορίων γύρω από τη θέση ισορροπίας. Ακόμα όμως και σε αυτή την περίπτωση, το μοντέλο MD απαιτεί να δεχθεί ως μοναδική είσοδο τη συνάρτηση δυναμικού διασωματιδιακής αλληλεπίδρασης, $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$ [12]. Επίσης, ανεξάρτητα από την πολυπλοκότητα της κάθε εξίσωσης κίνησης, χρησιμοποιείται μία κοινή διαδικασία προσομοίωσης, η οποία χαρακτηρίζεται από τα ακόλουθα στάδια:

- Ολοκλήρωση της εξίσωσης κίνησης για κάθε μόριο (χρήση της Εξίσωσης 3.1 παραπάνω, ή της γενικευμένης εξίσωσης Newton).
- Υπολογισμός των δυναμικών παραμέτρων.

- Υπολογισμός των μέσων τιμών των δυναμικών παραμέτρων, με τελικό σκοπό την εξαγωγή των μακροσκοπικών φυσικών ιδιοτήτων.

Η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής, παρά τα αποδεδειγμένα πλεονεκτήματά της στις διαδικασίες προσομοίωσης, εμφανίζει δύο πολύ σημαντικούς περιορισμούς. Αυτοί είναι οι ακόλουθοι:

Περιορισμός 1^{ος}: Ανάγκη για καθορισμό μιας όσο το δυνατόν ακριβέστερης σχέσης που περιγράφει το δυναμικό αλληλεπίδρασης.

Περιορισμός 2^{ος}: Περιορισμός στο μέγεθος των συστημάτων που μπορούν να μελετηθούν.

Ο πρώτος περιορισμός μπορεί να εκφραστεί με τη βοήθεια διαφόρων εμπειρικών σχέσεων, όπως αυτής του δυναμικού *Stillinger-Weber*, για την οποία γίνεται λόγος στη βιβλιογραφία [125] και η οποία αναφέρεται στο πυρίτιο (Si). Οι εμπειρικές σχέσεις που χρησιμοποιούνται έχουν δοκιμαστεί και σε πειραματικό επίπεδο, και μπορούν να περιγράψουν ικανοποιητικά τα περισσότερα υλικά που ενδιαφέρουν το Μηχανικό.

Ο δεύτερος περιορισμός είναι και ο πιο σημαντικός, και αφορά το μέγιστο αριθμό ατόμων ή μορίων που μπορεί να περιλαμβάνει ένα σύστημα ώστε να προσομοιωθεί επαρκώς. Στην περίπτωση των ρευστών, το υπό εξέταση σύστημα μπορεί να περιλαμβάνει έως και 200.000 μόρια, ενώ ένα σύστημα στερεών μπορεί να περιλαμβάνει έως και 10 με 100 εκατομμύρια άτομα ώστε να γίνει εφικτή μία προσομοίωση MD. Βέβαια, για το μέγιστο αριθμό ατόμων που μπορούν να προσομοιωθούν σε ένα σύστημα στερεών παίζει ρόλο και ο απαιτούμενος χρόνος προσομοίωσης. Για παράδειγμα, η ανάγκη εξαγωγής στατιστικών στοιχείων για τα φωνόνια, για την ολοκλήρωση της οποίας απαιτείται ένα πολύ μεγάλο χρονικό διάστημα, αυξάνει σημαντικά τους χρόνους προσομοίωσης σε ένα σύστημα αποτελούμενο π.χ. από $5 \cdot 10^7$ άτομα Si, διατεταγμένα σε έναν κύβο προσομοίωσης με ακμή 1000 Å. Στα παραπάνω θα πρέπει να ληφθεί υπόψη και η μέση ελεύθερη διαδρομή των φωνονίων (φορέων θερμότητας) στο Si, η οποία είναι, σύμφωνα με τους Goodson και Ju [126], ίση με 3000 Å, δηλαδή τρεις φορές την ακμή του κύβου προσομοίωσης.

Η μελέτη της μετάδοσης θερμότητας, η οποία αποτελεί σημαντικό τμήμα της γενικότερης εξέτασης του φαινομένου της φωτοαποδόμησης με χρήση Laser, μπορεί να γίνει με χρήση δύο διαφορετικών προσεγγίσεων MD: της *ισορροπίας* (equilibrium approach) και της *μη-ισορροπίας* (nonequilibrium approach). Στα πλαίσια της προσέγγισης ισορροπίας, εισάγονται στο σύστημα μικρές διακυμάνσεις της θερμοκρασίας, ώστε να δημιουργούνται στιγμιαίες ροές ενέργειας. Παρά το γεγονός ότι, μετά την πάροδο κάποιου χρονικού διαστήματος, η μέση τιμή της θερμικής ροής δεν υφίσταται πλέον (λόγω του *στιγμιαίου* χαρακτήρα της θερμικής ροής), η θερμική αγωγιμότητα του συστήματος ως προς την επιβληθείσα διαταραχή μπορεί να υπολογιστεί από τη συνάρτηση *Green-Kubo* [127] για την αυτοσυσχέτιση της ροής θερμότητας. Η διαδικασία σύγκλισης είναι αργή, όμως εισάγονται κάποιες

συνοριακές περιοδικές συνθήκες που επιτρέπουν την εξέταση συστημάτων οποιουδήποτε μεγέθους, ανεξάρτητα από τη μέση ελεύθερη διαδρομή των φωνονίων (κάτι που έρχεται σε αντίθεση με την περίπτωση της μη-ισορροπίας, την οποία θα εξετάσουμε αμέσως παρακάτω). Όμως, είναι σημαντικό η συγκεκριμένη διαδικασία MD να γίνεται με πολλή προσοχή, επειδή το μοντέλο προσομοίωσης είναι πεπερασμένο και, ως εκ τούτου, εγκυμονεί ο κίνδυνος εισροής πλασματικών επιδράσεων μεγέθους που δεν έχουν σχέση με το υπό εξέταση σύστημα.

Στην περίπτωση της προσέγγισης μη-ισορροπίας, επιβάλλεται κάποια διαφορά θερμοκρασίας ή ροή ενέργειας στο σύστημα, με αποτέλεσμα τη μεταβολή των δυναμικών χαρακτηριστικών των ατόμων σε τοπικές συνοριακές περιοχές [128]. Οι Zhigilei *et al.* [12] αναφέρουν ως πλεονέκτημα του συγκεκριμένου τρόπου τη δυνατότητα ανάλυσης ταχέων διαδικασιών μη-ισορροπίας με απεριόριστη ανάλυση ατομικού επιπέδου, κάτι που επιτρέπει την εξαγωγή πλήρων πληροφοριών για τα φαινόμενα που ενδιαφέρουν το Μηχανικό στην εκάστοτε περίπτωση. Όμως, αυτός ο τρόπος προσομοίωσης MD παρουσιάζει και ορισμένα μειονεκτήματα:

- Για τη σταθεροποίηση των θερμοκρασιών στα όρια της περιοχής προσομοίωσης, θα πρέπει οι συνοριακές περιοχές να περιλαμβάνουν μεγάλο αριθμό ατόμων στο προς χρήση μοντέλο, με αποτέλεσμα την αύξηση των απαιτήσεων σε όγκο εξισώσεων και υπολογιστική ισχύ.
- Τα συστήματα που μπορούν να προσομοιωθούν είναι μικρότερα σε σχέση με τη μέση ελεύθερη διαδρομή των φωνονίων, με αποτέλεσμα το μέγιστο δυνατό μήκος κύματος των φωνονίων να περιορίζεται.
- Προκειμένου τα στατιστικά στοιχεία που αφορούν τη θερμοκρασία να συγκλίνουν σε μία σταθερή τιμή, απαιτείται μία πολύ υψηλή θερμοκρασιακή κλίση, κάτι που δυσκολεύει σημαντικά τον καθορισμό της θερμικής αγωγιμότητας σε συνήθεις θερμοκρασίες.

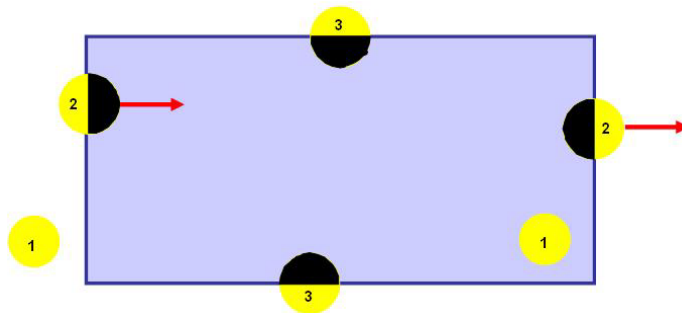
Η προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής βοηθά στον υπολογισμό χαρακτηριστικών όπως ο χρόνος χαλάρωσης, το φάσμα των φωνονίων και η ταχύτητα και πυκνότητα κάθε κατάστασης, με γνωστές τη χρονική εξέλιξη τόσο της τροχιάς του κάθε ατόμου όσο και της ταχύτητάς τους. Αυτές οι πληροφορίες μπορούν να εισαχθούν στην εξίσωση Boltzmann, κάτι που μπορεί, με τη βοήθεια και της μεθόδου MD, να οδηγήσει στην επίτευξη άμεσων αποτελεσμάτων όσον αφορά την αντιμετώπιση προβλημάτων μετάδοσης θερμότητας στο μέσο επίπεδο. Ταυτόχρονα, τα ελαττωματικά επίπεδα αλληλεπίδρασης και ο μη αρμονικός διασκορπισμός μπορούν να μελετηθούν με χρήση της Μοριακής Δυναμικής. Όμως, πρέπει να προσέξουμε ότι η χρήση της κλασικής MD περιορίζεται μόνο σε προβλήματα υψηλών θερμοκρασιών, επειδή στην υπο-μέθοδο αυτή δεν περιλαμβάνονται αρχές κβαντικής στατιστικής, καθώς επίσης και ο μηχανισμός κβαντικού διασκορπισμού. Σημειώνουμε εδώ ότι η κλασική MD χρησιμοποιείται για τη μελέτη συστημάτων με μεγάλο αριθμό σωματιδίων, των οποίων οι πυρήνες κινούνται με βάση τους

νόμους της Κλασικής Μηχανικής. Αυτό δηλαδή σημαίνει ότι αμελούνται τυχόν κβαντικά φαινόμενα, μία προσέγγιση που μπορεί να εφαρμοστεί χωρίς προβλήματα για πολλά χρησιμοποιούμενα υλικά. Όμως, τα κβαντικά φαινόμενα δεν μπορούν να αμεληθούν εάν έχουμε ελαφρά άτομα ή μόρια (π.χ. He , H_2 , D_2 όπου D το δευτέριο, υδρογόνο με 1 πρωτόνιο και 1 νετρόνιο) που εκτελούν μεταφορική ή περιστροφική κίνηση, ή αν έχουμε οποιαδήποτε μόρια που εκτελούν δονητική κίνηση, κατά τέτοιον τρόπο ώστε $h_\nu \approx k_B T$.

Έστω ότι ένα σύστημα MD αποτελείται από N άτομα. Θεωρούμε, στα πλαίσια της κλασικής Μοριακής Δυναμικής ανάλυσης, ότι αυτά τα άτομα βρίσκονται μέσα σε ένα κυτίο όγκου ορθογωνίου παραλληλεπιπέδου, με διαστάσεις L_x, L_y και L_z στους τρεις άξονες x, y και z αντίστοιχα. Η πυκνότητα του συστήματος, δηλαδή τα άτομα ανά μονάδα όγκου, χαρακτηρίζονται προφανώς από τον αριθμό των ατόμων και τον όγκο του κυτίου. Το άπειρο σύστημα προσομοιώνεται μέσω των περιοδικών συνθηκών στα άκρα του κυτίου, οι οποίες εκφράζονται, για ένα τυχαίο μέγεθος M , με τη βοήθεια της παρακάτω σχέσης:

$$M(x) = M(x + nL) \tag{3.7}$$

Όπου $n = (n_x, n_y, n_z)$, $n_{x,y,z} \in \Delta$ και $L = (L_x, L_y, L_z)$. Αυτό δηλαδή σημαίνει ότι, κάθε φορά που ένα σωματίδιο εξέρχεται από τη μία πλευρά του κυτίου, θεωρούμε ότι εισέρχεται από την αντίθετη με την ίδια ταχύτητα, όπως φαίνεται και στο ακόλουθο Σχήμα 3.2.:



Σχήμα 3.2. Σχηματική αναπαράσταση της γενικής αρχής εφαρμογής των περιοδικών συνθηκών. Κατά την έξοδο ενός σωματιδίου από τη μία πλευρά του κυτίου, το ίδιο αυτό σωματίδιο εισέρχεται και πάλι στο κυτίο από την αντίθετη πλευρά και με την ίδια ταχύτητα.

Τα N σωματίδια που περιλαμβάνονται στο σύστημα εμφανίζουν μία συνολική δυναμική ενέργεια, για ένα κεντρικό και προσθετικό δυναμικό ζεύγους ϕ , ίση με:

$$\Phi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi_{ij}(|r_i - r_j|) \tag{3.8}$$

όπου r_i και r_j οι αντίστοιχες θέσεις των ατόμων i και j . Η χρήση των περιοδικών συνθηκών απαιτεί την εισαγωγή μίας εμβέλειας αλληλεπίδρασης του δυναμικού, ώστε να υπολογιστούν τόσο το δυναμικό ως και οι δυνάμεις. Η εμβέλεια αυτή ονομάζεται *ακτίνα αποκοπής*, r_o , και θα πρέπει να πληροί την ακόλουθη συνθήκη:

$$r_o : r_i \leq \frac{\min(L_x, L_y, L_z)}{2} \quad (3.9)$$

ώστε να αποφευχθούν τυχόν αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων i και j , όπως επίσης και μεταξύ του i και των περιοδικών ειδώλων του j . Η δύναμη που ασκείται στο άτομο (ή σωματίδιο) i από τα γειτονικά του είναι η εξής:

$$\bar{F}_i = -\sum_{i \neq j} \bar{\nabla} \phi(\bar{r}_{ij}), \quad \bar{r}_{ij} \leq r_o \quad (3.10)$$

Λαμβάνοντας υπόψη τα όρια της κλασικής προσέγγισης, δηλαδή θερμοκρασίες $T > \Theta_{DEBYE}$ και χαρακτηριστικούς χρόνους εμφάνισης ενός φαινομένου τουλάχιστον 10^{-16} sec, η εξίσωση κίνησης που θα χρησιμοποιηθεί είναι ουσιαστικά η βαθμωτή μορφή της Εξίσωσης 3.5:

$$F_i = m_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial t^2} \quad (3.11)$$

Από τα παραπάνω, καταλαβαίνουμε ότι για ένα σύστημα που αποτελείται από έναν ορισμένο αριθμό ατόμων, θα πρέπει να ολοκληρώσουμε τριπλάσιες διαφορικές εξισώσεις και να έχουμε στη διάθεσή μας εξαπλάσιες αρχικές συνθήκες, όπως π.χ. οι θέσεις και οι ταχύτητες των ατόμων. Οι θέσεις που θα χρησιμοποιηθούν μπορεί να είναι κάλλιστα οι πλεγματικές θέσεις των ατόμων, ενώ οι ταχύτητες εκλέγονται με βάση την κατανομή *Maxwell-Boltzmann*, ώστε να αντιστοιχούν πλήρως στη θερμοκρασία στην οποία επιθυμούμε να εκτελέσουμε τη διαδικασία προσομοίωσης. Η σχέση που δίνει την κατανομή Maxwell-Boltzmann, για ένα μονωμένο σύστημα με σταθερό αριθμό σωματιδίων N , όγκο V και ποσό ενέργειας E , είναι η παρακάτω:

$$N(v) = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 \left(-\frac{mv^2}{2kT} \right) \quad (3.12),$$

Όπου:

- $N(v)$ ο αριθμός των σωματιδίων με ταχύτητα v ,
- N ο συνολικός αριθμός των σωματιδίων του δείγματος,
- m η μάζα του κάθε ατόμου,
- k_B η σταθερά του Boltzmann και
- T η θερμοκρασία του δείγματος.

Τέλος, σημειώνουμε ότι υπάρχει η δυνατότητα αλληλεπίδρασης του συστήματος με το περιβάλλον, ώστε να διατηρείται σταθερή είτε η θερμοκρασία (*κανονικό στατιστικό σύνολο*, με N, V, T σταθερά) είτε η πίεση (*ισοβαρές στατιστικό σύνολο*, με N, P, H σταθερά, όπου H η ενθαλπία). Μάλιστα, σημειώνουμε εδώ ότι το κανονικό στατιστικό σύνολο προκύπτει από την επίλυση των κανονικών εξισώσεων *Hamilton* [3], οι οποίες, για την περίπτωση της κίνησης, διατυπώνονται ως εξής:

$$\frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}_j}{m_j}, \quad \frac{\partial \mathbf{p}_j}{\partial t} = \mathbf{F}_j = -\nabla_{\mathbf{r}_j} U(\{\mathbf{r}_i\}) \quad (3.13)$$

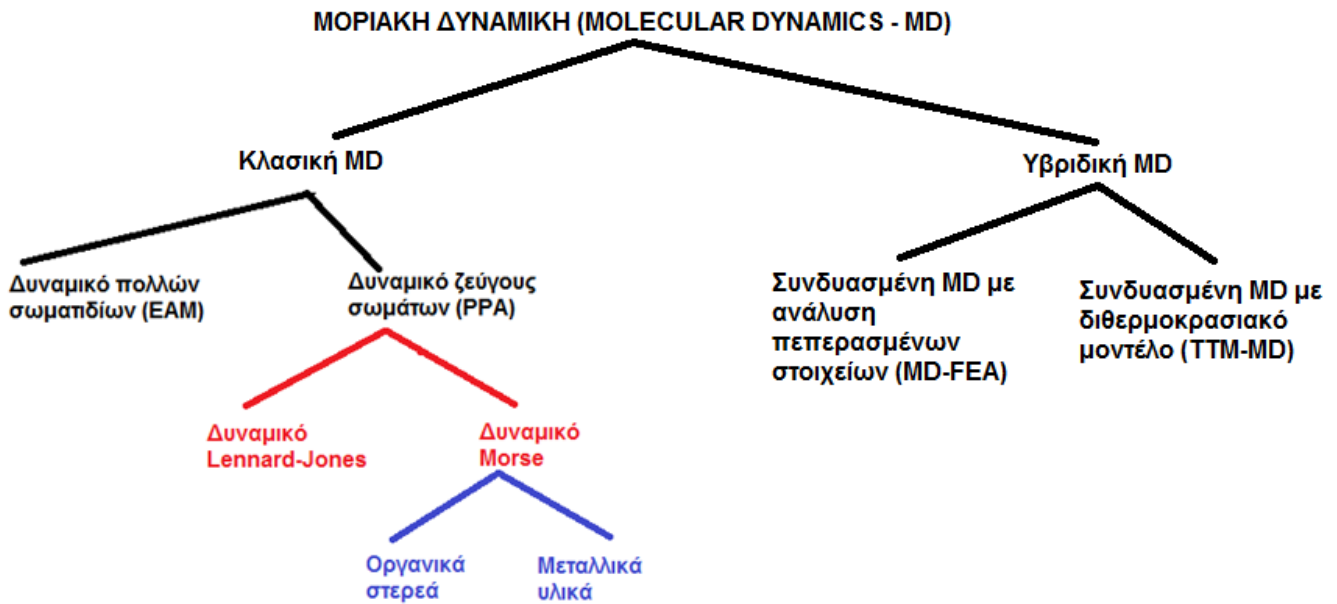
θεωρώντας ότι η *Hamiltonian* μιας διαρρυθμισής N κλασικών σωματιδίων, με δυναμικό $U(\{\mathbf{r}_i\})$ για το καθένα, δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\mathcal{H}(p_1, \dots, p_N, r_1, \dots, r_N) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + U(r_1, \dots, r_N) \quad (3.14)$$

Στη σχέση (3.13), η δύναμη $\mathbf{F}_j = \frac{\partial p_j}{\partial t}$ που επιδρά πάνω στο άτομο j υπολογίζεται λαμβάνοντας την κλίση του δυναμικού U ως προς τη συντεταγμένη r_j . Οι εξισώσεις που περιγράφονται εν γένει από τη σχέση (3.13) δεν μπορούν να επιλυθούν αναλυτικά για μεγάλο αριθμό ατόμων N στο σύστημα, αλλά θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν αλγόριθμοι αριθμητικής / επαναληπτικής επίλυσης, οι οποίοι μεταξύ άλλων χρησιμοποιούνται για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης, όπως είναι οι *Gauss*, *Runge-Kutta* και *Verlet*.

3.4. Κατηγοριοποίηση των υπο-μεθόδων Μοριακής Δυναμικής και χαρακτηριστικά αυτών

Η παρούσα Υποενότητα παρουσιάζει και αναλύει τα διάφορα είδη προσομοιώσεων Μοριακής Δυναμικής, ανάλογα με το χρησιμοποιούμενο γενικό τύπο MD αλλά και τον τύπο του δυναμικού αλληλεπίδρασης των ατόμων του υλικού. Είναι σημαντικό να αναφέρουμε ότι η μέθοδος MD μπορεί να χωριστεί σε δύο μεγάλες κατηγορίες: την *κλασική* (classical) και την *υβριδική* (hybrid) Μοριακή Δυναμική. Ο παρακάτω Πίνακας 3.1. εμφανίζει, σε συνεπτυγμένη μορφή, τις υπο-μεθόδους στις οποίες μπορεί να κατηγοριοποιηθεί η Μοριακή Δυναμική, ενώ στη συνέχεια γίνεται μία εκτενής ανάλυσή τους, παραθέτοντας ταυτόχρονα και παραδείγματα από μελέτες που τις έχουν χρησιμοποιήσει στο παρελθόν:



Πίνακας 3.1. Κατηγοριοποίηση των χρησιμοποιούμενων υπο-μεθόδων Μοριακής Δυναμικής (MD).

3.4.1. Προσομοιώσεις Κλασικής Μοριακής Δυναμικής

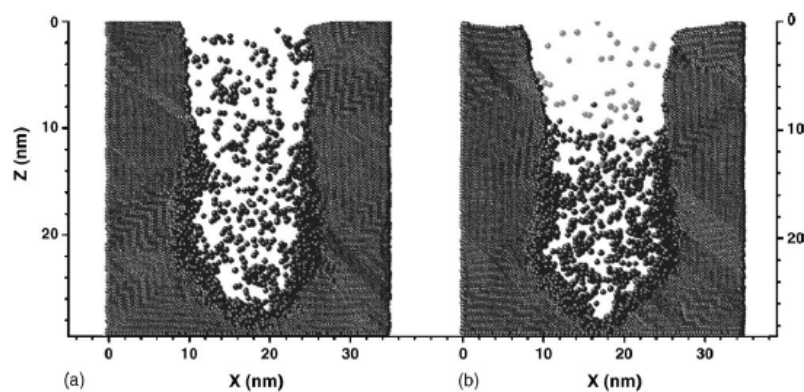
Όπως αναφέρθηκε και σε παραπάνω Εδάφια, το βασικό χαρακτηριστικό της κλασικής MD είναι η χρήση εξισώσεων κλασικής μηχανικής για την περιγραφή και εξέταση των σωματιδιακών συστημάτων και αλληλεπιδράσεων. Ο διαχωρισμός σε επιμέρους είδη προσομοιώσεων γίνεται εδώ με βάση το υλικό στο οποίο πραγματοποιείται η ανάλυση, καθώς επίσης και το είδος του δυναμικού που έχουμε επιλέξει προκειμένου να εκφραστεί η αλληλεπίδραση των σωματιδίων στην αρχική τους κατάσταση.

3.4.1.1. Έκφραση δυναμικού πολλών σωματιδίων (Embedded Atom Method – EAM)

Η ημι-εμπειρική πολύ-σωματιδιακή έκφραση EAM χρησιμοποιείται προκειμένου να υπολογιστεί η ολική ενέργεια ενός μεταλλικού συστήματος. Η συγκεκριμένη προσομοίωση κλασικής MD έχει αναλυθεί σε θεωρητικό και αριθμητικό επίπεδο από το Sonntag [3], ενώ ταυτόχρονα οι Nedialkov και Atanasov [128] διερεύνησαν, με τη βοήθεια της κλασικής MD, τη φωτοαποδόμηση Fe λόγω της πρόσπτωσης femtosecond Laser παλμών, καθώς επίσης και τη βαθιά διάτρηση λόγω του Laser. Στη συγκεκριμένη μελέτη, ο παλμός Laser διαρκεί 0.1 ps και το μήκος κύματός του είναι ίσο με 800 nm. Η ίδια μελέτη αναφέρει χαρακτηριστικά ότι, στην περίπτωση της βαθιάς διάτρησης, η εξέλιξη της φωτοαποδόμησης πάνω στο υλικό διαφέρει σημαντικά από ότι στην περίπτωση της ελεύθερης διαστολής.

Με τη βοήθεια της μεθόδου EAM μπορούμε να προσδιορίσουμε τους παράγοντες που επηρεάζουν την τελική γεωμετρία της οπής που προκαλεί η φωτοαποδόμηση. Ο πρώτος είναι η εναπόθεση του

αποδομημένου υλικού στα τοιχώματα της οπής σε συγκεκριμένο ύψος, όπου η οπή αυτή στενεύει. Ο δεύτερος αφορά την περαιτέρω αποδόμηση σωματιδίων που αλληλεπιδρούν με τα σωματίδια που έχουν αποδομηθεί σε αρχικό στάδιο (δευτερογενής αποδόμηση). Στα πλαίσια της προσομοίωσης των Nedialkov και Atanasov [128], υπολογίζονται σημαντικές ιδιότητες των δευτερογενώς αποδομημένων σωματιδίων, όπως είναι η ταχύτητα και η γωνιακή κατανομή. Ταυτόχρονα, γίνεται υπολογισμός του ρυθμού αποβολής υλικού κατά τη φωτοαποδόμηση, στις περιπτώσεις κατά τις οποίες αυτή γίνεται τόσο υπό κενό όσο και σε συνθήκες ύπαρξης του αδρανούς αερίου Ar, με τα οπτικά αποτελέσματα να παρατίθενται στο ακόλουθο Σχήμα 3.3., για χρήση παλμού Laser με πυκνότητα ρεύματος $F = 2J/cm^2$.

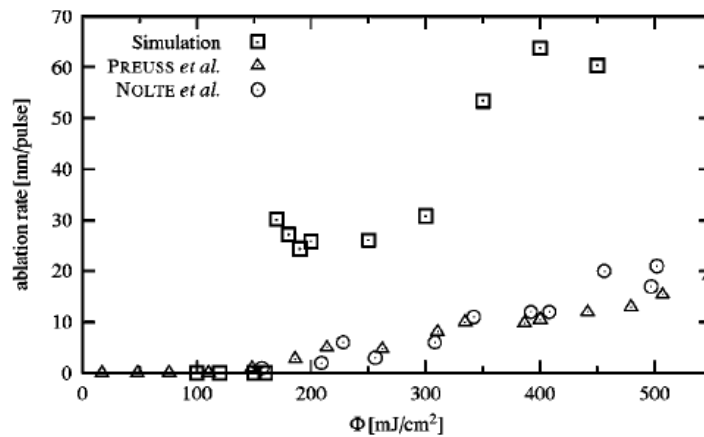


Σχήμα 3.3. Στιγμιότυπα της φωτοαποδόμησης με Laser για τα χαρακτηριστικά που περιγράψαμε παραπάνω, σε χρονικό διάστημα 2 ps μετά την εφαρμογή του παλμού.

Ο όγκος προσομοίωσης στην παραπάνω μελέτη είναι ίσος με $30 \times 1 \times 35 \text{ nm}^3$ και θεωρείται ικανοποιητικός για προβλήματα που μπορούν να επιλυθούν με τον τύπο EAM κλασικής MD. Μάλιστα, μέσω αυτής της υπο-μεθόδου, παρατηρήθηκε μία σειρά από διαδικασίες που επηρεάζουν σε σημαντικό βαθμό την απομάκρυνση υλικού κατά τη φωτοαποδόμηση.

Προσομοίωση της φωτοαποδόμησης με Laser σε μεταλλικά υλικά, με χρήση EAM, έχει γίνει και στα πλαίσια της μελέτης του υπόψη φαινομένου για χρήση picosecond παλμών Laser, η οποία διενεργήθηκε από το Zhigilei [20]. Στην προσομοίωση γίνεται χρήση μιας κυβικής κρυσταλλικής δομής χαλκού (Cu) με άτομα Cu στις θέσεις (100). Αυτή τοποθετήθηκε αρχικά σε κατάσταση ισορροπίας υπό θερμοκρασία 300 K. Ο όγκος προσομοίωσης χαρακτηρίζεται από εμβαδό επιφάνειας $A = 2.169 \times 2.169 \text{ nm}^2$ και περιλαμβάνει 72 άτομα ανά μονόστρωμα (monolayer). Σε αυτή την περίπτωση προσομοίωσης, χρησιμοποιήθηκαν πλευρικά περιοδικές οριακές συνθήκες, επιτρέποντάς μας να προσομοιώσουμε την απόκριση του υλικού ως προς τη φωτοαποδόμηση, στο κέντρο της κηλίδας που σχηματίζεται λόγω της πρόσπτωσης του Laser. Η εφαρμογή της προσομοίωσης αυτής, σε συνδυασμό με τα πειραματικά

αποτελέσματα που συμπεριελήφθησαν στη μελέτη, οδήγησε τελικά σε σχετική συμφωνία μεταξύ των αποτελεσμάτων από τις δύο αυτές περιπτώσεις, όπως μαρτυρά και το ακόλουθο Σχήμα 3.4.:



Σχήμα 3.4. Μεταβολή του ρυθμού φωτοαποδόμησης συναρτήσει της πυκνότητας ενέργειας Laser, για την περίπτωση κατά την οποία η διάρκεια παλμού του Laser είναι 0.5 ps.

Άλλη μία μελέτη που χρησιμοποιεί την έκφραση δυναμικού EAM για την προσομοίωση (με MD) της μεταφοράς θερμότητας κατά τη φωτοαποδόμηση με femtosecond Laser, είναι αυτή των Yamashita *et al.* [129]. Οι femtosecond Laser παλμοί εφαρμόζονται πάνω σε έναν παχύ στόχο από Al, ενώ στη συνέχεια διερευνώνται οι μηχανισμοί μετάδοσης θερμότητας και διάδοσης των κρουστικών κυμάτων. Ένας όγκος $4.04 \times 4.04 \times 80.9 \text{ nm}^3$, αποτελούμενος από 80.000 άτομα Al, χρησιμοποιείται για την προσομοίωση.

3.4.1.2. Προσέγγιση δυναμικού με ζεύγος σωματιδίων (Pair Potential Approximation – PPA)

Η προσέγγιση αυτή αποτελεί τη βάση για τις περισσότερες περιπτώσεις δυναμικών σε αλληλεπίδραση, όπως αυτά μελετώνται κατά την εφαρμογή της μεθόδου MD. Σε αντίθεση με την έκφραση EAM, η προσέγγιση PPA απαιτεί σαφώς μικρότερο υπολογιστικό χρόνο, καθώς δε λαμβάνεται υπόψη η αλληλεπίδραση τριών ή περισσότερων σωματιδίων, αλλά μόνο δύο, χωρίς όμως αυτό να δυσκολεύει το Μηχανικό από το να περιγράψει με ακρίβεια και σαφήνεια τις ιδιότητες του υπό μελέτη υλικού [128]. Υπάρχουν ορισμένες υποκατηγορίες δυναμικών που εμπίπτουν στην προσέγγιση PPA και βοηθούν στο να αναπαρασταθούν με τον πλέον ρεαλιστικό τρόπο οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ σωματιδίων. Οι πιο ευρέως χρησιμοποιούμενες υποκατηγορίες δυναμικών σε μία σειρά από μελέτες, είναι το δυναμικό Lennard-Jones και η συνάρτηση δυναμικού Morse (Morse Potential Function – MPF).

3.4.1.2.1. Δυναμικό Lennard-Jones

Το δυναμικό Lennard-Jones αποτελεί μία ειδική μορφή του δυναμικού *Mie* (*Mie's reduced form*), το οποίο αρχικά εφαρμόστηκε σε ευγενή αέρια, και στη συνέχεια σε περιπτώσεις μελέτης στερεών και υγρών μετάλλων. Οι παρακάτω συναρτήσεις παριστάνουν αντίστοιχα τα δυναμικά Mie και Lennard-Jones:

$$u(r) = \frac{\lambda_n}{r^n} - \frac{\lambda_m}{r^m} / \text{Δυναμικό Mie} \quad (3.15)$$

$$u(r) = \frac{\lambda_n}{r^n} - \frac{\lambda_m}{r^m} \Bigg|_{m=6}^{n=12} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] / \text{Δυναμικό Lennard-Jones} \quad (3.16)$$

Σε απόσταση $r = 2^{1/6}\sigma$, το δυναμικό λαμβάνει την ελάχιστη δυνατή τιμή του: $u_{\min} = -\epsilon$.

Η σχετικά απλή μορφή της έκφρασης για το δυναμικό Lennard-Jones επιτρέπει τη συχνή χρήση του προκειμένου να μελετηθεί η αλληλεπίδραση δύο διαφορετικών υλικών, έστω Α και Β. Σε αυτή την περίπτωση, το δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ των δύο υλικών προσαρμόζεται στην έκφραση Lennard-Jones, ενώ στη συνέχεια γίνεται χρήση των κανόνων Lorenz-Berthelot [131], σύμφωνα με τους οποίους εξάγονται νέες τιμές για τις παραμέτρους Lennard-Jones σ και ϵ , οι οποίες αποτελούν αντίστοιχα τον αριθμητικό (για το σ) και το γεωμετρικό μέσο (για το ϵ) των επιμέρους τιμών για τα δύο υλικά:

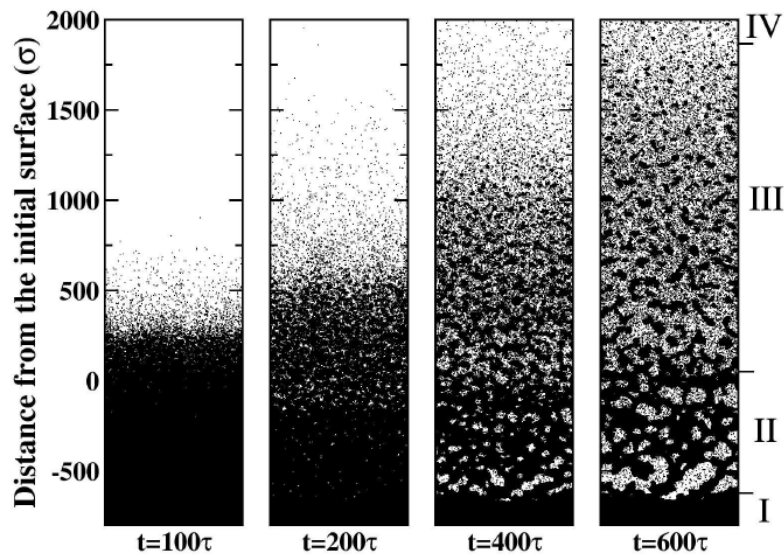
$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}, \quad \epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_A \cdot \epsilon_B} \quad (3.17)$$

Ένα παράδειγμα χρήσης του δυναμικού Lennard-Jones για προσομοίωση MD εμφανίζεται στις μελέτες [132][133], όπου οι Perez και Lewis εξετάζουν τους μηχανισμούς κάτω από τους οποίους λαμβάνει χώρα η φωτοαποδόμηση στερεών με femtosecond παλμούς Laser. Από τη μελέτη [132] εξάγεται ότι οι μηχανισμοί που πραγματοποιούνται μέχρι την τελική αποδόμηση είναι τρεις. Η αποδόμηση είναι αποτέλεσμα μηχανικού θρυμματισμού και δεν απαιτεί τη μετάβαση του συστήματος σε κατάσταση αστάθειας. Επίσης, η απόθεση της ενέργειας στο σύστημα γίνεται ταχύτερα από την απορρόφησή της στην κλίμακα των femtoseconds, κάτι που έχει ως αποτέλεσμα τον εγκλεισμό μεγάλων αποθεμάτων μέσα στο σύστημα.

Η μελέτη [133] παρουσιάζει τους ακόλουθους τέσσερις μηχανισμούς που συντελούν στην αποδόμηση:

- Καταστροφή της δομής, λόγω μετάβασης του υλικού σε κατάσταση αστάθειας.
- Εκρηκτική αλλαγή φάσης.
- Μηχανικός θρυμματισμός.
- Εξαέρωση των επιφανειακών στρωμάτων του υλικού.

Ο χρόνος και η διαδικασία μετάβασης από τον ένα μηχανισμό στον άλλο εξαρτάται από την ενέργεια των προσπιπτόντων επί του υλικού παλμών Laser. Το παρακάτω Σχήμα 3.5. παρουσιάζει τον τρόπο με τον οποίο μεταβάλλεται η δομή ενός στερεού κατά τη φωτοαποδόμησή του με femtosecond Laser, σε διαφορετικά χρονικά διαστήματα $t = K \cdot \tau$, όπου τ η διάρκεια παλμού και K θετική ακέραια σταθερά. Εδώ σημειώνεται ότι η παράμετρος σ αναπαριστά την απόσταση από την αρχική επιφάνεια του στερεού, ενώ οι λατινικοί αριθμοί I έως IV παριστάνουν διαφορετικές περιοχές του υλικού που ακτινοβολείται.



Σχήμα 3.5. Στιγμιότυπα από τη φωτοαποδόμηση στερεού με χρήση Femtosecond Laser.

Η έκφραση του δυναμικού Lennard-Jones έχει χρησιμοποιηθεί επιπλέον στα πλαίσια των μελετών [134][135] για την προσομοίωση της φωτοαποδόμησης με χρήση MD. Οι μελέτες αυτές αφορούν τη φωτοαποδόμηση στερεού κρυσταλλικού στόχου με χρήση picosecond παλμών Laser, σε περιβάλλον αερίου αργού και θερμοκρασίας 50°C . Στα πλαίσια αυτών των μελετών, λαμβάνει χώρα ακριβής υπολογισμός και ανάλυση των κυμάτων πίεσης που δημιουργούνται και μεταδίδονται. Η ανάλυση αυτή καταδεικνύει την ύπαρξη ενός θερμικού και ενός κρουστικού κύματος, τα οποία κινούνται αμφότερα με την ίδια ταχύτητα. Στη συνέχεια γίνεται σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων από την προσομοίωση MD και την αναλυτική επίλυση του υπόψη προβλήματος.

Η μελέτη [135] αποκαλύπτει, μέσω των αποτελεσμάτων από την προσομοίωση MD, ότι δε συμβαίνει ξεκάθαρη αλλαγή φάσης του υλικού κατά τη φωτοαποδόμηση, αλλά δημιουργείται μία μεταβατική ζώνη, όπου το Ag υπάρχει τόσο σε στερεά όσο και υγρή κατάσταση. Καθώς το υλικό τήκεται και εξαχνώνεται,

παράγεται ατμός Ar, ο οποίος εκτινάσσεται από την επιφάνεια του δοκιμίου με ταχύτητες που φτάνουν τις εκατοντάδες μέτρα το δευτερόλεπτο.

3.4.1.2.2. Δυναμικό Morse

Η χρήση της *συνάρτησης δυναμικού Morse* (Morse Potential Function – MPF) σε εφαρμογές προσομοίωσης MD είναι ιδιαίτερα διαδεδομένη στις μέρες μας, όπως είναι η μελέτη δυναμικής πλέγματος, ο προσδιορισμός των ελαστικών ιδιοτήτων των μετάλλων, η αλληλεπίδραση αερίων σωματιδίων με κρυσταλλικές επιφάνειες, καθώς επίσης και η ανάλυση της αλληλεπίδρασης των ακτίνων Laser με μεταλλικά και οργανικά υλικά, καθώς επίσης και πυριτικές ενώσεις [128]. Επίσης, διάφορες μελέτες έχουν χρησιμοποιήσει τη μέθοδο MPF για την προσομοίωση της φωτοαποδόμησης τόσο οργανικών στερεών όσο και μεταλλικών υλικών.

Η γενική εξίσωση περιγραφής του δυναμικού Morse είναι η εξής:

$$\varphi(r_{ij}) = D \left[e^{-2a(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-a(r_{ij}-r_0)} \right] \quad (3.18)$$

Η μερική παράγωγος του δυναμικού Morse ως προς την απόσταση r , $\frac{\partial \varphi}{\partial r}$, δίνει τη δύναμη αλληλεπίδρασης των σωματιδίων, έστω F . Αυτή θα πρέπει να είναι *ελκτική* ($F < 0$) για μεγάλες τιμές της απόστασης, και *απωστική* ($F > 0$) για μικρές τιμές. Κατά συνέπεια, η δυναμική ενέργεια, έστω $P(r)$, θα πρέπει, στο σημείο $r = r_0$, να λάβει την ελάχιστη τιμή της. Επίσης, το μέτρο της P θα πρέπει να ελαττώνεται με ταχύτερο ρυθμό συναρτήσει του r από ό,τι συναρτήσει του r^{-3} . Τέλος, θα πρέπει οι σταθερές C_{11} και C_{12} , οι οποίες περιγράφονται από τις παρακάτω εξισώσεις (3.19) και (3.20), να πληρούν την προϋπόθεση $C_{11} > C_{12} > 0$:

$$C_{11} = \frac{a^4}{2V_{vol}} \sum_j m_j^4 D_j^2 \varphi(r_j) \quad (3.19)$$

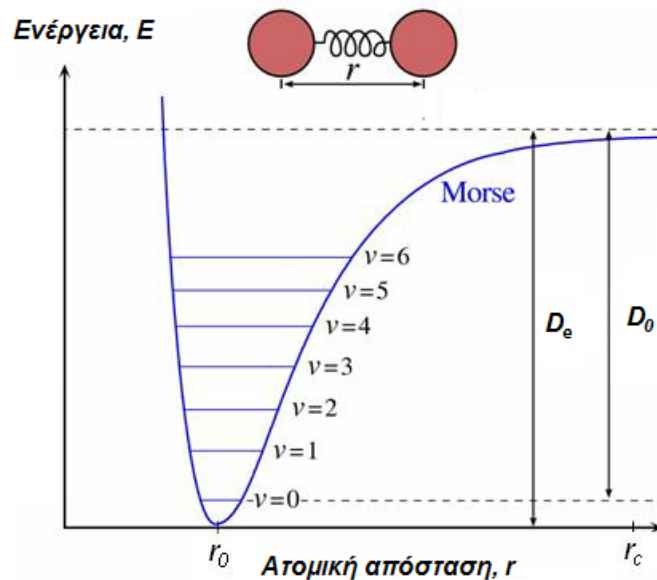
$$C_{12} = \frac{a^4}{2V_{vol}} \sum_j m_j^2 D_j^2 \varphi(r_j) \quad (3.20)$$

Όπου ο τελεστής D_j δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$D_j = \frac{d}{dr_j} \left(\frac{1}{r_j} \right) \quad (3.21)$$

Το παρακάτω Σχήμα 3.6. εμφανίζει τα διάφορα επίπεδα ενέργειας που σχηματίζονται λόγω της έκφρασης του δυναμικού κατά Morse. Καθώς η ενέργεια πλησιάζει το όριο της ενέργειας διάστασης D_e ,

η διαφορά των επιπέδων ενέργειας δυναμικού v ελαττώνεται. Λόγω του μηδενικού σημείου ενέργειας του κατώτατου επιπέδου ταλάντωσης ($v = 0$), η ενέργεια διάστασης είναι μεγαλύτερη από την πραγματική ενέργεια διάσπασης (ή αποχωρισμού), D_0 .



Σχήμα 3.6. Σχηματική αναπαράσταση των ενεργειακών επιπέδων v , σύμφωνα με την έκφραση δυναμικού κατά Morse.

Προσομοίωση της φωτοαποδόμησης οργανικών στερεών με χρήση της μεθόδου MPF

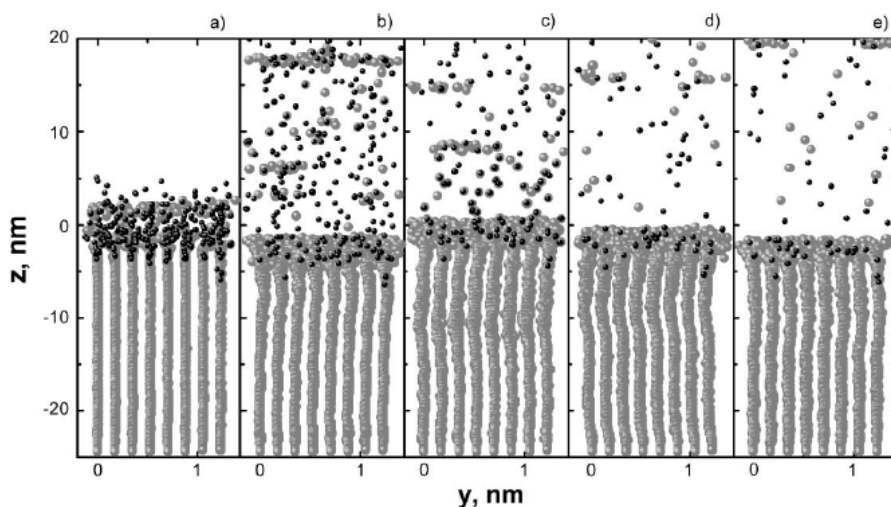
Παρακάτω παρατίθενται ορισμένες από τις μελέτες που έχουν χρησιμοποιήσει τη μέθοδο MPF, καθώς επίσης και το πεδίο εφαρμογής στο οποίο αυτή χρησιμοποιήθηκε:

- **Zhigilei & Garrison I** [136]: Προσομοίωση της φωτοαποδόμησης και φθοράς ιστών που ακτινοβολούνται με χρήση υπερβραχέων παλμών Laser.
- **Zhigilei & Garrison II** [117]: Εξάρτηση της φωτοαποδόμησης οργανικών υλικών με Laser από την αρχική θερμοκρασία του μορίου, δίνοντας έμφαση σε συστήματα μαλακών και σκληρών ιστών.
- **Zhigilei, Kodali & Garrison I** [137]: Παρουσίαση ενός μοντέλου αναπνέουσας σφαίρας, το οποίο χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με την MPF μέθοδο για τη μελέτη της φωτοαποδόμησης οργανικών μορίων.
- **Zhigilei, Kodali & Garrison II** [138]: Παρουσίαση του τρόπου με τον οποίο συμπεριφέρονται τα οργανικά μόρια στο όριο της φωτοαποδόμησης.
- **Williams, Zhigilei & Garrison** [139]: Μελέτη της συμπεριφοράς ενός συστήματος μαλακών και σκληρών ιστών, καθώς αυτό υπόκειται σε φωτοαποδόμηση με Laser.

- **Zhigilei, Kodali & Garrison III** [140]: Ανασκόπηση των μεθόδων και των αρχών της Φυσικής που προκύπτουν μέσα από την MD προσομοίωση της φωτοαποδόμησης οργανικών στερεών, με χρήση της μεθόδου MPF.
- **Zeifman, Garrison & Zhigilei** [141]: Μελέτη της χωρικής εξάπλωσης και χρονικής εξέλιξης του νέφους που δημιουργείται ως αποτέλεσμα της φωτοαποδόμησης οργανικών στερεών με Laser, κάτι που αναλύεται και στη μελέτη [140].
- **Zhigilei** [142]: Εξέταση της δυναμικής της δημιουργίας νέφους, και της διερεύνησης των παραμέτρων των εκτιναγμένων οργανικών συσσωμάτων.
- **Zhigilei & Garrison III** [143]: Παρουσίαση της κατανομής των ταχυτήτων εκτιναγμένων οργανικών μορίων, λόγω της αποδόμησης με Laser.

Προσομοίωση της φωτοαποδόμησης μεταλλικών υλικών με χρήση της μεθόδου MPF

Ένα πολύ χαρακτηριστικό παράδειγμα μελέτης της φωτοαποδόμησης με Laser και MD-προσομοίωσης αυτής με χρήση της μεθόδου MPF, παρουσιάζεται από τους Atanasov *et al.* [144]. Χρησιμοποιήθηκαν femtosecond παλμοί διάρκειας 500 fs και μήκους κύματος 248 nm, ενώ στη συνέχεια λαμβάνει χώρα μελέτη και ανάλυση της επίδρασης της ακτινοβολίας του Laser στη φωτοαποδόμηση, καθώς επίσης και παρουσίαση της εξέλιξης του νέφους πλάσματος πάνω από την περιοχή κατεργασίας. Η ζώνη που επηρεάζεται από την ακτινοβολία Laser, αμέσως μετά το πέρας της διενέργειας του παλμού, εκτείνεται σε βάθος 2.5nm εντός του υλικού, μία τιμή που αυξάνεται για όσο περισσότερο χρόνο εφαρμόζεται η ακτινοβολία. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την ολοένα και εντονότερη εκτίναξη σωματιδίων από την επιφάνεια του υλικού, όπως φαίνεται και στο παρακάτω Σχήμα 3.7.:



Σχήμα 3.7. Στιγμιότυπα εξέλιξης της φωτοαποδόμησης Ni, για χρονικό διάστημα (a) 500 fs, (b) 1 ps, (c) 3 ps, (d) 6 ps, (e) 10 ps. Το συσσωμάτωμα περιλαμβάνει 4.7×10^3 άτομα, διατεταγμένα σε μοναδιαίες

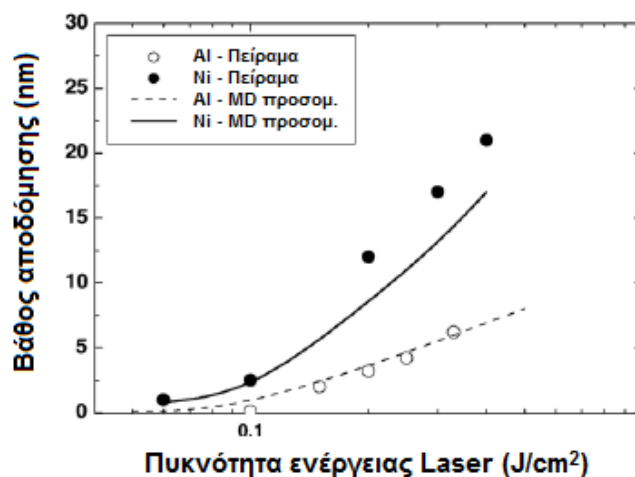
κυβελίδες $4 \times 4 \times 70$. Η ενέργεια ακτινοβολήσης είναι $E = 100 \text{ mJ/cm}^2$. Οι μάρκες κουκκίδες αναπαριστούν τα ιόντα και οι γκριζες τα άτομα.

Επειδή ο μηχανισμός εκτίναξης υλικού δεν έχει θερμικό χαρακτήρα, η κατανομή των ταχυτήτων των ιόντων δεν ακολουθεί την κατανομή Maxwell-Boltzmann. Όσον αφορά τις ταχύτητες των σωματιδίων που εκτινάσσονται κατά τη φωτοαποδόμηση, αυτές είναι της τάξης μερικών χιλιομέτρων το δευτερόλεπτο. Επίσης, κάτω από εντάσεις ακτινοβολίας Laser ίσες με 70 mJ/cm^2 δε λαμβάνει χώρα εκτίναξη σωματιδίων. Γι' αυτό το λόγο, η τιμή αυτή ορίζεται ως το όριο φωτοαποδόμησης για την υπόψη διεργασία.

Στη συνέχεια, περιγράφονται συνοπτικά μερικές από τις κυριότερες μελέτες που χρησιμοποιούν τη μέθοδο MPF για τη Μοριακή Δυναμική Ανάλυση και Προσομοίωση της φωτοαποδόμησης σε μεταλλικά υλικά:

- **Cheng & Xu I [144]:** Η μελέτη αυτή ασχολείται με τους μηχανισμούς διάσπασης κρυστάλλων νικελίου (Ni) κατά τη φωτοαποδόμηση, καθώς επίσης και τη διερεύνηση αυτών με MPF-MD προσομοίωση, σε συνηθισμένα για κατεργασίες υλικών πεδία ενέργειας Laser. Παρατηρήθηκε ότι οι μηχανισμοί αποδόμησης που λαμβάνουν χώρα είναι διαφορετικοί για χαμηλές και για υψηλές τιμές της έντασης του Laser. Για χαμηλές τιμές, το υλικό φτάνει σε μέγιστη θερμοκρασία χαμηλότερη από τη θερμοκρασία εξάχνωσης. Σε αυτή την περίπτωση, η αιτία που προκαλεί την απομάκρυνση υλικού είναι η *εκρηκτική αλλαγή φάσης*, εξαιτίας της οποίας σχηματίζονται φυσαλίδες. Η εκρηκτική αλλαγή φάσης είναι αποτέλεσμα της θέρμανσης, της θερμικής διάγκωσης και της διάδοσης οστικών κυμάτων, λόγω του παλμού Laser που ενεργεί πάνω στην επιφάνεια. Για υψηλές τιμές της ενέργειας Laser, η απομάκρυνση του υλικού επηρεάζεται σημαντικά από το κρίσιμο σημείο αλλαγής φάσης.
- **Cheng & Xu II [145]:** Η διαδικασία που περιγράφηκε στα πλαίσια της προηγούμενης μελέτης, εξετάζεται εδώ διεξοδικότερα και ακριβέστερα. Συγκεκριμένα, μελετάται η επίπτωση που έχει η ένταση του Laser στη θερμοκρασία της υπό αποδόμηση επιφάνειας, καθώς επίσης και στα αναπτυσσόμενες τάσεις. Τα σωματίδια του όγκου προσομοίωσης είναι διατεταγμένα σε κυβικό εδροκεντρωμένο (fcc) κρυσταλλικό πλέγμα, ενώ οι ταχύτητες που αποκτούν αρχικά ακολουθούν τυχαία κατανομή και τελικώς καταλήγουν να ακολουθούν την κατανομή Maxwell-Boltzmann. Η MD προσομοίωση έγινε με χρήση της μεθόδου MPF, ενώ η διαδικασία αριθμητικής-επαναληπτικής επίλυσης που ακολουθήθηκε για τον υπολογισμό των ταχυτήτων και των θέσεων έγινε με χρήση του τροποποιημένου αλγορίθμου του Verlet, λαμβάνοντας υπόψη και ορισμένες περιοδικές συνοριακές συνθήκες που εισήχθησαν στο μοντέλο προσομοίωσης.

- *Nedialkov et al. I [146]*: Στα πλαίσια αυτής της μελέτης αναπτύχθηκε ένα θεωρητικό μοντέλο MD προσομοίωσης της φωτοαποδόμησης μεταλλικών υλικών με femtosecond και picosecond Laser παλμούς. Εξετάστηκαν δοκίμια από τρία διαφορετικά υλικά (Al, Ni και Fe), τα οποία ακτινοβολήθηκαν με παλμούς Laser διαφορετικής διάρκειας (0.1, 0.5 και 5 ps), διαφορετικού μήκους κύματος (248 και 800 nm) και διαφορετικής έντασης (από το όριο φωτοαποδόμησης έως και τα 0.5 J/cm²). Όταν η ένταση βρίσκεται κοντά στο όριο της αποδόμησης, οι θερμο-ελαστικές τάσεις που αναπτύσσονται λόγω ταχείας θέρμανσης του υλικού προκαλούν την απομάκρυνσή του. Το αποδομημένο υλικό αποτελείται από μεγάλα συσσωματώματα. Καθώς η ένταση του Laser αυξάνεται, ο ακτινοβολούμενος όγκος υπερθερμαίνεται, με αποτέλεσμα την εμφάνιση εκρηκτικής αλλαγής φάσης. Κατά συνέπεια, το αποδομημένο υλικό αποσυντίθεται σε σταγονίδια υγρής μορφής και απομονωμένα σωματίδια. Στην περίπτωση του βραχέος (248 nm) μήκους κύματος, η εκτίναξη του υλικού λαμβάνει χώρα με πιο βίαιο τρόπο από ό,τι στην περίπτωση του μακρού (800 nm) μήκους κύματος, ενώ ταυτόχρονα η διάλυση του υλικού γίνεται γρηγορότερα, οδηγώντας σε μικρότερου μεγέθους συσσωματώματα από ό,τι στην έναρξη της διαδικασίας προσομοίωσης. Στην περίπτωση του Al, η γρήγορη διάλυση και ο σχηματισμός μικρών συσσωματωμάτων είναι χαρακτηριστικά που εμφανίζονται από την αρχή της προσομοίωσης, λόγω του γεγονότος ότι το Al έχει περίπου τη μισή ενέργεια συνοχής του Ni. Η ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης και η περιγραφή της αλληλεπίδρασης των σωματιδίων έγινε με τη βοήθεια του αλγορίθμου Verlet και της περιγραφής δυναμικού κατά MPF. Όπως και στην προηγούμενη μελέτη, έτσι και εδώ εφαρμόστηκαν περιοδικές συνθήκες, αυτή τη φορά στις x και y διαστάσεις του όγκου προσομοίωσης, διαστάσεων $(X \cdot Y \cdot Z) = (6.1 \times 6.1 \times 28.4) \text{ nm}^3$ για το Al, $(5.3 \times 5.3 \times 42.2) \text{ nm}^3$ για το Ni και $(4.3 \times 4.3 \times 37.3) \text{ nm}^3$ για το Fe. Όπως φαίνεται και στο παρακάτω Σχήμα 3.8., τα αποτελέσματα από την MPF-MD προσομοίωση προσεγγίζουν σε σημαντικό βαθμό τα αντίστοιχα πειραματικά.

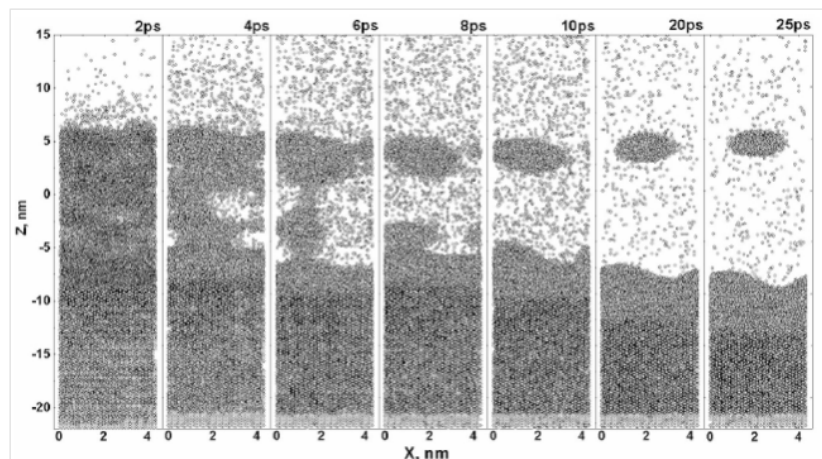


Σχήμα 3.8. Γραφική αναπαράσταση του βάθους αποδόμησης συναρτήσει της πυκνότητας ενέργειας Laser, για Al και Ni. Τα πειράματα διεξήχθησαν με τα εξής χαρακτηριστικά της ακτινοβολίας για κάθε υλικό:

Για το Al: Μήκος κύματος 800 nm, διάρκεια παλμού 0.1 ps.

Για το Ni: Μήκος κύματος 248 nm, διάρκεια παλμού 0.5 ps.

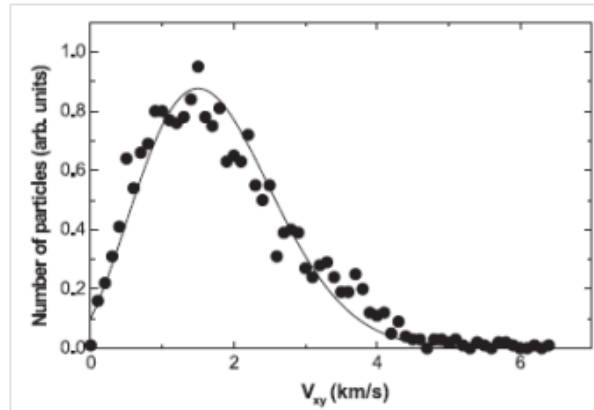
- **Nedialkov et al. II [147]:** Αυτή η μελέτη αφορά τη διερεύνηση, τόσο σε πειραματικό επίπεδο όσο και σε επίπεδο MPF-MD προσομοίωσης, της φωτοαποδόμησης του σιδήρου (Fe). Η διερεύνηση έγινε με χρήση Ti:Sapphire Laser υπερβραχέων παλμών, ενώ για την προσομοίωση του δυναμικού αλληλεπίδρασης των σωματιδίων χρησιμοποιήθηκαν, όπως και στις προηγούμενες περιπτώσεις, η έκφραση MPF και ο αλγόριθμος αριθμητικής επίλυσης Verlet, για την ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης. Η διαφορά με τη μελέτη [146] έγκειται στο γεγονός ότι η κυψελίδα του υλικού όπου θα εφαρμοζόταν η φωτοαποδόμηση χαρακτηρίζεται από κυβικό χωροκεντρωμένο (bcc) κρυσταλλικό πλέγμα. Ο όγκος προσομοίωσης έχει διαστάσεις $4.3 \times 4.3 \times 30 \text{ nm}^3$. Η ακτίνα Laser χαρακτηρίζεται από χρονική κατανομή Gauss, ενώ ο αριθμός των εναποτιθέμενων φωτονίων στο υλικό ακολουθεί το νόμο των Lambert και Beer. Κατά τη διάρκεια της εξέλιξης της διαδικασίας, τα άτομα απορροφούν ενέργεια, με αποτέλεσμα η κινητική τους ενέργεια να αυξάνεται. Η φωτοαποδόμηση εξελίσσεται όπως δείχνει το ακόλουθο Σχήμα 3.9., με τη βοήθεια του οποίου μπορούμε να διακρίνουμε δύο διαφορετικούς μηχανισμούς φωτοαποδόμησης, ένα για χαμηλές τιμές πυκνότητας ενέργειας Laser και ένα για υψηλές. Μάλιστα, καθώς αυξάνεται η πυκνότητα ενέργειας αυξάνονται σε σημαντικό βαθμό οι απώλειες θερμότητας, κάτι που έχει ως αποτέλεσμα την ελάττωση του ρυθμού φωτοαποδόμησης.



Σχήμα 3.9. Στιγμιότυπα εξέλιξης της φωτοαποδόμησης σε Fe με χρήση Laser πυκνότητας ενέργειας $L = 0.5 \text{ J/cm}^2$, μήκους κύματος $\lambda = 800 \text{ nm}$ και διάρκειας παλμού $\tau_p = 0.1 \text{ ps}$.

- **Nedialkov et al. III [148]:** Η μελέτη αυτή εξετάζει τη δυναμική του υλικού που εκτινάσσεται κατά τη φωτοαποδόμηση με Laser υπερβραχέων παλμών. Χρησιμοποιεί ίδιες συνθήκες και ίδια

χαρακτηριστικά κατά την MD προσομοίωση, σε σχέση με τις μελέτες [146] και [147], προκειμένου να καταγράψει και να μελετήσει την κατανομή των ταχυτήτων για τα αποδομημένα σωματίδια, η οποία, όπως φαίνεται στο παρακάτω Σχήμα 3.10., είναι η *Maxwell-Boltzmann*.



Σχήμα 3.10. Κατανομή της αξονικής ταχύτητας των αποδομημένων σωματιδίων. Τα αποτελέσματα από την MD ανάλυση (μαύρες κουκκίδες) σχεδόν προσεγγίζουν την κατανομή *Maxwell-Boltzmann* (καμπύλη).

3.4.2. Προσομοιώσεις Υβριδικής Μοριακής Δυναμικής

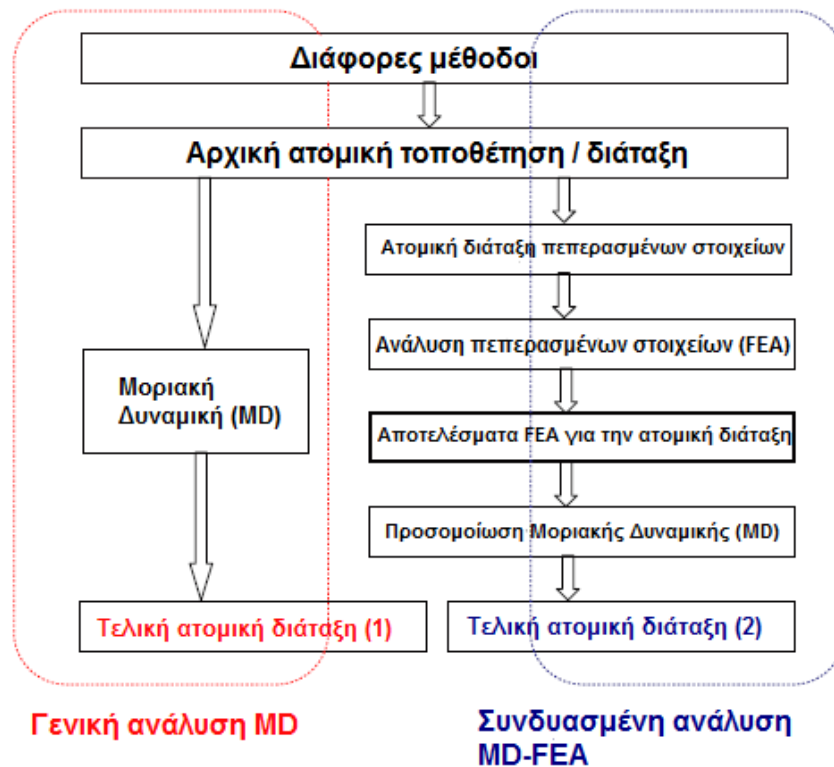
Οι υβριδικές προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής (*Hybrid Molecular Dynamics Simulations*) έχουν εισαχθεί με σκοπό τόσο την επέκταση του όγκου προσομοίωσης σε σχέση με την περίπτωση της κλασσικής MD, όσο και την καλύτερη παρατήρηση των διεργασιών που λαμβάνουν χώρα κατά τη φωτοαποδόμηση, τόσο σε μακροσκοπικό επίπεδο (μακρο-κλίμακα) όσο και σε μικροσκοπικό (π.χ. νανοκλίμακα). Η πραγματοποίηση μίας υβριδικής προσομοίωσης MD γίνεται μέσω της συνένωσης ενός τυπικού όγκου προσομοίωσης MD με έναν όγκο προσομοίωσης που χρησιμοποιείται στα πλαίσια της εφαρμογής είτε ανάλυσης πεπερασμένα στοιχεία (*Finite Element Analysis – FEA*) είτε του διθερμοκρασιακού μοντέλου (*Two-Temperature Model – TTM*). Η επιστημονική βιβλιογραφία περιλαμβάνει ένα μεγάλο αριθμό από μελέτες που χαρακτηρίζονται από τη χρήση και των δύο παραπάνων υπο-κατηγοριών της υβριδικής MD ανάλυσης.

3.4.2.1. Συνδυασμένη ανάλυση Μοριακής Δυναμικής και Πεπερασμένων Στοιχείων (MD-FEA)

Ένα από τα πιο σημαντικά πεδία εφαρμογής της συνδυασμένης ανάλυσης MD και πεπερασμένων στοιχείων είναι η προσομοίωση της μηχανικής συμπεριφοράς υλικών και δομών σε νανοκλίμακα. Κάτι

τέτοιο πραγματοποιείται με τη βοήθεια μιας συνδυαστικής μεθόδου, δύο διαφορετικές προσεγγίσεις της οποίας παρουσιάζονται στα πλαίσια των μελετών [148] και [13].

Η προσέγγιση που προτείνεται από τους Wu *et al.* [148] μπορεί να παρουσιαστεί συνοπτικά με τη βοήθεια του ακόλουθου λογικού διαγράμματος (Σχήμα 3.11.):



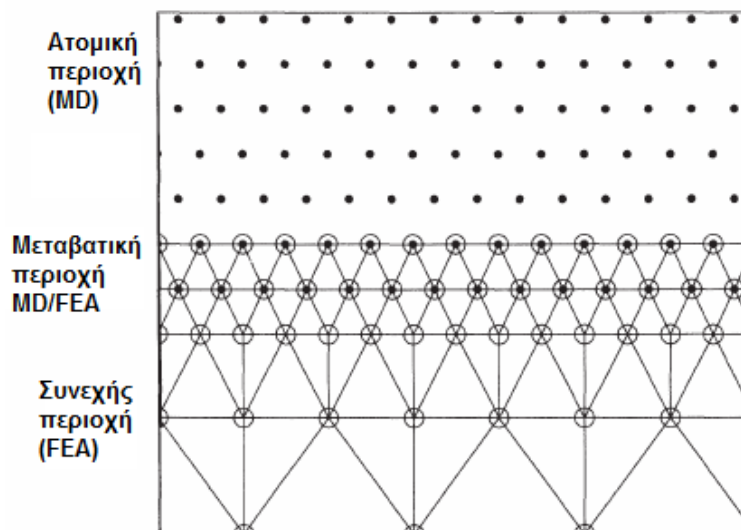
Σχήμα 3.11. Λογικό διάγραμμα μέσω του οποίου γίνεται διαχωρισμός και σύγκριση της γενικής μεθόδου MD και της συνδυαστικής μεθόδου MD-FEA.

Στα πλαίσια της μεθόδου αυτής, το αρχικό ατομικό μοντέλο μετατρέπεται σε συνεχές, ενώ στη συνέχεια παράγεται μία προσεγγιστική λύση για το σύστημα, με τη βοήθεια της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων, για συγκεκριμένα αρχικά φορτία και αρχικές συνθήκες που χρησιμεύουν στην τελική επίλυση. Το πέρας της επίλυσης με FEA συνιστά πολλές φορές ένα ενδιάμεσο στάδιο ανάλυσης. Στη συνέχεια, το φορτισμένο συνεχές μοντέλο μετατρέπεται σε ένα νέο ατομικό μοντέλο, στο οποίο εφαρμόζεται MD προσομοίωση προκειμένου το σύστημα να φτάσει σε μία τελική κατάσταση ισορροπίας.

Στα πλαίσια αυτής της μεθόδου, ο χρήστης μπορεί να επωφεληθεί ταυτόχρονα από την ακρίβεια που παρέχει μία MD προσομοίωση και από την ταχύτητα και αποδοτικότητα των συνεχών μοντέλων προσομοίωσης, όπως αυτά που χρησιμοποιούν τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων. Παρά το γεγονός ότι η ακρίβεια διατηρείται στα υψηλά επίπεδα που παρέχονται από την MD ανάλυση, το υπολογιστικό

κόστος ελαττώνεται. Χαρακτηριστική περίπτωση εφαρμογής της MD-FEA συνδυαστικής μεθόδου αφορά τη διερεύνηση των ιδιοτήτων μιας νανο-δοκού σε συνθήκες παραμόρφωσης.

Η προσέγγιση που προτείνεται από τους Smirnova *et al.* [13] σχετίζεται με τη μελέτη ποικιλόμορφων δυναμικών φαινομένων, τα οποία θα πρέπει να υποβληθούν σε συνδυασμένη ανάλυση συνεχούς (FEA) και ατομικού (MD) επιπέδου ως προς τις κλίμακες μήκους. Μέσω της μεθοδολογίας που προτείνεται, υπάρχει η δυνατότητα εντοπισμού του κρίσιμου σημείου μεταξύ ακρίβειας υπολογισμών και υπολογιστικού φόρτου. Εφαρμόζεται στη μελέτη της διάδοσης κυμάτων πίεσης σε υλικό, λόγω της εφαρμογής ακτινοβολίας Laser στην επιφάνειά του. Είναι σημαντικό να αναφέρουμε ότι ο αποτελεσματικός συνδυασμός των αναλύσεων MD και FEA απαιτεί, εκτός από τη συνέχεια μεταξύ των ιδιοτήτων στο ατομικό και στο συνεχές μέσο αντίστοιχα, την *ομαλή μετάβαση* ανάμεσα στο ατομικό και το συνεχές μέσο. Στα πλαίσια της μελέτης [13], γίνεται χρήση μιας μεταβατικής περιοχής, η οποία παρουσιάζεται στο παρακάτω Σχήμα 3.12.:



Σχήμα 3.12. Παρουσίαση της μεταβατικής περιοχής σε ένα συνδυασμένο σύστημα MD-FEA. Σε αυτή την περιοχή, οι κόμβοι των πεπερασμένων στοιχείων συμπίπτουν με θέσεις σωματιδίων στον όγκο προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής.

Όπως φαίνεται και από το παραπάνω Σχήμα, η μεταβατική περιοχή χαρακτηρίζεται από σύμπτωση των θέσεων σωματιδίων της συνεχούς περιοχής, στην οποία εφαρμόζεται ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων, με τις θέσεις ατόμων της ατομικής περιοχής, όπου λαμβάνει χώρα MD ανάλυση. Ανάλογα με το εκάστοτε δυναμικό που χρησιμοποιείται στην MD ανάλυση, καθορίζεται και η *απόσταση αποκοπής*, ένα μέγεθος με το οποίο ισούται το εύρος της μεταβατικής περιοχής MD/FEA. Τα σωματίδια της μεταβατικής περιοχής, εκτός του ότι οι θέσεις τους συμπίπτουν με κόμβους FEA, υπόκεινται σε δυνάμεις

που καθορίζονται από το πλέγμα των πεπερασμένων στοιχείων. Η εφαρμογή αυτής της μεθόδου έχει ως αποτέλεσμα καλή συμφωνία μεταξύ των προφίλ κυμάτων στην ατομική και τη συνεχή περιοχή. Χρησιμοποιείται σε σημεία όπου θα πρέπει οπωσδήποτε να γίνει ανάλυση με πολύ υψηλή ακρίβεια. Στα σημεία αυτά λαμβάνει χώρα MD προσομοίωση, ενώ στον υπόλοιπο όγκο η ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων είναι επαρκής, όπως και η ακρίβεια που δίνει αυτή η ανάλυση.

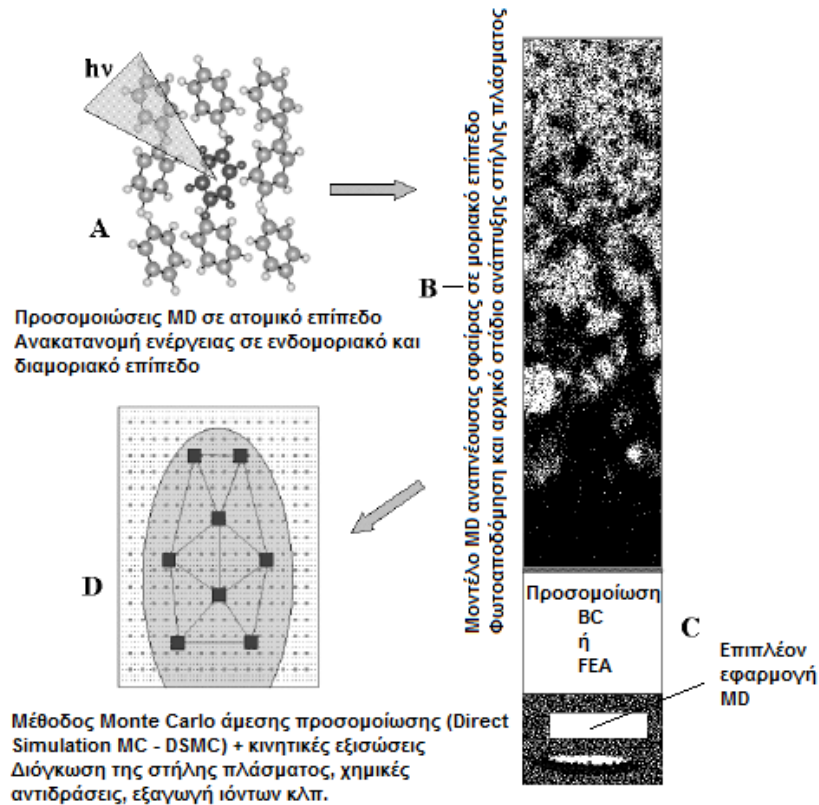
Σε άλλη του μελέτη ο Zhigilei [149] προτείνει την εφαρμογή μιας μεθοδολογίας πολλαπλής κλίμακας (*multiscale method*), στην οποία εισάγει ως τρίτη επιμέρους μέθοδο προσομοίωσης στις δύο προηγούμενες, την ανάλυση *Monte Carlo*, για την οποία έγινε περιγραφή σε προηγούμενη Υποενότητα. Με τη βοήθεια της συνδυασμένης μεθοδολογίας MD-FEA-MC, ο Zhigilei κατόρθωσε να συμπεριλάβει όλα τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα στα πλαίσια της διαδικασίας φωτοαποδόμησης, την αλληλεπίδραση μεταξύ αυτών αλλά και τις απαιτήσεις κάθε μίας όσον αφορά την ακρίβεια. Πιο συγκεκριμένα, συνδυάζονται οι ακόλουθες τρεις μέθοδοι ανάλυσης:

Μέθοδος 1^η: *Μοριακή Δυναμική*, και πιο συγκεκριμένα το μοντέλο αναπνέουσας σφαίρας, μέσω του οποίου προσομοιώνονται τα αρχικά στάδια της φωτοαποδόμησης.

Μέθοδος 2^η: *Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων*, μέσω της οποίας μελετάται η διάδοση των κυμάτων πίεσης έξω από τον επιμέρους όγκο MD προσομοίωσης.

Μέθοδος 3^η: *Μέθοδος Monte Carlo*, μέσω της οποίας προσομοιώνεται η διόγκωση του νέφους πλάσματος που δημιουργείται ως αποτέλεσμα της φωτοαποδόμησης.

Το παρακάτω Σχήμα 3.13. παρουσιάζει τα διάφορα στάδια εφαρμογής της συνδυαστικής μεθόδου, όπως περιγράφονται από το Zhigilei στην αντίστοιχη μελέτη:



Σχήμα 3.13. Σχηματική αναπαράσταση της ακολουθούμενης διαδικασίας εφαρμογής της συνδυασμένης μεθόδου προσομοίωσης πολλαπλής κλίμακας.

Μελετώντας το παραπάνω Σχήμα, μπορούμε να διακρίνουμε 4 βήματα εργασίας για την εφαρμογή της συνδυασμένης μεθοδολογίας:

Βήμα A: Αλληλεπίδραση μεταξύ σωματιδίων σε ατομικό επίπεδο. Μέσω αυτής μελετάται η ταλάντωση των ατόμων λόγω προσβολής αυτών από ακτινοβολία Laser.

Βήμα B: Αύξηση των διαστάσεων του πλέγματος, προκειμένου να μελετηθεί η αντίδραση ομάδων ατόμων λόγω της προσπίπτουσας ακτινοβολίας Laser.

Βήμα C: Μελέτη του φαινομένου της φωτοαποδόμησης σε μεγαλύτερο όγκο, με τη βοήθεια της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων, αλλά και με περαιτέρω εφαρμογή Μοριακής Δυναμικής Ανάλυσης.

Βήμα D: Προσομοίωση της διόγκωσης του δημιουργούμενου από τη φωτοαποδόμηση νέφους πλάσματος, με τη βοήθεια της μεθόδου Monte Carlo.

3.4.2.2. Συνδυασμένη ανάλυση Μοριακής Δυναμικής και Διθερμοκρασιακού μοντέλου (TTM-MD)

Οι μελέτες Μοριακής Δυναμικής που ενισχύονται με την εισαγωγή του διθερμοκρασιακού μοντέλου (TTM) αποσκοπούν κατά κύριο λόγο στην προσομοίωση των διαδικασιών εκτός ισορροπίας που

λαμβάνουν χώρα κατά τη φωτοαποδόμηση με Laser, και δίνουν έμφαση στην περιγραφή της διέγερσης, σε όλα τα στάδια αυτής, λόγω της ακτινοβολίας Laser. Διάφορες βιβλιογραφικές πηγές καταδεικνύουν το πόσο πολύ μπορεί ένα κλασσικό μοντέλο MD να ενισχυθεί με την εισαγωγή του μοντέλου TTM ώστε να δώσει αποτελέσματα με μεγαλύτερη ακρίβεια.

Ο βασικός λόγος για τον οποίο κρίνεται επιβεβλημένη η εισαγωγή του μοντέλου TTM σε αυτού του είδους τις αναλύσεις αναφέρεται από τους Zhigilei *et al.* στη βιβλιογραφία [12]. Συγκεκριμένα, αναφέρεται ότι η κλασσική τεχνική Μοριακής Δυναμικής δεν περιλαμβάνει μία διακριτή αναπαράσταση των ηλεκτρονίων του μετάλλου-στόχου (ενώ κάτι τέτοιο θα ήταν πολύ σημαντικό να συμπεριληφθεί, ιδιαίτερα στην περίπτωση των ηλεκτρονίων της ζώνης σθένους, τα οποία απορροφούν την ακτινοβολία Laser), με αποτέλεσμα να κρίνεται ανεπαρκής και δύσχρηστη (κατά βάση στη συμβατική της μορφή) όσον αφορά την προσομοίωση των ακόλουθων φαινομένων:

- Αλληλεπίδραση στόχου – Laser.
- Χαλάρωση / θερμοποίηση της απορροφημένης ενέργειας Laser.
- Ταχεία μετάδοση θερμότητας ηλεκτρονίων με αγωγή, στον κυρίως όγκο του ακτινοβολούμενου στόχου.

Η βασική αρχή πάνω στην οποία αναπτύχθηκε η συνδυασμένη μέθοδος TTM-MD, περιγράφεται στα πλαίσια της μελέτης [150]. Κατά τη διαδικασία της φωτοαποδόμησης, η ακτινοβολία Laser απορροφάται από τα ηλεκτρόνια σθένους, τα οποία, ως γνωστόν, βρίσκονται στην εξωτερική στιβάδα. Η ενέργεια ισορροπείται τάχιστα μεταξύ των ηλεκτρονίων (σε κλάσματα του *femtosecond*), ενώ στη συνέχεια μετατρέπεται σε ταλαντώσεις της κρυσταλλικής δομής, μετά όμως το πέρας ενός μεγαλύτερου χρονικού διαστήματος. Σε αυτή τη συνδυαστική μέθοδο, το διθερμοκρασιακό μοντέλο αποσκοπεί στον υπολογισμό των θερμοκρασιών της κρυσταλλικής δομής, ενώ η μέθοδος MD χρησιμοποιείται αποκλειστικά και μόνο για την περιγραφή των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στην επιφανειακή περιοχή του υλικού, όπου ο χαρακτήρας των διαδικασιών τήξης και αποδόμησης του μετάλλου είναι ενεργός. Εντονότερη χρήση του μοντέλου TTM γίνεται καθώς αυξάνεται το βάθος εντός του υλικού.

Ένα αντιπροσωπευτικό δείγμα χρήσης της συνδυαστικής μεθόδου TTM-MD εμφανίζεται στα πλαίσια της μελέτης των Cheng και Xu [144], οι οποίοι επιχειρούν να περιγράψουν τους μηχανισμούς διάσπασης του νικελίου (Ni) κατά τη διαδικασία φωτοαποδόμησης με Femtosecond Laser. Το κοινό στοιχείο με τη μελέτη [150] είναι η χρήση της Μοριακής Δυναμικής (MD) Ανάλυσης για την επιφανειακή περιοχή του υλικού και του διθερμοκρασιακού μοντέλου (TTM) για μεγαλύτερα βάθη εντός του υλικού. Στα πλαίσια της μελέτης, το μοντέλο TTM δίνει έμφαση στο μηχανισμό θέρμανσης του προς ανάλυση συστήματος. Ο μηχανισμός αυτός περιλαμβάνει το μηχανισμό απορρόφησης της ενέργειας του Laser από τα ηλεκτρόνια, καθώς επίσης και αυτόν που σχετίζεται με τη θέρμανση του κρυσταλλικού πλέγματος, λόγω της

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

αλληλεπίδρασής του με τα ηλεκτρόνια. Τα *τρία* (3) στάδια μεταφοράς ενέργειας που περιγράφονται με τη βοήθεια της μελέτης είναι τα εξής:

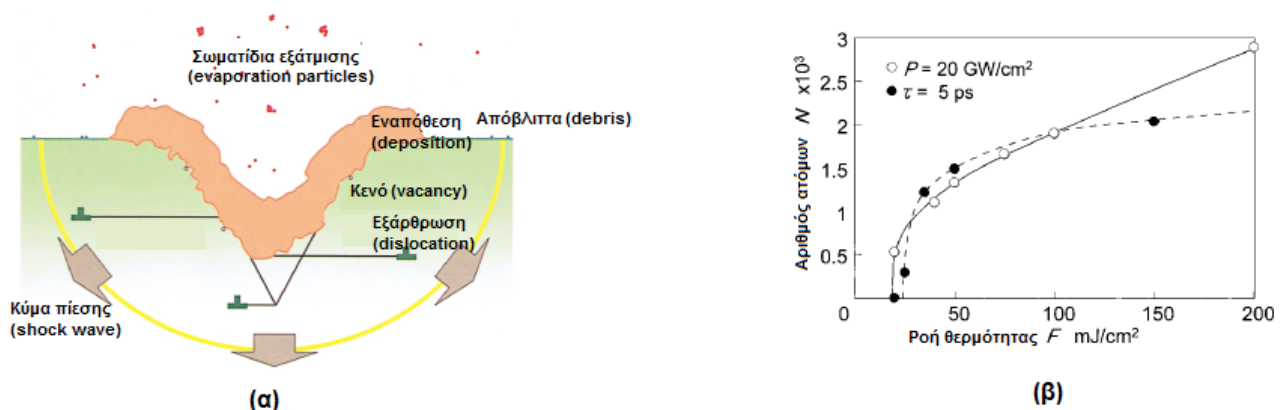
Στάδιο 1^ο: Τα ελεύθερα ηλεκτρόνια που υπάρχουν μέσα στην κρυσταλλική δομή απορροφούν την ενέργεια των προσπιπτόντων παλμών Laser πάνω σε αυτή. Σε αυτό το στάδιο, τα ηλεκτρόνια δε βρίσκονται σε θερμική ισορροπία.

Στάδιο 2^ο: Τα ηλεκτρόνια περιέρχονται σε θερμική ισορροπία και η πυκνότητα της κατάστασής τους μπορεί να περιγραφεί με σχετικά καλή ακρίβεια από την κατανομή Fermi. Αυτό όμως δε συνεπάγεται και την εξίσωση των θερμοκρασιών μεταξύ ηλεκτρονίου και πλέγματος, με τις θερμοκρασίες αυτές να είναι διαφορετικές.

Στάδιο 3^ο: Τα ηλεκτρόνια και το κρυσταλλικό πλέγμα τελικώς μεταπίπτουν σε θερμική ισορροπία, ενώ ταυτόχρονα η ενέργεια μεταφέρεται διαμέσου του όγκου του υλικού μέσω θερμικής διάχυσης.

Οι μελέτες [20] και [28] έχουν ως σκοπό να παρουσιάσουν και να προσεγγίσουν, με τη μέγιστη δυνατή ακρίβεια, το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης, χρησιμοποιώντας συνδυασμένη ανάλυση TTM-MD και εφαρμόζοντάς τη *μονοδιάστατα* (1D).

Στη μελέτη [20], τα αποτελέσματα της MD ανάλυσης, σχετικά με τη φωτοαποδόμηση των μετάλλων, ενημερώνουν συνεχώς τη μεταφορά θερμότητας με αγωγή με την ενέργεια που μεταφέρεται από τα ελεύθερα ηλεκτρόνια σε κάθε διακριτή στιγμή της χρονικής περιόδου εκτέλεσης του υπολογιστικού κώδικα. Το παρακάτω Σχήμα 3.14. παριστάνει σχηματικά τη διαδικασία φωτοαποδόμησης και την εξέλιξη του αριθμού αποδομημένων σωματιδίων σε σχέση με την πυκνότητα ενέργειας του Laser:



Σχήμα 3.14. [α] Αναπαράσταση της διαδικασίας φωτοαποδόμησης με Laser, σύμφωνα με τη μελέτη [20].

[β] Εξέλιξη του αριθμού αποδομημένων σωματιδίων συναρτήσει της πυκνότητας ενέργειας Laser.

Η μελέτη [28] αποτελεί ένα ακόμα παράδειγμα μονοδιάστατης προσέγγισης της φωτοαποδόμησης με χρήση της συνδυασμένης μεθόδου TTM-MD, χρησιμοποιώντας όμως ταυτόχρονα και τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών (Finite Difference Method / FD) για την προσομοίωση της μεταφοράς θερμότητας με αγωγή μέσα στο υλικό. Το συγκεκριμένο στάδιο (μεταφορά θερμότητας δι'αγωγής) έπεται της μεταφοράς της ενέργειας του Laser στο σύστημα των – ελεύθερων και μη – ηλεκτρονίων του κρυσταλλικού πλέγματος. Η λύση του προβλήματος της φωτοαποδόμησης, με συνδυασμένη χρήση TTM-MD και FD, εμφανίζεται στο παρακάτω Σχήμα 3.15.:



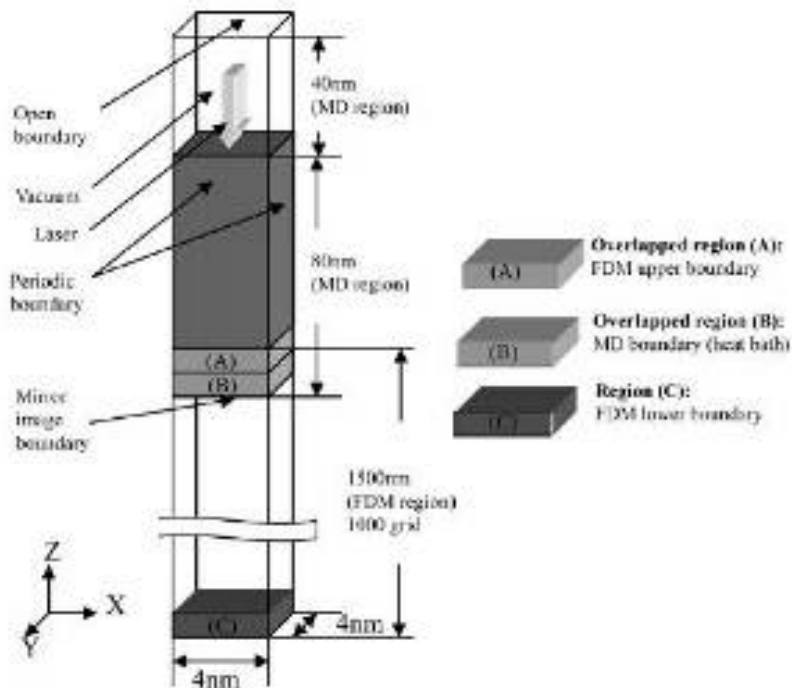
Σχήμα 3.15.: Αναπαράσταση της λύσης του προβλήματος της φωτοαποδόμησης με Laser [28], με τη βοήθεια συνδυασμένης χρήσης TTM-MD και πεπερασμένων διαφορών (FD).

Από το παραπάνω Σχήμα, παρατηρούμε ότι το σύστημα των ηλεκτρονίων προσομοιώνεται με χρήση της μεθόδου πεπερασμένων διαφορών σε ολόκληρο το βάθος του υλικού, L . Η δέσμη Laser ακτινοβολεί την επιφάνεια στο μηδενικό επίπεδο (το οποίο χαρακτηρίζεται από βάθος $x = 0$) και προσδίδει ενέργεια στο σύστημα με βάση την κατανομή $Q(x,t)$ που χαρακτηρίζει την πηγή. Το σύστημα των ατόμων προσομοιώνεται με MD μέχρι το βάθος $x = l$, ενώ από εκεί και έπειτα γίνεται χρήση FD.

Όσον αφορά τη μελέτη [151], αυτή αναλύει σε μεγαλύτερο βάθος τη διαδικασία της φωτοαποδόμησης με Femtosecond Laser, καθώς έχει τη δυνατότητα να περιγράψει τα επιμέρους φαινόμενα που τη συνοδεύουν, όπως είναι οι μηχανισμοί μετάδοσης θερμότητας και η διάδοση των κρουστικών κυμάτων. Με χρήση της συνδυασμένης ανάλυσης TTM-MD, δίνεται η δυνατότητα εκτενούς περιγραφής των παραπάνω φαινομένων, καθώς επίσης και της μεταφοράς θερμότητας με αγωγή των ηλεκτρονίων, αλλά και τη θερμική ανισορροπία μεταξύ ηλεκτρονίων και κρυσταλλικών σωματιδίων. Μετά την εξαγωγή των αποτελεσμάτων από τη μέθοδο αυτή, γίνεται επαλήθευση και διασταύρωση των αποτελεσμάτων με τη βοήθεια της εξίσωσης που συνδέει την κινητική ενέργεια των σωματιδίων και τη θερμοκρασία της κρυσταλλικής δομής. Στην περίπτωση της TTM, οι θερμοκρασίες των ατόμων και των ηλεκτρονίων επηρεάζουν τη θερμική αγωγιμότητα και τη θερμοχωρητικότητα των ηλεκτρονίων. Η εξαγωγή των αποτελεσμάτων έγινε με τη βοήθεια δύο ειδών από συνοριακές συνθήκες:

- **Περίπτωση 1^η:** Ένα θερμικό λουτρό εκτείνεται σε μακρομοριακές διαστάσεις, με τη βοήθεια της μεθόδου πεπερασμένων διαφορών (FD) και έχοντας ως αρχική εξίσωση αυτή που αφορά το διθερμοκρασιακό μοντέλο.
- **Περίπτωση 2^η:** Ένα θερμικό λουτρό τοποθετείται στο κατώτατο σύνορο της MD ανάλυσης, δηλαδή στη θέση $x = 0$.

Ανεξάρτητα από τη χρησιμοποιούμενη περίπτωση, διαπιστώνεται, κατά την εκτέλεση του συνδυασμένου υπολογιστικού κώδικα, ότι ο κυρίαρχος μηχανισμός μετάδοσης θερμότητας στην πρώτη φάση του φαινομένου είναι η *αγωγή ηλεκτρονίων*, η οποία λαμβάνει χώρα μερικά picoseconds μετά την επενέργεια του παλμού. Η μεταφορά θερμότητας γίνεται με αγωγή και στο επόμενο στάδιο, αυτό του θερμικού οπτικού κύματος.



Σχήμα 3.16. Αναπαράσταση της διαδικασίας υπολογισμού των μηχανισμών μετάδοσης θερμότητας και κρουστικών κυμάτων, με τη συνδυαστική χρήση των μεθόδων TTM, MD και FD.

3.5. Περιγραφή των συνοριακών συνθηκών για προβλήματα MD

Όταν εκτελούνται υπολογισμοί Μοριακής Δυναμικής σε μόρια και σωματίδια, τα οποία βρίσκονται σε μία τέτοια θερμοκρασία ώστε η κατάσταση της ύλης για το υλικό στο οποίο αντιστοιχούν να είναι εξ ολοκλήρου στερεά, δεν υπάρχει καμία απαίτηση αναφορικά με τον περιορισμό του όγκου προσομοίωσης, ενώ ταυτόχρονα μπορεί το σύστημα προσομοίωσης να περιλαμβάνει μόνο μία χωρική διάσταση, λόγω

του εν γένει ισοτροπικού χαρακτήρα του υπό μελέτη όγκου. Όμως, σε περίπτωση που παρεμβάλλονται υγρά ή αερίωδη μέρη στον όγκο αυτό, είναι πλέον αναγκαίο να περιοριστεί ο όγκος προσομοίωσης, καθώς σε διαφορετική περίπτωση θα πρέπει η προσομοίωση να πραγματοποιηθεί σε όλες τις διαστάσεις του συστήματος, αυξάνοντας με αυτό τον τρόπο σημαντικά τον υπολογιστικό χρόνο.

Ο περιορισμός του όγκου προσομοίωσης γίνεται μέσω της εισαγωγής *χωρικών συνοριακών συνθηκών*. Η Μοριακή Δυναμική ανάλυση εφαρμόζεται κατά βάση σε συστήματα που εμπεριέχουν μερικές εκατοντάδες ή χιλιάδες σωματίδια προς προσομοίωση. Αν θέλουμε να λάβουμε υπόψη την ύπαρξη ατελειών σε έναν απεριόριστο κρύσταλλο, μπορούμε να προσομοιώσουμε τις ιδιότητές τους θεωρώντας την *υπολογιστική κυψελίδα αναφοράς* ως τμήμα του απεριόριστου κρυστάλλου και διατυπώνοντας μία σειρά από σχέσεις που εκφράζουν, σε αντιστοιχία με τις ιδιότητες των σωματιδίων εντός της κυψελίδας, τα χαρακτηριστικά και τις ιδιότητες των σωματιδίων που βρίσκονται έξω από αυτήν. Η εισαγωγή συνοριακών συνθηκών στο σύστημα MD επιβάλλεται τόσο από τους παραπάνω λόγους, όσο και από τη διαπίστωση ότι όσο μεγάλο κι αν είναι το υπό μελέτη σύστημα, είναι σίγουρα μικρότερο από το πραγματικό σύστημα, το οποίο αποτελείται από ένα ιδιαίτερα μεγάλο βαθμό σωματιδίων.

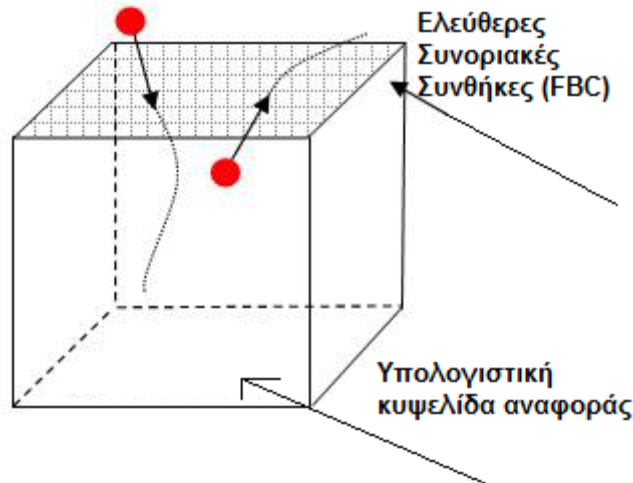
Τα είδη συνοριακών συνθηκών που χρησιμοποιούνται, και τα οποία θα αναλυθούν στα επόμενα Εδάφια, είναι τα εξής:

- **Ελεύθερες Συνοριακές Συνθήκες** (*Free Boundary Conditions – FBC*).
- **Ανακλώμενες Συνοριακές Συνθήκες** (*Reflecting Boundary Conditions – RBC*).
- **Περιοδικές Συνοριακές Συνθήκες** (*Periodic Boundary Conditions – PBC*).

3.5.1. Ελεύθερες Συνοριακές Συνθήκες

Οι ελεύθερες συνοριακές συνθήκες αποτελούν την απλούστερη μορφή συνοριακών συνθηκών από αυτές που χρησιμοποιούνται σε μία προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής. Οι συνθήκες αυτές ονομάζονται αλλιώς και *συνθήκες ελεύθερης επιφάνειας*. Όταν αυτές οι συνθήκες εφαρμόζονται, επιτρέπουν σε οποιοδήποτε σωματίδιο του όγκου προσομοίωσης, που θα έρθει σε επαφή με τη θεωρητική επιφάνεια που ορίζουν οι συνθήκες αυτές, να μπορεί να απομακρυνθεί από τον όγκο προσομοίωσης. Οι ίδιες συνθήκες επιτρέπουν, αντίστροφα, σε οποιοδήποτε σωματίδιο που δεν ανήκει αρχικά στον υπόψη όγκο, να εισέλθει σε αυτόν. Η απομάκρυνση των σωματιδίων από τον όγκο προσομοίωσης γίνεται κάτω από κάποιες καθορισμένες συνθήκες, οι οποίες θα περιγραφούν στο επόμενο Κεφάλαιο. Μπορούμε πάντως να σημειώσουμε εδώ συνοπτικά ότι τα σωματίδια κινούνται είτε λόγω της πιθανής απομάκρυνσής τους από τον όγκο προσομοίωσης είτε λόγω της ταλαντωτικής τους κίνησης μέσα στην κρυσταλλική δομή.

Το παρακάτω Σχήμα 3.17. εμφανίζει τη θέση των ελεύθερων συνοριακών συνθηκών μέσα στον υπολογιστικό όγκο της κυψελίδας:

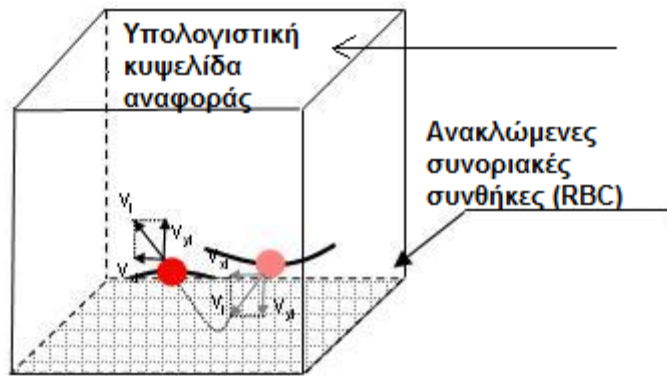


Σχήμα 3.17. Σχηματική αναπαράσταση των ελεύθερων συνοριακών συνθηκών (FBC) μέσα στην υπολογιστική κυψελίδα αναφοράς.

3.5.2. Ανακλώμενες Συνοριακές Συνθήκες

Κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, οι ανακλώμενες συνοριακές συνθήκες χαρακτηρίζονται από μία θεωρητική επιφάνεια, πάνω στην οποία, όταν προσπέσει ένα σωματίδιο του όγκου προσομοίωσης, το κάθετο (στην επιφάνεια) διάνυσμα της συνιστάμενης ταχύτητάς του αποκτά αντίστροφη φορά (γι' αυτό άλλωστε και αυτές οι συνοριακές συνθήκες ονομάζονται *ανακλώμενες*). Η έλευση ενός σωματιδίου σε επαφή με τη θεωρητική επιφάνεια μιας ανακλώμενης συνοριακής συνθήκης οφείλεται στην ταλαντωτική κίνηση των ατόμων της κρυσταλλικής δομής.

Η εφαρμογή ανακλώμενων συνοριακών συνθηκών εξασφαλίζει τη *μόνωση* του συστήματος, καθώς διασφαλίζει ότι η ολική ενέργεια, ο όγκος και ο συνολικός αριθμός σωματιδίων διατηρείται σταθερός καθ' όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης.



Σχήμα 3.18. Σχηματική αναπαράσταση των ανακλώμενων συνοριακών συνθηκών (FBC) μέσα στην υπολογιστική κυψελίδα αναφοράς.

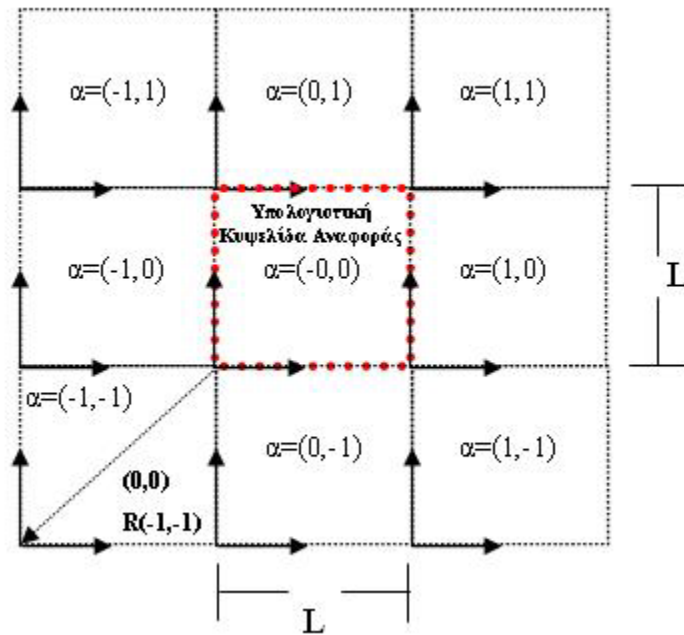
3.5.3. Περιοδικές Συνοριακές Συνθήκες

Στα πλαίσια της περιγραφής των περιοδικών συνοριακών συνθηκών, θεωρούμε ότι ο απεριόριστος κρύσταλλος αποτελεί μία περιοδική επανάληψη της υπολογιστικής κυψελίδας αναφοράς προς όλες τις διαστάσεις του χώρου, δηλαδή προς όλες τις διευθύνσεις X , Y και Z ενός τρισδιάστατου καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων. Κατά συνέπεια, θεωρούμε ότι ο απεριόριστος κρύσταλλος περιλαμβάνει έναν απεριόριστο αριθμό σωματιδίων, που παίζουν το ρόλο των ειδώλων για τα σωματίδια της κύριας υπολογιστικής κυψελίδας. Αυτό δηλαδή σημαίνει ότι οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες είναι ουσιαστικά η δημιουργία πανομοιότυπων αντιγράφων της υπολογιστικής κυψελίδας αναφοράς, τα οποία (αντίγραφα) θα χρησιμοποιηθούν για την προσομοίωση γύρω από την κυψελίδα.

Κάθε άτομο που βρίσκεται στη θέση $\overset{1}{r}$ της μοντελοποιούμενης κυψελίδας αντιπροσωπεύει ένα σύνολο ατόμων, των οποίων οι θέσεις καθορίζονται από γραμμικούς συνδυασμούς της θέσης $\overset{1}{r}$ και των διανυσμάτων θέσης των γωνιών της κυψελίδας, $\overset{1}{a}$, $\overset{1}{b}$ και $\overset{1}{c}$:

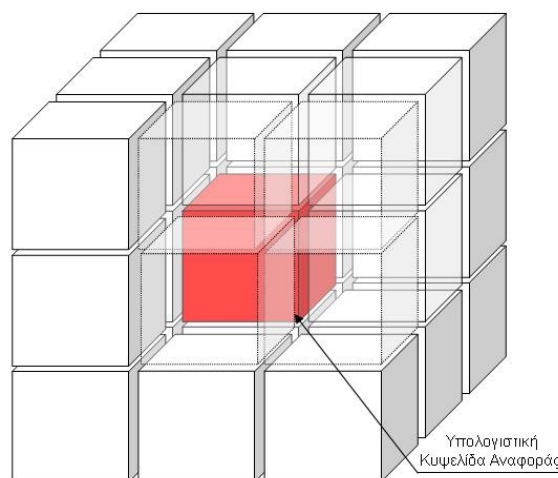
$$\overset{u}{r} = \overset{1}{r} + l\overset{1}{a} + m\overset{1}{b} + n\overset{1}{c}, \text{ με } l, m, n \in \Delta. \quad (3.22)$$

Στην περίπτωση των δισδιάστατων περιοδικών συνοριακών συνθηκών, η κύρια υπολογιστική κυψελίδα περικλείεται από $3^2 - 1 = 8$ πανομοιότυπα αντίγραφα, με το συνολικό αριθμό των 9 κυψελίδων να είναι ουσιαστικά το πλήθος των πιθανών συνδυασμών από δύο (2) ίδιες ή διαφορετικές τιμές μεταξύ των αριθμών -1, 0 και 1. Μία τέτοια αναπαράσταση εμφανίζεται στο παρακάτω Σχήμα 3.19.:



Σχήμα 3.19. Αναπαράσταση περιοδικών συνοριακών συνθηκών (PBC) σε δύο διαστάσεις. Η υπολογιστική κυψελίδα περικλείεται από οκτώ (8) πανομοιότυπα αντίγραφα, κάθε ένα από τα οποία χαρακτηρίζεται από ένα διάνυσμα μετατόπισης $\vec{a} = (x, y)$, με $x, y \in [-1, 1]$.

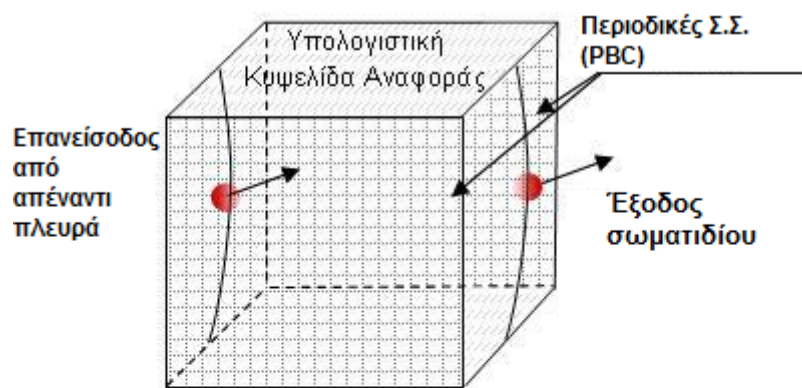
Στην περίπτωση των τρισδιάστατων περιοδικών συνοριακών συνθηκών, η κύρια υπολογιστική κυψελίδα περικλείεται από $3^3 - 1 = 26$ πανομοιότυπα αντίγραφα, με το συνολικό αριθμό των 27 κυψελίδων να αναπαριστά το πλήθος των πιθανών συνδυασμών από τρεις (3) ίδιες ή διαφορετικές τιμές μεταξύ των αριθμών -1, 0 και 1. Μία τέτοια αναπαράσταση εμφανίζεται στο παρακάτω Σχήμα 3.20., όπου με κόκκινο χρώμα εμφανίζεται η υπολογιστική κυψελίδα αναφοράς.



Σχήμα 3.20. Αναπαράσταση περιοδικών συνοριακών συνθηκών (PBC) σε τρεις διαστάσεις. Η υπολογιστική κυψελίδα περικλείεται από είκοσι έξι (26) πανομοιότυπα αντίγραφα, κάθε ένα από τα οποία χαρακτηρίζεται από ένα διάνυσμα μετατόπισης $\vec{a} = (x, y, z)$, με $x, y, z \in [-1, 1]$.

Κάθε μέλος του συνόλου των αντιγράφων της υπολογιστικής κυψελίδας συμπεριφέρεται όμοια με κάθε άλλο μέλος του ίδιου συνόλου, κάνοντας έτσι αναγκαία την αναπαράσταση μόνο ενός από τα μέλη αυτά, στα πλαίσια της διαδικασίας ανάπτυξης του κώδικα MD. Επίσης, κάθε άτομο της κυψελίδας προσομοίωσης αλληλεπιδρά τόσο με τα υπόλοιπα άτομα της κυψελίδας όσο και με τα αντίγραφά τους στις γύρω κυψελίδες που έχουν καταστρωθεί κατά την εισαγωγή των περιοδικών συνοριακών συνθηκών. Με αυτό τον τρόπο εξαλείφονται οι επιφάνειες και τα φαινόμενα που σχετίζονται με τις κυψελίδες, ενώ οι θέσεις των ορίων της μοντελοποιούμενης κυψελίδας δεν έχουν πλέον σημασία κατά την προσομοίωση. Παρά το γεγονός ότι, λόγω της εισαγωγής των περιοδικών συνοριακών συνθηκών, ο αριθμός των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων αυξάνεται, δε συμβαίνει το ίδιο με την απαιτούμενη υπολογιστική ισχύ, καθώς αυτή επηρεάζεται ελάχιστα λόγω της μικρής ακτίνας δράσης των δυναμικών.

Έστω ότι ο όγκος προσομοίωσης είναι κυβικός, κάτι που ουσιαστικά αποτελεί και την απλούστερη περίπτωση προσομοίωσης. Έστω επίσης ότι ο αριθμός σωματιδίων που περιλαμβάνει ο υπόψη όγκος είναι N . Για όσο διαρκεί η προσομοίωση, η ταλάντωση της κρυσταλλικής δομής του στερεού υλικού θα υποχρεώσει ορισμένα από τα σωματίδια να εξέλθουν του όγκου προσομοίωσης, ακολουθώντας τις αντίστοιχες τροχιές. Όμως, η απαίτηση για τη διατήρηση του αριθμού σωματιδίων σε μία σταθερή τιμή οδηγεί στην ανάγκη να επανεισέλθει ένα νέο σωματίδιο στον όγκο προσομοίωσης, κατά τέτοιο τρόπο όπως εμφανίζεται στο παρακάτω Σχήμα 3.21. Παρατηρώντας το Σχήμα βλέπουμε ότι, όταν το σωματίδιο εξέλθει από το ένα όριο της υπολογιστικής κυψελίδας αναφοράς, το ίδιο αυτό σωματίδιο εισέρχεται από την απέναντι πλευρά με το ίδιο διάνυσμα ταχύτητας.



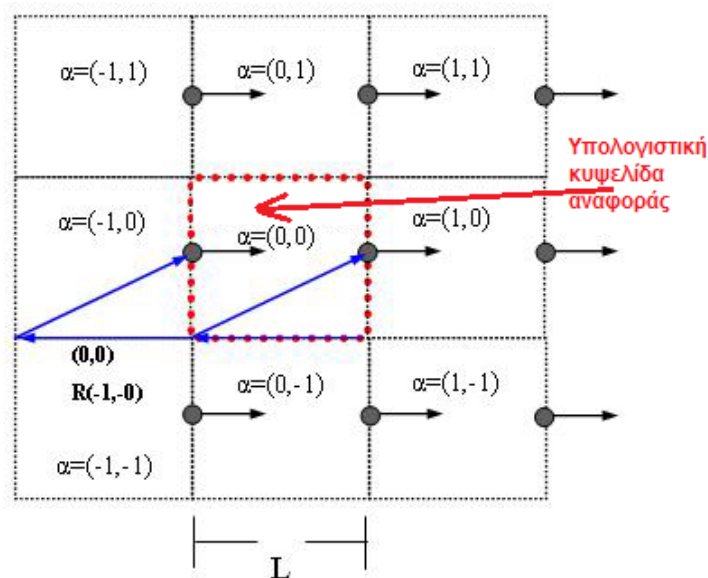
Σχήμα 3.21. Αναπαράσταση της εξόδου και επανεισόδου ενός ατόμου μέσα στην υπολογιστική κυψελίδα, στα πλαίσια της εφαρμογής των περιοδικών συνοριακών συνθηκών.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Για να διατηρηθεί η ολική ενέργεια του συστήματος σταθερή, θα πρέπει το νέο σωματίδιο να έχει την ίδια ταχύτητα και δυναμική ενέργεια με αυτό που μόλις εξήλθε του όγκου της κυψελίδας αναφοράς.

Έστω ότι ο όγκος προσομοίωσης είναι ένας κύβος ακμής L , με κέντρο το σημείο $(x, y, z) = \left(\frac{L}{2}, \frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right)$. Η απομάκρυνση ενός σωματιδίου από τη θέση $x = L$, που αντιστοιχεί στο ένα άκρο του κύβου, θα συνεπάγεται ακολούθως και την εισροή ενός νέου σωματιδίου στον όγκο προσομοίωσης, από τη θέση $x = 0$, με τις συντεταγμένες του κατά τους άξονες y και z να διατηρούνται παρ'όλα αυτά σταθερές και ίδιες με αυτές του σωματιδίου που εξήλθε. Παρόμοιες διαπιστώσεις ισχύουν και κατά την περίπτωση εκροής ενός σωματιδίου από τον όγκο προσομοίωσης κατά τις διευθύνσεις y και z .

Όπως θα διαπιστώσουμε και στο παρακάτω Σχήμα 3.22., από τη στιγμή που τα όσα λαμβάνουν χώρα στην υπολογιστική κυψελίδα αναφοράς αντιγράφονται σε κάθε αντίγραφο της κυψελίδας, η μάζα της παραμένει σταθερή.



Σχήμα 3.22. Εφαρμογή περιοδικών συνοριακών συνθηκών σε δύο διαστάσεις.

Η περίπτωση που εξετάζεται στο παραπάνω Σχήμα αφορά προσομοίωση σε δύο διαστάσεις. Στα τρισδιάστατα προβλήματα, το διάνυσμα μετατόπισης της κύριας κυψελίδας είναι το $\overset{1}{a} = (0, 0, 0)$. Για ένα διάνυσμα $\overset{1}{r}$, του οποίου η κορυφή εμπεριέχεται σε ένα κελί A αλλά ξεκινά από την αρχή του κελιού B , η πλήρης έκφραση του διανύσματος είναι $\overset{\Gamma(B)}{r}_{(A)}$. Για κυβικές, τρισδιάστατες κυψελίδες, υπάρχει η δυνατότητα έκφρασης της αρχής συντεταγμένων κάθε αντίγραφου κυψελίδας, με τη βοήθεια ενός διανύσματος $\overset{u}{R}$ με την ακόλουθη αναλυτική έκφραση:

$$\mathbf{R}_{(A)}^{(0,0,0)} = L\mathbf{a} \quad (3.23)$$

όπου L η ακμή της κυβικής κυψελίδας (βαθμωτό μέγεθος).

Για όλα τα αντίγραφα κελιά A , κάθε σωματίδιο i καταλαμβάνει την ίδια θέση με αυτή που καταλαμβάνει στην κύρια κυψελίδα:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_{(A)} \\ r_{(A)} \end{pmatrix}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{(0,0,0)} \\ r_{(0,0,0)} \end{pmatrix}_i \quad (3.24)$$

Αυτό συνεπάγεται ότι κάθε αντίγραφο του i θα έχει και την ίδια ορμή με το i :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{p}_{(A)} \\ p_{(A)} \end{pmatrix}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{p}_{(0,0,0)} \\ p_{(0,0,0)} \end{pmatrix}_i \quad (3.25)$$

Κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης MD, απαιτείται μόνο η αποθήκευση των θέσεων των σωματιδίων στην υπολογιστική κυψελίδα αναφοράς, κάτι που πρόκειται για μία πολύ σημαντική διευκόλυνση που έρχεται ως συνέπεια της εφαρμογής των περιοδικών συνοριακών συνθηκών. Οι θέσεις των αντιγράφων υπολογίζονται μόνο όταν είναι απαραίτητο, με τη βοήθεια του μετασχηματισμού συντεταγμένων. Ο απλούστερος μετασχηματισμός σε τρεις διαστάσεις είναι για τις *κυβικές* κυψελίδες, όπου η θέση του αντιγράφου ενός σωματιδίου i , μέσα σε μία κυψελίδα A που περιλαμβάνεται σε ένα σύνολο κυβικών κυψελίδων ακμής L , υπολογίζεται με τη βοήθεια της ακόλουθης σχέσης:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_{(0,0,0)} \\ r_{(0,0,0)} \end{pmatrix}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{(A)} \\ r_{(A)} \end{pmatrix}_i + \mathbf{R}_{(A)}^{(0,0,0)} = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{(A)} \\ r_{(A)} \end{pmatrix}_i + L\mathbf{a} \quad (3.26)$$

Λόγω της παραπάνω σχέσης, διαπιστώνουμε εντέλει ότι η θέση ενός αντιγράφου σωματιδίου i μπορεί να υπολογιστεί απλά έχοντας γνώση τη θέση του i στην κύρια κυψελίδα, καθώς επίσης και το διάνυσμα μετατόπισης \mathbf{a} .

Η ολική δυναμική ενέργεια της κυψελίδας αναφοράς (Reference Cell – RC), λόγω της ύπαρξης N σωματιδίων σε αυτή, υπολογίζεται με τη βοήθεια της ακόλουθης σχέσης:

$$U_{RC} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum V(r_{ij}^{(0,0,0)}) \quad (3.27)$$

όπου $V(r_{ij})$ το δυναμικό δύο σωμάτων. Σε περιοδικά συστήματα εκτός από αυτά της κύριας κυψελίδας, τα αντίγραφα αυτών συνεισφέρουν και αυτά στην ολική δυναμική ενέργεια:

$$U_{non-RC} = \frac{1}{2} \sum_a \sum_{i \neq j} \sum u(r_{ij}^{(0,0,0)} - aL) \quad (3.28)$$

όπου $r_{ij} - aL = r_i - (r_j + aL)$.

Σε ένα D-διάστατο σύστημα, το άθροισμα όλων των διανυσμάτων μετατόπισης \vec{a} για όλες τις κυψελίδες, αυξάνει τις συνεισφορές από την κύρια κυψελίδα ($\vec{a} = \{0, 0, 0\}$) και όλες τις αντίγραφες. Η σχέση που αναπαριστά, σε μαθηματική μορφή, τα παραπάνω, διατυπώνεται ακολούθως για τρισδιάστατο σύστημα συντεταγμένων:

$$\sum_a (\dots) = \sum_{a_x=-\infty}^{+\infty} \sum_{a_y=-\infty}^{+\infty} \sum_{a_z=-\infty}^{+\infty} (\dots) \quad (3.29)$$

Για ένα τυχαίο σωματίδιο s που βρίσκεται εντός της κύριας κυψελίδας, η δυναμική ενέργεια δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$U_s = \frac{1}{2} \sum_a \sum_{j \neq s} V(r_{sj}^{(0,0,0)} - aL) \quad (3.30)$$

Κάθε αντίγραφο του σωματιδίου s χαρακτηρίζεται από την ίδια δυναμική ενέργεια με αυτή που υπολογίστηκε στην (3.30). Για παράδειγμα, η έκφραση που δίνει τη δυναμική ενέργεια για ένα αντίγραφο s' με διάνυσμα μετατόπισης $\vec{a} = \{1, 1, 1\}$, είναι η παρακάτω:

$$U_{s'} = \frac{1}{2} \sum_a \sum_{j \neq s'} V(r_{s'j}^{(1,1,1)} - aL) \quad (3.31)$$

Όμως, λόγω της (3.24) ισχύει ότι $r_{mj}^{(0,0,0)} = r_{m'j}^{(1,1,1)}$, κατά συνέπεια επαληθεύεται ότι $U_s = U_{s'}$.

Από τα παραπάνω βλέπουμε ότι η δύναμη που ασκεί κάθε αντίγραφο σωματίδιο s' είναι ίση με τη δύναμη που ασκεί το σωματίδιο της κύριας κυψελίδας, s . Δηλαδή:

$$\frac{\partial P_{E-s}}{\partial r_{s(0,0,0)}^{(0,0,0)}} = \frac{\partial P_{E-s'}}{\partial r_{s(1,1,1)}^{(1,1,1)}} \Rightarrow F_s = F_{s'} \quad (3.32)$$

Από την (3.32) συμπεραίνουμε ότι, για τα αντίγραφα σωματίδια που βρίσκονται στις αντίγραφες κυψελίδες, οι ακολουθούμενες τροχιές είναι επίσης αντίγραφες σε σχέση με το αρχικό σωματίδιο. Η δύναμη που ασκείται σε ένα σωματίδιο από αυτά που βρίσκονται τόσο στην κύρια όσο και στις αντίγραφες κυψελίδες, δίνεται από μία σχέση που προκύπτει ουσιαστικά από την (3.28):

$$F_s = \sum_a \sum_{j \neq s} f(r_{sj} - aL) \quad (3.33)$$

όπου f η δύναμη μεταξύ δύο σωματιδίων, r_{sj} η απόσταση μεταξύ των σωματιδίων s και j και a μία ποσότητα που εκφράζεται μέσω της σχέσης (3.29).

Οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες ορίζουν τι γίνεται σε ένα σωματίδιο όταν συναντά το όριο του συστήματος. Κάθε σωματίδιο που εγκαταλείπει την κύρια κυψελίδα αντικαθίσταται από το αντίγραφό του, το οποίο εισέρχεται σε αυτή. Ένα σωματίδιο i μετακινείται από την κύρια κυψελίδα στην

αντίγραφο, έστω A , ενώ από την αντίγραφο $-A$ ένα άλλο σωματίδιο εισέρχεται στην κύρια. Ο μετασχηματισμός θέσης του σωματιδίου i εκφράζεται ως εξής:

$$r_{i(0,0,0)}^{(0,0,0)} \Rightarrow r_{i(-A)}^{(0,0,0)} = r_{i(0,0,0)}^{(0,0,0)} - La \quad (3.34)$$

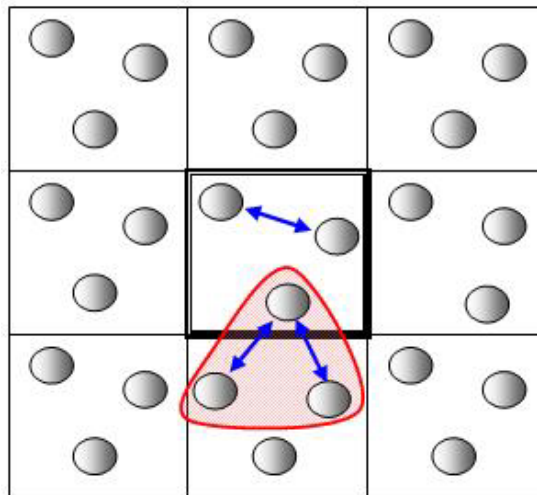
Λόγω της (3.25), συμπεραίνουμε ότι ο μετασχηματισμός θέσης του i δεν επηρεάζει την ορμή \mathbf{p}_i , επειδή το σωματίδιο που προέρχεται από την κυψελίδα $-A$ έχει την ίδια ταχύτητα με αυτό της κύριας κυψελίδας:

$$\mathbf{p}_{i(0,0,0)}^{(0,0,0)} \Rightarrow \mathbf{p}_{i(-a)}^{(0,0,0)} = \mathbf{p}_{i(0,0,0)}^{(0,0,0)} \quad (3.35)$$

Οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες τελικώς ορίζονται από τις σχέσεις μετασχηματισμού (3.34) και (3.35).

Κριτήριο Ελάχιστης Εικόνας – Minimum Image Criterion

Το κριτήριο αυτό χρησιμοποιείται στα πλαίσια της εισαγωγής και εφαρμογής περιοδικών συνοριακών συνθηκών με σκοπό την όσο το δυνατό μεγαλύτερη ελάττωση της απαιτούμενης υπολογιστικής ισχύος. Για την εφαρμογή αυτού του κριτηρίου, θα πρέπει η υπολογιστική κυψελίδα αναφοράς που θα χρησιμοποιηθεί στη μοντελοποίηση να έχει όλες τις διαστάσεις τουλάχιστον ίσες με το διπλάσιο της ακτίνας αποκοπής δράσης του δυναμικού. Με άλλα λόγια, αν υποθέσουμε ότι η ακτίνα αποκοπής (*cutoff distance*, η απόσταση δύο σωματιδίων πέρα από την οποία οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης μεταξύ τους είναι αμελητέες) είναι ίση με r_c και όλες οι διαστάσεις της κυψελίδας είναι $2r_c$, είναι σίγουρο ότι κάποιο άτομο i της κυψελίδας θα αλληλεπιδρά με ένα άτομο j και με το πολύ ένα περιοδικό αντίγραφο του j . Κάτι τέτοιο συμβαίνει επειδή δύο αντίγραφα του j θα πρέπει να βρίσκονται σε μεταξύ τους απόσταση τουλάχιστον $2r_c$, από τη στιγμή που δεν υπάρχει επικάλυψη τόσο ανάμεσα στα αντίγραφα όσο και ανάμεσα στην κύρια κυψελίδα και σε κάθε αντίγραφο. Με δεδομένο ότι η κυψελίδα προσομοίωσης έχει διαστάσεις τουλάχιστον $2r_c$, μπορεί το κριτήριο ελάχιστης εικόνας να εφαρμοστεί. Σύμφωνα με αυτό το κριτήριο, ανάμεσα σε όλα τα αντίγραφα ενός ατόμου j που αλληλεπιδρά με το i , λαμβάνεται υπόψη στους υπολογισμούς *MONO* το αντίγραφο εκείνο που βρίσκεται πλησιέστερα στο i . Η εφαρμογή του κριτηρίου μειώνει στο ελάχιστο το υπολογιστικό κόστος, χωρίς να δημιουργεί προβλήματα ούτε στους υπολογισμούς αλλά ούτε και στην ακρίβειά τους. Το παρακάτω Σχήμα 3.23. παρουσιάζει σχηματικά τη διαδικασία εφαρμογής του κριτηρίου:



Σχήμα 3.23. Κριτήριο ελάχιστης εικόνας (*Minimum Image Criterion*). Η υπολογιστική κυψελίδα αναφοράς περιέχει $N = 3$ σωματίδια, με αποτέλεσμα να υπάρχουν $\frac{N(N-1)}{2} = 3$ γειτονικά ζεύγη σωματιδίων. Ο διαχωρισμός των ζευγών ορίζεται από την ελάχιστη απόσταση μεταξύ του σωματιδίου i και κάθε αντιγράφου του j .

3.6. Παραδείγματα διεξαχθεισών υπολογιστικών αναλύσεων και προσεγγίσεων στο φαινόμενο της φωτοαποδόμησης με Laser

3.6.1. Προσομοίωση των αρχικών σταδίων της διαδικασίας φωτοαποδόμησης με Laser με χρήση ανάλυσης πεπερασμένων στοιχείων (Conde et al., [59])

Στα πλαίσια της δουλειάς από μια σειρά Ιταλών και Ισπανών ερευνητών, και η οποία παρουσιάζεται περιεκτικά στη μελέτη [59], διατυπώθηκε ένα θεωρητικό μοντέλο της διαδικασίας φωτοαποδόμησης με Laser, το οποίο κατά κύριο λόγο εμβαθύνει στις διεργασίες που λαμβάνουν χώρα τις πρώτες χρονικές στιγμές μετά την πρόσπτωση του παλμού (ή των παλμών) Laser πάνω στην επιφάνεια του υλικού. Το βασικό χαρακτηριστικό που κάνει τη μελέτη των Conde *et al.* να ξεχωρίζει είναι η συμπερίληψη της έννοιας της *τραχύτητας επιφάνειας* (surface roughness) ως βασικό παράγοντα που επηρεάζει το θεωρητικό μοντέλο φωτοαποδόμησης με Laser. Η διαφορική εξίσωση θερμότητας επιλύθηκε με χρήση του υπολογιστικού πακέτου ANSYS, το οποίο όμως δε θα χρησιμοποιήσουμε στην παρούσα μελέτη μας, καθώς το λογισμικό Matlab θα χρησιμοποιηθεί για την ανάπτυξη του υπολογιστικού κώδικα.

Το μοντέλο που αναπτύχθηκε στη μελέτη [59] είναι *δισδιάστατο* (2D). Πάνω σε αυτό χρησιμοποιήθηκε ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων για την προσομοίωση της ακτινοβόλησης ενός στόχου από πυρίτιο (Si), με χρήση μιας δέσμης που παράχθηκε από ένα *Excimer Laser*. Το Si

χρησιμοποιείται ως ένα σύνθητες υλικό-στόχος για την εξέταση του φαινομένου της φωτοαποδόμησης με παλμικό Laser, λόγω των φυσικών ιδιοτήτων του υλικού αλλά και του ευρέος φάσματος εφαρμογών στις οποίες χρησιμοποιείται. Το μοντέλο που περιγράφεται λαμβάνει υπόψη, πέραν της τραχύτητας της επιφάνειας του στόχου, πιθανές ατέλειες στην επιφάνειά του, καθώς επίσης και το φαινόμενο του *plasma shielding* που οφείλεται στην έκλυση πλάσματος κατά τη φωτοαποδόμηση του στόχου.

Η διάρκεια παλμού ορίζεται σε μερικά *nanoseconds*, πράγμα που σημαίνει ότι το συγκεκριμένο μοντέλο μπορεί να ληφθεί, κατά κάποιον τρόπο, ως οδηγός για τη διατύπωση του υπολογιστικού κώδικα της μελέτης μας (και οποίος θα παρουσιαστεί στα πλαίσια του Κεφαλαίου 5), στα πλαίσια του οποίου θα γίνει χρήση ενός *nanosecond Laser*, όπως ακριβώς και στην πειραματική διαδικασία. Το γεγονός ότι η διάρκεια του παλμού είναι της τάξης των *nanoseconds* σημαίνει ότι οι θερμικές επιδράσεις έχουν πολύ πιο βαρύνουσα σημασία από τις οπτικές διαδικασίες, στα πλαίσια της διαδικασίας φωτοαποδόμησης. Κατά συνέπεια, η θερμοκρασιακή κατανομή στο στερεό, προκαλούμενη από την ακτινοβολία Laser, μπορεί να υπολογιστεί με τη βοήθεια της παρακάτω ευρέως γνωστής και χρησιμοποιούμενης εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας με αγωγή:

$$\frac{\partial H(T)}{\partial t} = \nabla \left[k(T) \nabla T(\mathbf{r}, t) \right] \quad (3.22)$$

όπου k ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας, $H(T)$ η συνάρτηση ενθαλπίας, T η θερμοκρασία, t ο χρόνος και \mathbf{r} το διάνυσμα θέσης. Η επίλυση της παραπάνω εξίσωσης καθίσταται εφικτή αν ληφθούν υπόψη οι παρακάτω συνοριακές συνθήκες:

$$T(\mathbf{r}, 0) = T_0 \quad (\forall \mathbf{r}, t = 0) \quad (3.23\alpha)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial n_i} = I_i(\mathbf{r}, t), \quad \text{για } t > 0 \quad (3.23\beta)$$

Οι θερμικές ιδιότητες του υλικού εξαρτώνται από τη θερμοκρασία του, η οποία μεταβάλλεται καθ'όλη τη διάρκεια της διαδικασίας φωτοαποδόμησης. Επίσης, η συνάρτηση ενθαλπίας λαμβάνει υπόψη τις αλλαγές φάσης καθόσον διαρκεί η διαδικασία. Η εξωτερική ροή θερμότητας, I_i , ακολουθεί μία κατανομή που προσεγγίζει τη Gauss και μπορεί να περιγραφεί με τη βοήθεια της παρακάτω εξίσωσης:

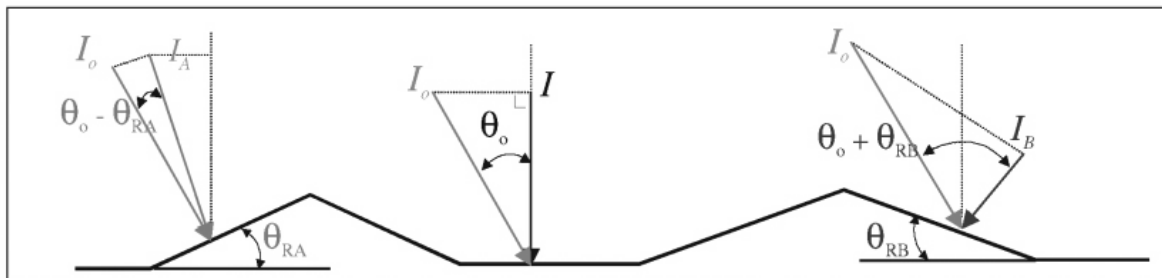
$$I_i(\mathbf{r}, t) = P(F, \tau) G(A, \theta) \quad (3.24)$$

όπου η συνάρτηση $P(F, \tau)$ λαμβάνει υπόψη την πυκνότητα ενέργειας της δέσμης, F (σε J/cm^2) καθώς επίσης και τη διάρκεια παλμού, τ (σε ns). Η συνάρτηση $G(A, \theta)$ καθορίζει τις ιδιότητες του υλικού, τη

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

γεωμετρία και τις μεταβολές στη μορφολογία της επιφάνειας, λαμβάνοντας υπόψη την απορροφητικότητα A και το συντελεστή ελάττωσης της έντασης, $\cos \theta$.

Η τοπική τραχύτητα επιφάνειας, η οποία λαμβάνεται υπόψη στο μοντέλο, ορίζεται μέσω μιας συνεχόμενης σειράς τριγώνων πάνω στην επίπεδη επιφάνεια. Όπως φαίνεται στο παρακάτω Σχήμα 3.17., ορίζεται η *χαρακτηριστική γωνία της τραχύτητας επιφάνειας*, θ_R , με αρχική τιμή $\theta_{RA} = \theta_{RB} = 3.57^\circ$. Κατά την πρόσπτωση της δέσμης Laser πάνω στην επιφάνεια του στόχου, υπό γωνία πρόσπτωσης θ_o , μπορούν να διακριθούν τρεις διαφορετικές ζώνες ακτινοβολίας, με αποτέλεσμα να διαφοροποιείται τοπικά, από θέση σε θέση, η πυκνότητα ενέργειας του Laser. Το θερμοκρασιακό πεδίο στο ισοτροπικό υλικό λαμβάνεται στους κόμβους ενός προηγουμένως καθορισμένου πλέγματος.



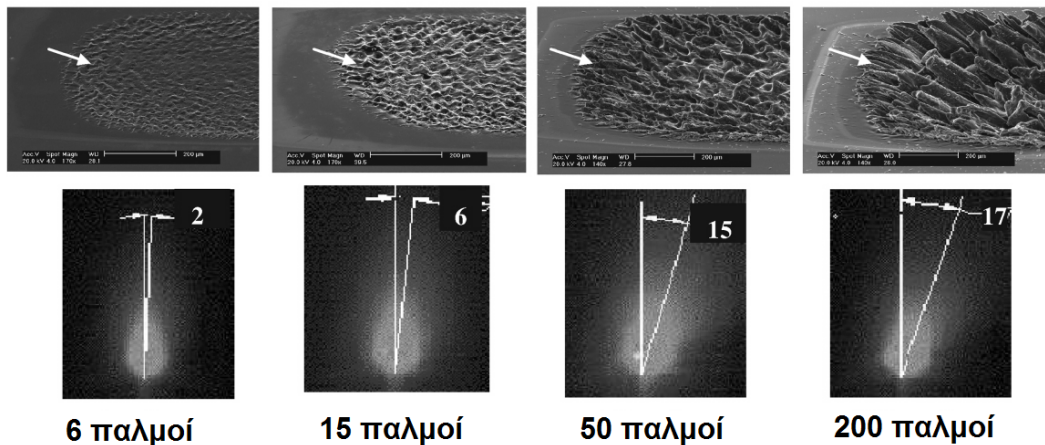
Σχήμα 3.17. Σχηματικό διάγραμμα του προφίλ της επιφάνειας του στόχου. Η τραχύτητα χαρακτηρίζεται από τις γωνίες θ_{RA} και θ_{RB} . Σε κάθε ζώνη εμφανίζεται η εξάρτηση των διαφορών γωνιών και παραμέτρων από την πυκνότητα ενέργειας του Laser. Με θ_o συμβολίζεται η γωνία πρόσπτωσης της δέσμης.

Η μοντελοποίηση των αρχικών σταδίων φωτοαποδόμησης συνδυάστηκε με μία πειραματική διαδικασία που έλαβε χώρα σε ένα σύστημα PLD υψηλού κενού, υπό βασική πίεση 10^{-3} Pa. Για την ακτινοβολία χρησιμοποιήθηκε ένα Excimer Laser XeCl, με γωνία πρόσπτωσης της δέσμης $\theta_o = 45^\circ$. Ο κάθε παλμός είχε μήκος κύματος 308 nm, η διάρκειά του ήταν 30 ns, η πυκνότητα ενέργειας 5 J/cm^2 και ο ρυθμός επαναληψιμότητας 10 Hz.

Τα πειραματικά αποτελέσματα, τα οποία απεικονίστηκαν με τη βοήθεια ενός ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης (*Scanning Electron Microscope – SEM*), εμφανίζουν ότι, ακόμα και μετά την επενέργεια λίγων παλμών, η αρχικώς επίπεδη επιφάνεια αρχίζει και αποκτά τραχύτητα, η οποία γίνεται ολοένα και εντονότερη όσο αυξάνει ο αριθμός των παλμών, κάτι που έχει ως τελικό αποτέλεσμα το σχηματισμό έντονα διακριτών ορέων και κοιλάδων. Για μικρό αριθμό παλμών, η έκλυση της στήλης πλάσματος είναι ένα φαινόμενο που δεν είναι ορατό με γυμνό μάτι, λόγω της πολύ μικρής απόκλισης του άξονα συμμετρίας της στήλης πλάσματος από τη διεύθυνση πρόσπτωσης της δέσμης Laser (π.χ. γωνία τραχύτητας 2° μετά τον έκτο (6°) παλμό). Βέβαια, για αρκετά μεγάλους αριθμούς παλμών, η μεταβολή

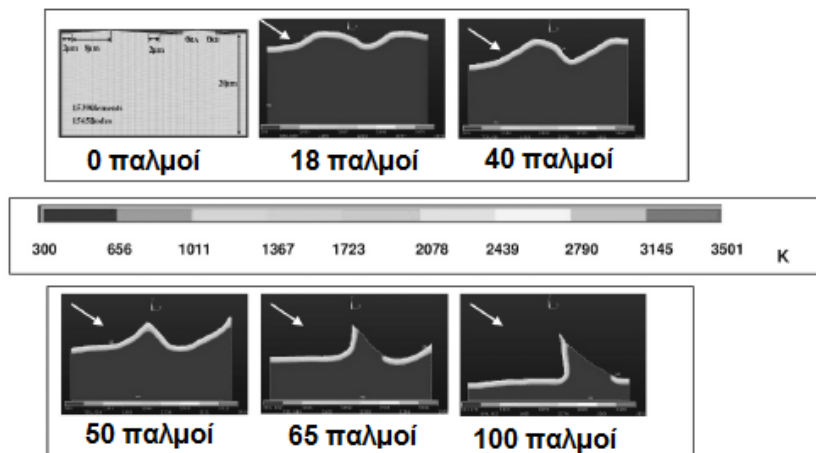
ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

της γωνίας τραχύτητας ελαττώνεται, έως ότου η γωνία φτάσει στις περίπου 17° έπειτα από την επενέργεια 200 παλμών, με τη μέγιστη τιμή της γωνίας να διαμορφώνεται τελικώς στις 18° . Το Σχήμα 3.18. εμφανίζει τις μεταβολές σε τραχύτητα και γωνία απόκλισης / τραχύτητας καθώς αυξάνεται ο αριθμός των προσπιπτόντων παλμών.



Σχήμα 3.18. Μικρογραφίες SEM της εξέλιξης στην τραχύτητα επιφάνειας (πάνω) και τη γωνία απόκλισης μεταξύ των διευθύνσεων της δέσμης Laser και της εκλυόμενης στήλης πλάσματος (κάτω), για διαφορετικά πλήθη παλμών Laser. Εμφανίζονται ταυτόχρονα εικόνες της στήλης και της γωνίας εκτροπής.

Με χρήση των ίδιων παραμέτρων Laser με αυτές που χρησιμοποιήθηκαν στο πείραμα, έλαβε χώρα και η υπολογιστική προσομοίωση του φαινομένου. Με τη βοήθεια του πακέτου ANSYS έγινε εφικτή η απεικόνιση της θερμοκρασιακής κατανομής και του προφίλ τραχύτητας για το στόχο από Si, καθώς αυξάνεται ο αριθμός των παλμών. Αρχίζει και γίνεται εμφανής η δημιουργία ορέων και κοιλάδων καθώς πληθαίνουν οι επενεργούντες παλμοί, ενώ μετά την πρόσπτωση 100 παλμών η επιφάνεια παρουσιάζει έντονη κλίση μόνο σε μία περιοχή, με το υπόλοιπο τμήμα να είναι επίπεδο. Η παραπάνω περιγραφή παρουσιάζεται σχηματικά στο παρακάτω Σχήμα 3.19.:



Σχήμα 3.19. Διαφορετικά στάδια της αριθμητικής προσομοίωσης της φωτοαποδόμησης με Laser για τον υπόψη στόχο Si. Η γεωμετρία, οι διαστάσεις και ο καθορισμός του πλέγματος εμφανίζονται στην πάνω αριστερά εικόνα (πριν προσπέσει ο πρώτος παλμός). Επίσης, εμφανίζεται η θερμοκρασιακή κατανομή και το προφίλ της επιφάνειας (τραχύτητα), για διάφορους αριθμούς παλμών Laser, από 18 έως 100.

3.6.2. Μοριακή Δυναμική Ανάλυση της φωτοαποδόμησης νικελίου (Ni) με χρήση υπερβραχέων παλμών (Atanasov, Nedialkov et al. [144])

Οι Βούλγαροι μηχανικοί Atanasov και Nedialkov, μαζί με τους συνεργάτες τους, μελέτησαν, στην τεχνική έκθεση [144], την υπολογιστική αναπαράσταση της φωτοαποδόμησης του νικελίου με χρήση υπεριωδών (UV) και υπερβραχέων (ultrashort) παλμών Laser, με διάρκεια παλμού 500 fs ($5 \cdot 10^{-13}$ s). Πρόκειται για ένα ιδιαίτερα απορροφητικό υλικό, με συντελεστή απορρόφησης 0.525 για το μήκος κύματος των 248 nm που αφορά το πείραμα.

Το κύριο μέγεθος στο οποίο εστίασαν οι μελετητές, προκειμένου να διερευνήσουν το βαθμό επίδρασης του στο δοκίμιο, είναι η πυκνότητα ενέργειας του Laser. Μελετήθηκε επίσης ο σχηματισμός και η διαστολή της στήλης πλάσματος, ενώ διερευνήθηκε και το κατώφλι φωτοαποδόμησης.

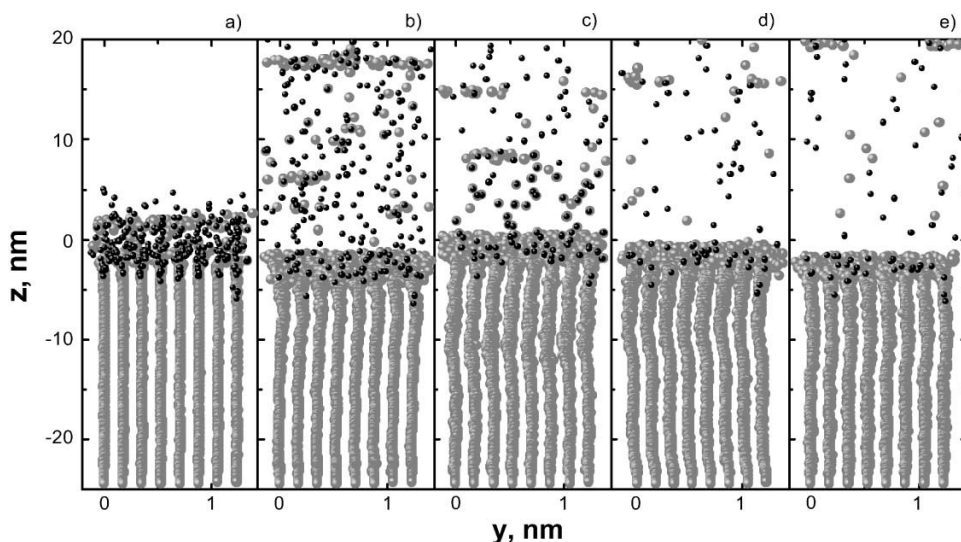
Το προφίλ της δέσμης Laser ακολουθεί χρονική κατανομή Gauss, ενώ η δέσμη εξασθενεί κατά το βάθος z με βάση τον εκθετικό νόμο του Beer-Lambert κάτι που συνδέεται με την αύξηση της κινητικής ενέργειας των ελεύθερων ηλεκτρονίων. Κάθε άτομο ιονίζεται εφόσον έχει ξεπεράσει την ενέργεια ιονισμού του καθώς θερμαίνεται (λαμβάνεται υπόψη ότι το πρώτο δυναμικό ιονισμού για το Ni ισούται με 7.63 eV). Αυτή η ενέργεια μεταφέρεται έξω από το ηλεκτρόνιο αλλά δε μεταβιβάζεται στο πλέγμα. Ένα θετικό αυτής της προσομοίωσης, που οδηγεί στη διευκόλυνσή της, είναι το γεγονός ότι το υπό περιγραφή μοντέλο είναι δισδιάστατο και περιορίζεται στις x και y διευθύνσεις, με σκοπό την αύξηση του πάχους, το οποίο υπερβαίνει τα 25 nm. Η διευκόλυνση της προσομοίωσης επιτυγχάνεται περαιτέρω από

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

το γεγονός ότι η φωτοαποδόμηση λαμβάνει χώρα σε κενό, κάτι που σημαίνει ότι τα σωματίδια του αέρα δε λαμβάνονται υπόψη στους υπολογισμούς, τους οποίους ενδεχομένως και να δυσχαίρεναν.

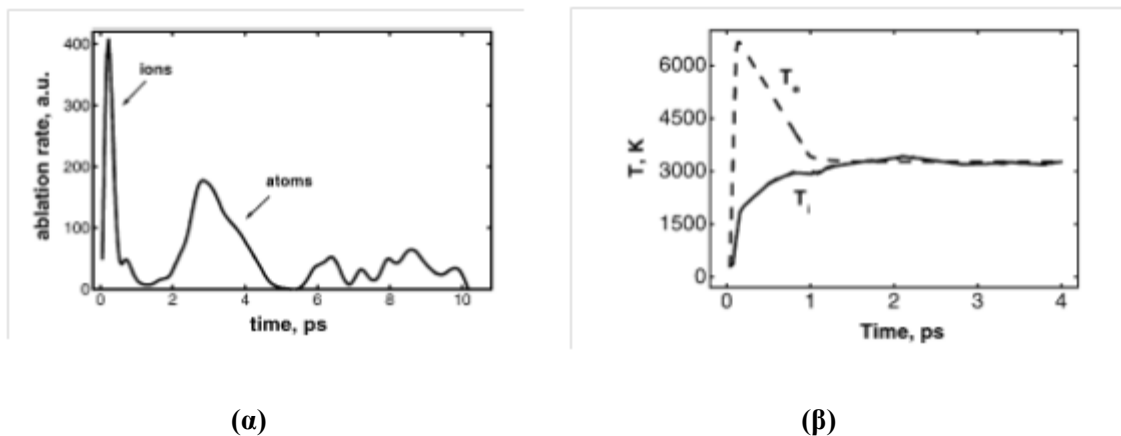
Η χρονική εξέλιξη του συστήματος, το οποίο απαρτίζεται από N σωματίδια, βασίζεται στο δεύτερο νόμο του Νεύτωνα. Από τη στιγμή που η Μοριακή Δυναμική (MD) το χρησιμοποιεί, προκειμένου για τον υπολογισμό νέων θέσεων, ταχυτήτων, επιταχύνσεων και δυνάμεων αλληλεπίδρασης, μπορεί να θεωρηθεί μία ιδιαίτερα κατάλληλη μέθοδος για την εξαγωγή των επιθυμητών αποτελεσμάτων. Η χωρική και χρονική κατανομή της ενέργειας, της θερμοκρασίας και της πίεσης του συστήματος, ταυτόχρονα με τις αλλαγές φάσεις που λαμβάνουν χώρα, μπορούν να εξαχθούν ως αποτελέσματα της εφαρμογής αυτού του κώδικα. Ο επαναληπτικός αλγόριθμος Verlet ταχύτητας (Velocity Verlet), για τον οποίο θα γίνει λόγος στο επόμενο Κεφάλαιο, εφαρμόστηκε επί του παρόντος, ενώ ταυτόχρονα η αρχική θερμοκρασία του συστήματος προσομοίωσης ορίστηκε στο απόλυτο μηδέν, με την ισορροπία να επιτυγχάνεται σε θερμοκρασία 300 K πριν ο παλμός αρχίσει να εκπέμπεται.

Από τα αποτελέσματα της μελέτης, η οποία διεξήχθη για ροή ακτινοβολίας (πυκνότητα ενέργειας) Laser 0.1 J/cm^2 , μπορεί να παρατηρηθεί ότι η θερμικά επηρεασμένη ζώνη (Heat-Affected Zone, HAZ) γίνεται τόσο πιο έντονη όσο αυξάνει η χρονική στιγμή της προσομοίωσης, όπως άλλωστε φαντάζει λογικό λόγω της συνεχούς θέρμανσης του υλικού. Πιο συγκεκριμένα, η έκταση της HAZ ορίζεται στα περίπου 2.5 nm για τη χρονική στιγμή των 500 fs, ενώ ξεπερνά τα 5 nm κατά τη χρονική στιγμή του 1 cm. Επίσης, μας κινεί το ενδιαφέρον το γεγονός ότι ο αριθμός των φωτοαποδομημένων ατόμων παρουσιάζει μέγιστο σε στιγμή διαφορετική από αυτή που αφορά τον αριθμό των αποδομημένων ιόντων. Κάτι τέτοιο έχει άμεση σχέση με την έκρηξη *Coulomb*, που προκαλεί αποβολή συσσωματωμάτων από το υλικό. Το Σχήμα 3.20. παριστάνει το ακτινοβολούμενο υλικό, στο οποίο εμφανίζονται τα άτομα και ιόντα της επιφάνειας που αποδομείται. Παρατηρώντας κάθε ένα από τα στιγμιότυπα (a) έως (e), μπορούμε να δούμε ότι το υλικό ταλαντώνεται λόγω της ισχυρής αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας Laser με την ύλη.



Σχήμα 3.20. Στιγμιότυπα της εξέλιξης της διαδικασίας φωτοαποδόμησης στο Ni, για τις χρονικές στιγμές: (α) 500 fs, (β) 1 ps, (γ) 3 ps, (δ) 6 ps, (ε) 10 ps. Η ροή ακτινοβολίας ορίζεται στα 0.1 J/cm^2 . Οι μαύρες κουκκίδες παριστάνουν τα ιόντα και οι γκριζες τα άτομα.

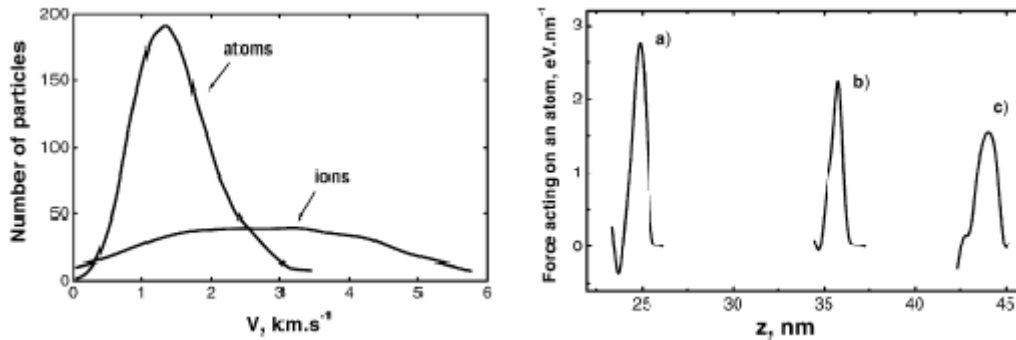
Το Σχήμα 3.21. παρακάτω, παριστάνει τόσο την εξέλιξη της συμπεριφοράς των αποδομημένων ατόμων και ιόντων στη μονάδα του χρόνου (Σχήμα [α]), μέσω του μεγέθους του ρυθμού φωτοαποδόμησης (ablation rate), όσο και τη χρονική εξέλιξη των θερμοκρασιών των ηλεκτρονίων (electrons) και του κρυσταλλικού πλέγματος (lattice) στο υπό ακτινοβολία σύστημα. Όπως μπορούμε να διαπιστώσουμε, οι ξεχωριστές αυτές θερμοκρασίες για ηλεκτρόνια και πλέγμα κατέστη εφικτό να εξαχθούν λόγω της εφαρμογής του διθερμοκρασιακού μοντέλου (Two-Temperature Model, TTM), το οποίο ενσωματώθηκε στον κώδικα προσομοίωσης MD που εφαρμόστηκε, κατόπιν εισαγωγής βασικών παραμέτρων που ανταποκρίνονται στις πραγματικές συνθήκες. Διαπιστώθηκε ότι οι ταχύτητες των μεταλλικών ατόμων ακολουθούν την κατανομή Maxwell, ενώ η ταχύτητα των ιόντων θεωρήθηκε ότι προσεγγίζει τη Maxwell, με βάση τη μελέτη των Ye και Γρηγορόπουλου [178], που αφορά την κατεργασία και φωτοαποδόμηση του τιτανίου (Ti) με femtosecond παλμούς Laser.



Σχήμα 3.21. (α) Χρονική συμπεριφορά των φωτοαποδομημένων ατόμων και ιόντων, για ροή ακτινοβολίας 0.3 J/cm^2 . (β) Χρονική εξάρτηση των θερμοκρασιών των ηλεκτρονίων (διακεκομμένη γραμμή) και του κρυσταλλικού πλέγματος (συνεχής γραμμή), για ροή ακτινοβολίας 0.1 J/cm^2 [144].

Ένα ακόμα από τα σημαντικά στοιχεία της μελέτης αυτής έχει να κάνει με τον προσδιορισμό του αριθμού ατόμων και ιόντων που έχουν αποκτήσει κάποια συγκεκριμένη τιμή ταχύτητας (σε km/s) μέσα στη στήλη πλάσματος, όπως επίσης και το σχηματισμό και τη διάδοση κρουστικών κυμάτων μέσα στο Ni, ως αποτέλεσμα της φωτοαποδόμησης. Τα γραφικά αποτελέσματα από αυτές τις μελέτες εμφανίζονται αντίστοιχα στις εικόνες [α] και

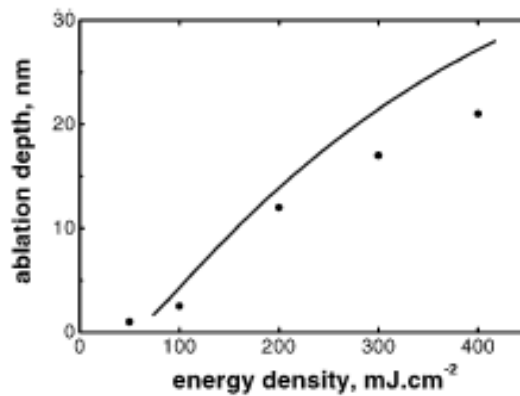
[β] του ακόλουθου Σχήματος 3.22.. Ειδικά στην περίπτωση της εικόνας (β), η εξέλιξη των κρουστικών κυμάτων εξετάζεται μέσω της εύρεσης των δυνάμεων που ασκούνται σε κάθε άτομο για όσο διαρκεί η ακτινοβολή του, σε συνδυασμό με τη διάδοση του κρουστικού κύματος κατά το βάθος (χρήσιμα στοιχεία για τη θεωρία και τα αντιπροσωπευτικά μοντέλα που αφορούν τα κρουστικά κύματα έχουν ήδη παρατεθεί στο Κεφάλαιο 2).



Σχήμα 3.22. (α) Κατανομή ταχυτήτων των αποδομημένων ατόμων και ιόντων εντός της στήλης πλάσματος, για ροή ακτινοβολίας 0.2 J/cm^2 (β) Η εξέλιξη και διάδοση των κρουστικών κυμάτων, για ροή ακτινοβολίας 0.1 J/cm^2 , κατά τις χρονικές στιγμές 1, 1.5 και 2 ps (από δεξιά προς τα αριστερά) [144].

Μιας και κάναμε αναφορά στο Κεφάλαιο 2, που αναφέρεται στα κρουστικά κύματα, μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι αυτά πρόκειται να εμφανιστούν στο υλικό από τη στιγμή που οι ταχύτητες κίνησης των ατόμων στο υπό μελέτη σύστημα είναι, σε μεγάλα διαστήματα, σαφώς μεγαλύτερες από τα 4.97 km/s που αντιπροσωπεύουν την ταχύτητα του ήχου στο Ni. Η ιδιαίτερα υψηλή τιμή των 22.1 km/s , η οποία εμφανίζεται στο διάστημα προσομοίωσης 1-1.5 ps, ελαττώνεται στα 16.5 km/s για το επόμενο μισό ps, πράγμα που σημαίνει ότι η ταχύτητα του κρουστικού κύματος ελαττώνεται με το χρόνο. Όμως, δε θα πρέπει να παραγνωριστεί το γεγονός ότι η ταχύτητα αυτή εξακολουθεί να είναι σαφώς υψηλότερη από αυτή του ήχου, δικαιολογώντας πλήρως την εις βάθος διείσδυσή του στο υλικό και πλήρη προσβολή του.

Είναι σημαντικό επίσης να αναφέρουμε ότι η μελέτη [144] εξήγαγε και αποτελέσματα για την εξέλιξη του βάθους φωτοαποδόμησης συναρτήσει της ροής ακτινοβολίας Laser. Η αύξηση του βάθους είναι σχεδόν γραμμική, και παρά το γεγονός ότι δεν υπάρχει πλήρης συμφωνία των υπολογιστικών αποτελεσμάτων με τα πειραματικά, μπορούμε να δούμε ότι τα δύο αποτελέσματα βρίσκονται πολύ κοντά και οι γραμμές τάσης τους είναι σχεδόν παράλληλες μεταξύ τους (ίσως με εξαίρεση πυκνότητες ενέργειας μεγαλύτερες των $250\text{-}300 \text{ mJ/cm}^2$).



Σχήμα 3.23. Εξάρτηση του βάθους φωτοαποδόμησης από την πυκνότητα ενέργειας του Laser. Η συνεχής γραμμή αναπαριστά τα αποτελέσματα από την προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής (MD), ενώ οι κύκλοι αντιπροσωπεύουν τα πειραματικά δεδομένα.

Τα γενικά συμπεράσματα που εξήχθησαν από την υπόψη μελέτη είναι τα εξής:

- Εξάγεται η χρονική συμπεριφορά των αποδομημένων σωματιδίων (ιόντων και ατόμων) και η κατανομή των ταχυτήτων τους μέσα στη στήλη του πλάσματος. Οι ταχύτητες των αποδομημένων ατόμων κυμαίνονται στην περιοχή των μερικών χιλιομέτρων ανά δευτερόλεπτο, όντας μικρότερες από αυτές των ιόντων. Οι συγκεκριμένες ταχύτητες αυξάνονται με τη ροή ακτινοβολίας του Laser.
- Η ταχύτητα του κρουστικού κύματος που διαδίδεται πολύ κοντά στην επιφάνεια του στερεού, υπολογίζεται εντέλει ίση με 16.5 km/s και είναι συνεχώς μειούμενη εντός του υλικού, μέχρι να λάβει την τιμή της ταχύτητας του ήχου στο Ni (4.97 km/s).
- Προσδιορίζεται το κατώφλι φωτοαποδόμησης στα 0.07 J/cm², όντας σε πολύ καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα.

3.6.3. Φωτοαποδόμηση μεταλλικών λεπτών υμενίων με χρήση femtosecond παλμών Laser (Kim & Na, [22])

Οι Νοτιοκορεάτες Kim και Na συνέταξαν τη μελέτη [22] προκειμένου να ασχοληθούν με την κατεργασία μεταλλικών επιφανειών χρησιμοποιώντας υπερβραχείς παλμούς Laser διάρκειας κάποιων femtoseconds (1 fs = 10⁻¹⁵ s). Η μελέτη τους πηγάζει από τις διαπιστώσεις που έχουν κάνει σχετικά με την εξαιρετική αποτελεσματικότητα τόσο των Laser, όσον αφορά και τις μικρο- και νανο-κατεργασίες σε κλίμακα κατώτερη του 1 μm, όπως επίσης και από το γεγονός ότι η διάρκεια ενός femtosecond παλμού είναι τόσο μικρή ώστε να μην υπάρχει πολύ ευρεία (σε γεωμετρική έκταση) θέρμανση του υλικού, λόγω περιορισμένης (και μερικές φορές αμελητέας) διάχυσης θερμότητας. Στην ανάλυση που γίνεται παίζει

ρόλο και το γεγονός ότι ένας υπερβραχύς παλμός Laser αντιδρά διαφορετικά από έναν παλμό μεγαλύτερης διάρκειας (π.χ. κάποιων ps ή ns), από την άποψη του ότι μπορεί να οδηγήσει στη δημιουργία ενός μικρού spot αποδόμησης γύρω από τη θέση εφαρμογής του πάνω στο υλικό, για ροές ακτινοβολίας που βρίσκονται ελάχιστα πάνω από το κατώφλι.

Εκ των σκοπών της μελέτης των Kim και Na είναι η κατανόηση της θερμικής συμπεριφοράς της κατεργασίας με Laser, λαμβάνοντας υπόψη διάμετρο δέσμης 1 μm, καθώς η θερμική συμπεριφορά σε κατεργασίες σαφώς μικρότερης κλίμακας επηρεάζουν την ποιότητα της αποδομημένης επιφάνειας. Τα λεπτά υμένα που χρησιμοποιούνται είναι κατασκευασμένα από Cr και λειτουργούν ως επικαλύψεις πάνω σε γυάλινα υποστρώματα. Χρησιμοποιήθηκε το εξετασθέν στο Κεφάλαιο 2 *διθερμοκρασιακό μοντέλο* (Two-Temperature Model, TTM) για την υποστήριξη της ανάλυσης και την αξιολόγηση των εξαγόμενων αποτελεσμάτων, σε συνδυασμό με την επαλήθευσή τους με βάση τις διεξαχθείσες πειραματικές παρατηρήσεις.

Παρατηρώντας τη μελέτη [22] εν παραλλήλω με τα όσα έχουν γραφτεί στο Κεφάλαιο 2 για το TTM, μπορούμε να δούμε ότι οι σχέσεις που παρέθεσε ο Sonntag για την περιγραφή του μοντέλου [3] έχουν τη δυνατότητα να χρησιμοποιηθούν και για το σύστημα που προτείνεται στη συγκεκριμένη μελέτη. Οι εξισώσεις που αναφέρονται στη μελέτη [22] σχετίζονται τόσο με τη μεταφορά θερμότητας μέσω σύζευξης ηλεκτρονίου-πλέγματος (Σχέσεις 3.25.[α] και [β]) όσο και με αυτή που λαμβάνει χώρα, μέσω αγωγής, προς το υπόστρωμα:

$$\bullet \left. \begin{aligned} C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(k_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) - G(T_e - T_l) + S(x, t) & (3.25\alpha) \\ C_l \frac{\partial T_l}{\partial t} &= G(T_e - T_l) & (3.25\beta) \end{aligned} \right\}$$

$$\bullet C_g \frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_g \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) \quad (3.26)$$

Όπου:

- C η ογκομετρική θερμοχωρητικότητα,
- k η θερμική αγωγιμότητα των ηλεκτρονίων,
- T η θερμοκρασία,
- G η σταθερά σύζευξης ηλεκτρονίου-πλέγματος,
- S η πηγή θερμότητας Laser,
- e , l και g δείκτες που αντίστοιχα αντιπροσωπεύουν το ηλεκτρόνιο (electron), το κρυσταλλικό πλέγμα (lattice) και το γυαλί (glass).

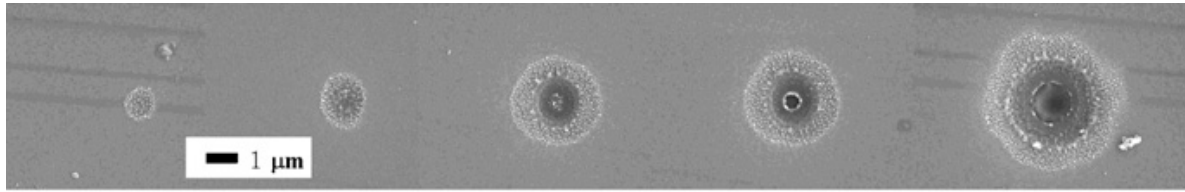
Η εξίσωση που μπορεί να μοντελοποιήσει την πηγή θερμότητας του Laser, S , είναι η εξής:

$$S = 0.94 \frac{1-R}{t_p \delta} J \exp \left(-\frac{x}{\delta} - 4 \ln 2 \left(\frac{t}{t_p} \right)^2 \right) \quad (3.27)$$

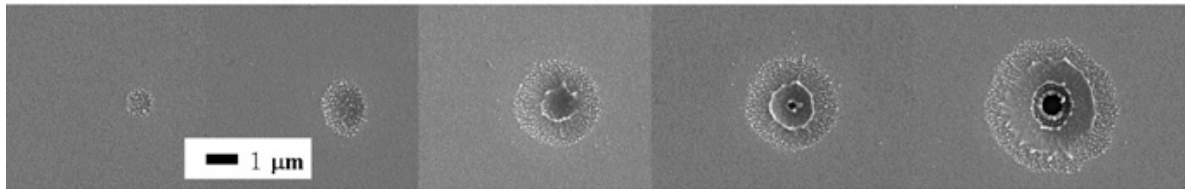
Στην παραπάνω σχέση:

- R είναι η ανακλαστικότητα του υλικού,
- t_p η διάρκεια του παλμού (Full Width at Half Maximum – FWHM),
- δ το βάθος θερμικής διείσδυσης, συμπεριλαμβανομένου και του βαλλιστικού εύρους,
- J η ενέργεια της προσπίπτουσας ακτινοβολίας.

Τα βασικά χαρακτηριστικά του Laser που χρησιμοποιήθηκαν στην πειραματική διαδικασία είναι τα εξής: διάρκεια παλμού 220 fs (FWHM), γραμμική πόλωση, μέση ισχύς 500 mW, ρυθμός επανάληψης (repetition rate) 100 kHz και μήκος κύματος 800 nm, όντας αποδεδειγμένα δηλαδή στην υπεριώδη περιοχή. Η εναπόθεση του υμενίου από Cr έγινε πάνω σε ένα γυάλινο υπόστρωμα, με σκοπό το υμένιο να λάβει τιμή πάχους μεταξύ 200 και 500 nm, ενώ η μέτρηση της διαμέτρου των ζωνών φωτοαποδόμησης, τήγματος και ακτινοβόλησης γενικά, έγινε με χρήση ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης (Scanning Electron Microscope – SEM). Τα αποτελέσματα της ακτινοβόλησης πέντε διαφορετικών Spots ανά υμένιο διαφορετικού πάχους, για ενέργειες που κυμαίνονται μεταξύ 3, 11, 47, 64 και 250 nJ (από τα αριστερά προς τα δεξιά), παρουσιάζονται παρακάτω, στο Σχήμα 3.24.. Το βασικό συμπέρασμα που προκύπτει μέσα από αυτό το Σχήμα έχει να κάνει με την εμφάνιση επιφανειακών σταγονιδίων και στις δύο περιπτώσεις, με την πρώτη (δηλαδή για πάχος 200 nm) να εμφανίζει και το φαινόμενο της υδροδυναμικής ροής. Ο υπολογισμός του βάθους θερμικής διείσδυσης έδωσε μία τιμή 320 nm για το υπόψη μέγεθος, κάνοντας τη διάδοση θερμότητας με αγωγή στο πρώτο υμένιο να εμποδίζεται από το γυάλινο υπόστρωμα. Επίσης, το πείραμα και η υπολογιστική προσομοίωση εμφανίζουν ιδιαίτερα υψηλές διαφοροποιήσεις ως προς την ελάχιστη ενέργεια για την οποία αρχίζει η επιφανειακή μορφολογία να αλλοιώνεται (47 nJ ή 4.02 J/cm² για την προσομοίωση, 11 nJ ή 0.94 J/cm² για το πείραμα). Κάτι τέτοιο μπορεί να μας δείξει ότι ακόμα και οι μελέτες του φαινομένου της φωτοαποδόμησης που έχουν διεξαχθεί από έμπειρους επαγγελματίες του χώρου μπορούν παρ'όλα αυτά να παρουσιάζουν σημαντική ασυνάφεια, όσον αφορά τη σύγκριση των πειραματικών αποτελεσμάτων με τα υπολογιστικά.



(a)



(b)

Σχήμα 3.24. Αποτελέσματα από την ακτινοβολήση με έναν παλμό Laser διάρκειας 220 fs και επίπεδα ενέργειας μεταξύ 3, 11, 47, 64 και 250 nJ από αριστερά προς τα δεξιά, όπου το πάχος των υμενίων είναι ίσο με (a) 200 nm και (b) 500 nm.

Ένα ακόμα σημαντικό αποτέλεσμα που εξήχθη έχει να κάνει με τη δημιουργία σχηματισμών μορφής δακτυλίου στο υμένιο (b), όταν αυτό έχει ακτινοβοληθεί με υψηλό ποσό ενέργειας. Ο σχηματισμός ενδεχομένως να έχει προέλθει από το μοτίβο περίθλασης Fraunhofer που προκλήθηκε από τον αντικειμενικό φακό εστίασης της δέσμης Laser. Το παραπάνω φαινόμενο δεν εμφανίστηκε στο υμένιο μικρότερου πάχους, λόγω της αύξησης της θερμικής διάχυσης στην πλευρική διεύθυνση, λόγω παρεμπόδισης της θερμικής ενέργειας κατά μήκος της διεύθυνσης της δέσμης. Διαπιστώθηκε επίσης ότι, για υψηλά ποσά ενέργειας, τα οποία έχουν τη δυνατότητα να αποδομήσουν σωματίδια που ανήκουν τόσο στο C₁ όσο και στο γυαλί, δεν εμφανίζεται κάποιο δείγμα «σπασίματος» του υλικού λόγω θερμικής φόρτισης, ακόμα και αν το «σπάσιμο» είναι χαρακτηριστικό της αποδόμησης υάλου και εμφανίζεται σε διδιάστατη έκταση ίση με τουλάχιστον μερικές εκατοντάδες τετραγωνικών μm.

Η ίδια μελέτη κατέδειξε ότι τα αποτελέσματα που ελήφθησαν μέσω της εφαρμογής αριθμητικής προσομοίωσης πάνω σε νοητούς όγκους, οι οποίοι ακτινοβολήθηκαν με δέσμη Laser χωρικής κατανομής Gauss, δε συμφωνούν με τα πειραματικά δεδομένα. Από την άλλη, μέσω λογαριθμικής στάθμισης όλων των τιμών της εξωτερικής διαμέτρου της φωτοαποδομημένης περιοχής, οι συντάκτες της μελέτης κατάφεραν να πετύχουν σύμπτωση με τα πειραματικά δεδομένα. Το κατώφλι ενέργειας Laser προσδιορίστηκε, μετά το πέρας των μελετών, στο 1.6 nJ, ενώ τρεις σημαντικές προτάσεις για περαιτέρω μελέτη του δεδομένου περιλαμβάνουν τη χρήση πολλαπλών παλμών αντί ενός, την αλλαγή της πολικότητας κατά τη διάρκεια της κατεργασίας και τη ρύθμιση της ενέργειας του Laser κατά τέτοιον τρόπο ώστε να είναι ελάχιστα μεγαλύτερη από την τιμή του κατωφλίου.

4. ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΦΩΤΟΑΠΟΔΟΜΗΣΗΣ ΜΕ LASER

4.1. Εισαγωγικά στοιχεία

Όπως θα δούμε στο Κεφάλαιο 5, προκειμένου για την προσομοίωση της διεργασίας φωτοαποδόμησης με nanosecond Laser, θα χρησιμοποιήσουμε μία γλώσσα προγραμματισμού σε Η/Υ (και πιο συγκεκριμένα τη *MATLAB*) στην οποία θα αναπτυχθεί ένας κώδικας που μπορεί να περιγράψει και να αναλύσει επαρκώς το υπόψη φαινόμενο. Η ανάπτυξη ενός μοντέλου MD για την περιγραφή της υπόψη διεργασίας είναι – εν γένει – μία πολύπλοκη διαδικασία, στα πλαίσια της οποίας είναι αναγκαία η ανάλυση πολλών διαφορετικών φαινομένων, το καθένα από τα οποία θα μελετηθεί ξεχωριστά επί του παρόντος.

Για τη μοντελοποίηση της φωτοαποδόμησης με Laser, μέσω της Μοριακής Δυναμικής Ανάλυσης, το πρώτο βήμα που πρέπει να ακολουθήσουμε είναι η μοντελοποίηση των αρχικών συνθηκών του υλικού. Πιο συγκεκριμένα, θα πρέπει να περιγραφούν τόσο η θέση του κάθε ατόμου όσο και οι θέσεις στις οποίες δύο γειτονικά άτομα αλληλεπιδρούν μεταξύ τους, ενώ επίσης θα πρέπει να υπολογιστούν οι ενέργειες των ατόμων και να καθοριστούν οι συνοριακές συνθήκες που συνοδεύουν το πρόβλημα. Έπειτα, θα πρέπει να προσομοιωθούν τα στάδια που λαμβάνουν χώρα μέχρι το υλικό να φτάσει σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας, κάτω από θερμοκρασία, πίεση και υγρασία περιβάλλοντος.

Η μοντελοποίηση της ακτινοβολίας του Laser έγινε κατά κύριο λόγο με βάση την *ενέργειά* του. Πιο συγκεκριμένα, η διαδικασία μοντελοποίησης της ακτινοβολίας διαχωρίστηκε σε *χρονική προτυποποίηση* και σε *χωρική προτυποποίηση*, από τις οποίες η τελευταία υπέστη περαιτέρω διαχωρισμό σε *επίπεδα*. Οι επιπτώσεις αυτής της προτυποποίησης μεταφέρθηκαν σε μοριακό επίπεδο, δηλαδή στον υπολογισμό του παραγόμενου αριθμού φωτονίων, με σκοπό να γίνει εντέλει εφικτή η επίδραση στο μοριακό μοντέλο του υλικού.

Η φόρτιση των σωματιδίων του υλικού, η οποία έπεται της μοντελοποίησης της ακτινοβολίας Laser, προσομοιώνεται με βάση τη θεώρηση ότι τα σωματίδια του υλικού απορροφούν την ενέργεια των

φωτονίων που περιλαμβάνονται στη δέσμη Laser, με αποτέλεσμα η ολική ενέργεια του συστήματος των σωματιδίων να αυξάνεται. Οι αρχές της μεθόδου Μοριακής Δυναμικής είναι σημαντικό να εφαρμοστούν για την αναπαράσταση τόσο της συμπεριφοράς των σωματιδίων μετά τη φόρτισή τους, όσο και της διαδικασίας απομάκρυνσής τους από τον κρύσταλλο στην αρχική του μορφή (πριν τη φωτοαποδόμηση). Τέλος, αναφέρουμε ότι το μοντέλο που πρόκειται να αναπτυχθεί βασίζεται στη μαθηματική και γεωμετρική ανάλυση ενός γενικευμένου μοριακού συστήματος υλικού-δέσμης Laser.

Οι επόμενες Υποενότητες του παρόντος Κεφαλαίου παρουσιάζουν, βήμα-βήμα, τα στάδια πάνω στα οποία θα στηριχθεί η διαδικασία προσομοίωσης ολόκληρου του φαινομένου, ώστε να γίνει στη συνέχεια εφικτή η πλήρης ανάπτυξη του κώδικα Μοριακής Δυναμικής στην επιθυμητή γλώσσα προγραμματισμού.

4.2. Αδιαστατοποίηση παραμέτρων και κατάστροψη αδιάστατων εξισώσεων

Σε ένα πολύ μεγάλο πλήθος προσομοιώσεων Μοριακής Δυναμικής (MD), είναι πάρα πολύ σημαντικό να χρησιμοποιηθούν οι απαραίτητες εξισώσεις στην *αδιαστατοποιημένη* τους μορφή (non-dimensionalized form). Ο βασικός λόγος για τον οποίο επιλέγεται η αδιαστατοποίηση τόσο των παραμέτρων που υπεισέρχονται στην MD ανάλυση, όσο και των εξισώσεων που θα χρησιμοποιηθούν, είναι ότι υπάρχουν πολλές μονάδες σε διαφορετικά συστήματα μονάδων. Παραδείγματος χάρη, κατά τη διάρκεια της ανάλυσης, διαπιστώνεται ότι αρκετές από τις μονάδες εκφράζονται στο Διεθνές Σύστημα Μονάδων (SI), όπως είναι το *μέτρο* (m) και το *Joule* (J) για το μήκος και την ενέργεια αντίστοιχα, ενώ αντίθετα, σε ατομικό επίπεδο, οι αντίστοιχα χρησιμοποιούμενες μονάδες μέτρησης είναι το *Angstrom* (\AA) και το eV . Επίσης, πολλές από τις αριθμητικές τιμές που χρησιμοποιούνται στα πλαίσια της ανάλυσης είναι πολύ μικρές, με αποτέλεσμα η διαφοροποίησή τους κατά μία τιμή που, υπό άλλες συνθήκες θα θεωρούνταν ανεπαίσθητη, να συντελέσει ακόμα και σε προβλήματα υπολογιστικής ακρίβειας. Κατά συνέπεια, δύο λόγοι υπαγορεύουν την ανάγκη αδιαστατοποίησης των μονάδων:

- Η αποφυγή σύγχυσης μεταξύ των μονάδων που ανήκουν σε διαφορετικά συστήματα μονάδων.
- Η ανάγκη να βρίσκονται όλες οι αριθμητικές τιμές εντός μίας περιοχής που δε θα μπορούσε να οδηγήσει σε υπολογιστικά προβλήματα ακρίβειας.

Είναι επίσης σημαντικό να αναφέρουμε ότι η αδιαστατοποίηση όλων των μεγεθών που περιλαμβάνονται στην ανάλυση μπορεί να τη διευκολύνει σημαντικά, καθώς πλέον δεν υπάρχει ανάγκη για μετατροπές μονάδων όσον αφορά τα διάφορα μεγέθη και συστήματα, μία διαδικασία η οποία θα ήταν πολύ πιθανό να οδηγήσει σε αριθμητικά και υπολογιστικά λάθη.

Η αδιαστατοποίηση θα πραγματοποιηθεί κατά βάση σε επτά (7) *βασικά* μεγέθη, τα οποία είναι το *μήκος*, ο *χρόνος*, η *μάζα*, η *ενέργεια*, η *ταχύτητα* και η *θερμοκρασία*. Τα υπόλοιπα μεγέθη που θα

υπαισέθουν στην MD ανάλυση είναι παράγωγα των 7 προαναφερθέντων, και οι αδιάστατες μορφές αυτών μπορούν να προκύψουν από τις αντίστοιχες εξισώσεις, τις οποίες θα περιγράψουμε στη συνέχεια. Η διαδικασία αδιαστατοποίησης θα πρέπει να ακολουθηθεί λαμβάνοντας υπόψη τις παρακάτω παρατηρήσεις:

- Η αδιαστατοποίηση των βασικών μεγεθών της MD ανάλυσης πραγματοποιείται μέσω της διαίρεσης της αρχικής μορφής των μεγεθών αυτών είτε με άλλα βασικά και συχνά απαντώμενα μεγέθη, είτε με πραγματικές σταθερές. Αρχίζοντας από την περίπτωση του μήκους, για να προκύψει ένα αδιαστατοποιημένο μέγεθος μήκους θα πρέπει το αρχικό, διαστατό μέγεθος να διαιρεθεί με ένα άλλο, ευρέως χρησιμοποιούμενο μέγεθος μήκους, στην ίδια μονάδα μέτρησης με το αρχικό. Για την περίπτωση που εξετάζουμε επί του παρόντος, θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί το ένα από τα δύο μεγέθη *απόσταση αποκοπής* (cutoff radius / distance) r_c ή *απόσταση ισορροπίας* (equilibrium radius / distance) r_0 , μεταξύ δύο ατόμων. Η απόσταση αποκοπής αφορά την ελάχιστη τιμή απόστασης μεταξύ δύο γειτονικών ατόμων για την οποία οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης θεωρούνται μηδενικές (καθ'ότι αμελητέες σε μια τέτοια περίπτωση). Η απόσταση ισορροπίας εκφράζει, μεταξύ άλλων, και τη θέση ελάχιστης δυναμικής ενέργειας μεταξύ δύο ατόμων. Ως πιο κατάλληλη για την πραγματοποίηση της παρούσας ανάλυσης μας θα χρησιμοποιηθεί η *απόσταση ισορροπίας*.
- Η αδιαστατοποίηση της μάζας θα γίνει με βάση τη μάζα (έστω m) ενός από τα άτομα που χρησιμοποιούνται κατά κύριο λόγο σε αναλύσεις MD και γενικότερα σε πειράματα και προσομοιώσεις φωτοαποδόμησης με Laser. Θα επιλέξουμε το άτομο του *μολυβδαινίου* (Mo), ένα δοκίμιο του οποίου θα χρησιμοποιηθεί και στα πλαίσια της πειραματικής διαδικασίας, στο Κεφάλαιο 6. Για την παρούσα προσομοίωση, θα χρησιμοποιήσουμε κατά κύριο λόγο είτε τη μάζα ενός μεμονωμένου ατόμου Cu είτε το άθροισμα των μαζών των ατόμων Cu που περιλαμβάνονται στην υπολογιστική κυψελίδα αναφοράς. Ένα μεγάλο μέρος εξισώσεων απλοποιούνται μέσω της εφαρμογής αυτής της αδιαστατοποίησης.
- Η ενέργεια θα πρέπει να αδιαστατοποιηθεί με την παράμετρο ενέργειας του δυναμικού Morse (συμβολίζεται με D), η οποία εκφράζεται σε μονάδες μέτρησης eV (όπου $1 eV = 1.602176 \times 10^{-19} J$).
- Σε ατομικό επίπεδο, η θερμοκρασία υπολογίζεται ως το άθροισμα των κινητικών ενεργειών των ατόμων του συστήματος, διαιρεμένο με τη σταθερά Boltzmann. Κατά συνέπεια, η αδιαστατοποίηση της θερμοκρασίας θα πρέπει να γίνει σε δύο στάδια, όπου στο πρώτο θα γίνει διαίρεσή της με την παράμετρο ενέργειας του δυναμικού Morse (επειδή στον υπολογισμό της θερμοκρασίας υπεισέρχεται και η κινητική ενέργεια), ενώ στο δεύτερο θα γίνει πολλαπλασιασμός με τη σταθερά του Boltzmann.

- Όσον αφορά τις υπόλοιπες βασικές παραμέτρους που υπεισέρχονται στην MD ανάλυση, δεν υπάρχει η ανάγκη εισαγωγής νέων μεγεθών προκειμένου να αδιαστατοποιηθούν, καθώς τα προαναφερθέντα μεγέθη αναφοράς μπορούν να χρησιμοποιηθούν αποτελεσματικά.

Ο παρακάτω Πίνακας 4.1. παριστάνει τις εξισώσεις αδιαστατοποίησης των μεγεθών που θα χρησιμοποιηθούν στα πλαίσια της MD ανάλυσης, με βάση τις παρατηρήσεις που έχουν γίνει παραπάνω:

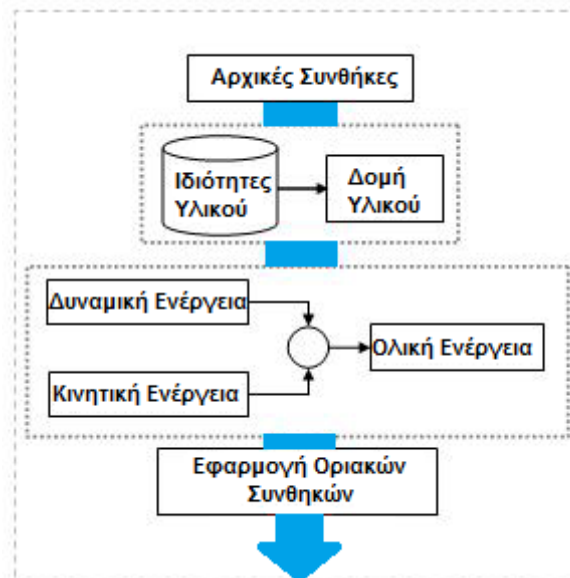
Παράμετρος	Έκφραση Αδιαστατοποίησης
Μήκος	$r^* = \frac{r}{r_0}$
Χρόνος	$t^* = \frac{t}{\left(r_0 \sqrt{\frac{m}{D}} \right)}$
Μάζα	$m^* = \frac{m}{m_{Cu}}$ (1 για $m = m_{Cu}$)
Ενέργεια	$E^* = \frac{E}{D}$
Δύναμη	$F^* = \frac{F}{D/r_0}$
Ταχύτητα	$v^* = \frac{v}{\sqrt{D}/m}$
Θερμοκρασία	$T^* = \frac{T}{D/k_B}$

Πίνακας 4.1. Οι εξισώσεις αδιαστατοποίησης των βασικών μεγεθών που θα χρησιμοποιηθούν στην MD ανάλυση.

4.3. Καθορισμός των αρχικών συνθηκών

Η έναρξη της MD ανάλυσης, με σκοπό τη δημιουργία μιας Μοριακής Δυναμικής προσομοίωσης, γίνεται με τον καθορισμό των αρχικών συνθηκών, δηλαδή της αρχικής κατάστασης που περιγράφει το μοντέλο [113][114][152]. Όλες οι μοριακές προσομοιώσεις, άρα και αυτή που διεξάγεται επί του

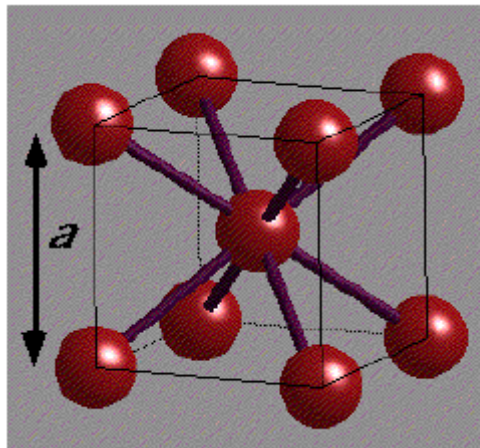
παρόντος, στηρίζονται στην προσομοίωση του υπό μελέτη υλικού. Αρχικά είναι σημαντικό να περιγραφεί η ατομική δομή του κάθε υλικού, η οποία ουσιαστικά αντικατοπτρίζει τις θέσεις του κάθε ατόμου σε μία αρχική χρονική στιγμή $t = 0$. Στη συνέχεια, θα πρέπει να περιγράψουμε την αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων που βρίσκονται μέσα σε έναν καθορισμένο όγκο προσομοίωσης. Αυτή η αλληλεπίδραση είναι ουσιαστικά η δυναμική ενέργεια των ατόμων, για την προσομοίωση της οποίας θα γίνει χρήση η συνάρτηση δυναμικού του Morse (Morse Potential Function – MPF), για την οποία έχει ήδη γίνει λόγος στο Κεφάλαιο 3. Η συνάρτηση αυτή εξαρτάται από τις ήδη ορισμένες θέσεις (συντεταγμένες) των ατόμων. Έπειτα, υπολογίζεται η κινητική ενέργεια του κάθε ατόμου, ως το ημιγινόμενο της μάζας του καθενός επί το τετράγωνο της ταχύτητάς του, όπως δηλαδή ορίζεται από την κλασική εξίσωση της μηχανικής. Στην αρχική κατάσταση, πριν δηλαδή έρθει ο πρώτος παλμός Laser σε επαφή με το δοκίμιο, οι ταχύτητες των ατόμων θεωρούνται μηδενικές, με αποτέλεσμα να συμβαίνει το ίδιο και με την κινητική ενέργεια. Η ολική ενέργεια του κάθε ατόμου υπολογίζεται, προφανώς, αθροίζοντας τη δυναμική του ενέργεια με την κινητική του, για κάθε δεδομένη χρονική στιγμή. Τέλος, η εξασφάλιση του γεγονότος ότι το υπό προσομοίωση υλικό είναι στην κατάσταση που απαιτείται (δηλαδή στη στερεά, επί του παρόντος), απαιτεί τον καθορισμό των συνοριακών συνθηκών. Κατά συνέπεια, απαιτούνται συνολικά πέντε (5) στοιχεία προκειμένου να περιγραφούν οι αρχικές συνθήκες του προβλήματος: η ατομική δομή του υλικού, η κινητική ενέργεια, η δυναμική ενέργεια, η ολική ενέργεια και οι συνοριακές συνθήκες. Η διασύνδεση μεταξύ αυτών των στοιχείων, καθώς επίσης και το λογικό διάγραμμα εφαρμογής κάθε μία από τις απαιτούμενες επιμέρους διαδικασίες, εμφανίζεται στο παρακάτω Σχήμα 4.1.:



Σχήμα 4.1. Λογικό διάγραμμα διασύνδεσης των συνιστούντων μεγεθών των αρχικών συνθηκών της MD προσομοίωσης.

4.3.1. Ατομική δομή υλικού

Ξεκινώντας την MD ανάλυση του υπόψη προβλήματος, αρχικά τοποθετούμε όλα τα άτομα σε συγκεκριμένες θέσεις, με σκοπό η ατομική δομή του υπό εξέταση υλικού να ικανοποιείται πλήρως. Το χρησιμοποιούμενο σύστημα συντεταγμένων είναι *ορθοκανονικό* και *δεξιόστροφο*, με την αρχή των αξόνων και την άνω επιφάνεια του υλικού να ταυτίζονται. Χαρακτηριστικό παράδειγμα ορισμού του ορθοκανονικού συστήματος συντεταγμένων εμφανίζεται στο παρακάτω Σχήμα 4.2., στην περίπτωση ενός *bcc* (κυβικού χωροκεντρωμένου) κρυστάλλου μολυβδαινίου (Mo), το οποίο χρησιμοποιείται εδώ ως υλικό αναφοράς για αδιαστατοποίηση της μάζας:



Σχήμα 4.2. Κρύσταλλος *bcc* με ενσωματωμένο ορθοκανονικό σύστημα συντεταγμένων x, y, z . Η ακμή του κρυστάλλου είναι a .

Προκειμένου να διατυπωθεί η επιθυμητή *bcc* δομή, τοποθετούμε οκτώ άτομα σε κάθε κρυσταλλικό κύτταρο, με τοπικές συντεταγμένες $(0,0,0)$, $(a,0,0)$, $(a,a,0)$, $(a,0,a)$, $(0,0,a)$, $(a,0,a)$, (a,a,a) και $(0,0,a)$, που αντιστοιχούν στις οκτώ κορυφές του κύβου (ακμή a), ενώ επίσης τοποθετούμε άλλο ένα άτομο στο κέντρο του κυττάρου. Κατά τα γνωστά από τη θεωρία της Φυσικής και Χημείας Στερεάς Κατάστασης, η ακμή του κύβου a και η ατομική ακτίνα r_a συνδέονται μεταξύ τους με τη βοήθεια της παρακάτω σχέσης:

$$a_c = \frac{4r_a}{\sqrt{3}} \quad (4.1)$$

Επίσης, θεωρώντας ότι το τεμάχιο που θα ακτινοβοληθεί με το Laser είναι *ορθογωνικό*, είναι σημαντικό να έχουμε στο νου μας ότι τα γειτονικά άτομα Mo απέχουν μεταξύ τους απόσταση 1.36 \AA [E3], πράγμα που μπορεί να μας είναι πολύ χρήσιμο στη μετέπειτα ανάλυσή μας.

4.3.2. Δυναμική ενέργεια

Στην περίπτωση των μετάλλων, τα οποία εξετάζουμε επί του παρόντος, τα ηλεκτρόνια μοιράζονται μεταξύ όλων των ατόμων. Το μέγεθος της *ενέργειας συνοχής* (binding energy) μεταξύ των ατόμων καθορίζεται από την ισορροπία μεταξύ της αρνητικής ενέργειας Coulomb (λόγω αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρονίων και θετικά φορτισμένων ιόντων / *κατιόντων*) και της θετικής κινητικής ενέργειας του ηλεκτρονιακού νέφους Fermi. Στις διάφορες προσομοιώσεις, άρα και στην παρούσα περίπτωση, η δυναμική ενέργεια προκύπτει από συναρτήσεις δυναμικού, οι οποίες χωρίζονται στις εξής δύο κατηγορίες:

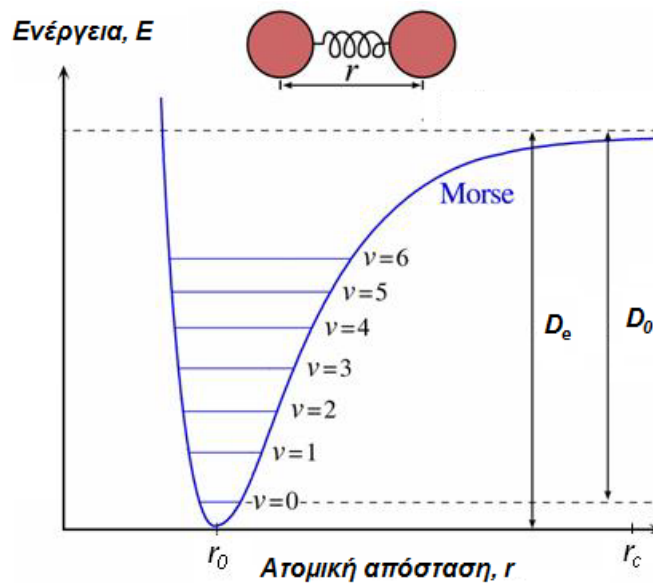
- **Δυναμικό Πολλών Σωμάτων (Many Body Potential - MBP)**. Σε αυτή την περίπτωση, απαιτείται η γνώση των αποστάσεων μεταξύ τουλάχιστον τριών ατόμων. Στην περίπτωση των τριών ατόμων, προκύπτουν οι αντίστοιχες συναρτήσεις δυναμικού τριών ατόμων (*Three Body Term Potential Functions*). Η αύξηση του αριθμού ατόμων που περιλαμβάνονται στη συγκεκριμένη συνάρτηση δυναμικού βελτιώνει την ακρίβεια των αποτελεσμάτων, αλλά αυξάνει την πολυπλοκότητα και το χρόνο υπολογισμού τους.
- **Δυναμικό Ζεύγους Σωμάτων (Pair Body Potential - PBP)**. Οι συναρτήσεις που βασίζονται σε αυτή την προσέγγιση απαιτούν τη χρήση μόνο ενός ζεύγους ατόμων για τον υπολογισμό της δυναμικής ενέργειας του κάθε ατόμου. Η ακρίβεια που εξασφαλίζεται μέσω της υλοποίησης αυτής της μεθόδου είναι χαμηλότερη συγκριτικά με την πρώτη περίπτωση, όμως έχει ως πλεονέκτημα το συντομότερο υπολογισμό της δυναμικής ενέργειας του ατόμου.

Η προσέγγιση PBP χρησιμοποιείται για την περιγραφή των περισσότερων αλληλεπιδρώντων δυναμικών που χρησιμοποιούνται στη Μοριακή Δυναμική. Πέραν του πλεονεκτήματος της λιγότερο χρονοβόρας υπολογιστικής επίλυσης σε σχέση με την προσέγγιση MBP, η PBP παρέχει μια σαφή περιγραφή των ιδιοτήτων του υπό εξέταση υλικού. Βέβαια, ορισμένες εκφράσεις δυναμικών, οι οποίες έχουν προκύψει με φαινομενολογικό τρόπο, παρέχουν συνήθως μια πιο ρεαλιστική εικόνα των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των διαφόρων ατόμων. Παραδείγματα τέτοιων εκφράσεων είναι τα δυναμικά *Buckingham*, *Morse* (Morse Potential Function / MPF), *Lennard-Jones* (Mie's Reduced Form) και *Barker*, για τα ευγενή στοιχεία *κρυπτό* (Kr) και *ξένο* (Xe). Όπως τονίζεται από το Rieth στη βιβλιογραφία

[130], η καταλληλότερη έκφραση δυναμικού για την περίπτωση των μετάλλων είναι η *MPF*, η γενική μορφή της οποίας δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\varphi(r_{ij}) = D \left[e^{-2a(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-a(r_{ij}-r_0)} \right] \quad (4.2)$$

όπου r_{ij} η απόσταση μεταξύ των δύο ατόμων, r_0 η απόσταση *ισορροπίας* μεταξύ δύο ατόμων, D η ενέργεια διάστασης, η οποία είναι η ελάχιστη ενέργεια που πρέπει να αποκτήσει ένα άτομο προκειμένου να σπάσει ο δεσμός μεταξύ του ατόμου αυτού και του άλλου, και a μία πραγματική σταθερά που καλείται *σταθερά διάσπασης*.



Σχήμα 4.3. Σχηματική αναπαράσταση των ενεργειακών επιπέδων v , σύμφωνα με την έκφραση δυναμικού κατά Morse.

Με τη βοήθεια της έκφρασης δυναμικού κατά Morse, μπορούμε να απεικονίσουμε σχηματικά τα επίπεδα ενέργειας δυναμικού, όπως φαίνεται και στο παραπάνω Σχήμα 4.3.. Πιο συγκεκριμένα, παρατηρούμε ότι η διαφορά των επιπέδων ενέργειας δυναμικού (v) ελαττώνεται όσο η ενέργεια πλησιάζει το όριο ενέργειας διάστασης. Η τιμή της ενέργειας διάστασης D είναι μεγαλύτερη από την πραγματική ενέργεια D_0 που απαιτείται για τον αποχωρισμό των δύο ατόμων, λόγω του μηδενικού σημείου ενέργειας του κατώτατου επιπέδου ταλάντωσης ($v = 0$).

Προκειμένου να υπολογιστεί η δυναμική ενέργεια, θα χρησιμοποιηθεί η συνεπτυγμένη / περικεκομμένη (*truncated*) μορφή της έκφρασης MPF. Πρόκειται ουσιαστικά για μια δίκλαδη συνάρτηση, της οποίας το πρώτο μέρος είναι η κλασική MPF, ενώ το δεύτερο είναι ίσο με μηδέν (0). Όταν η απόσταση r_{ij} μεταξύ δύο ατόμων είναι μεγαλύτερη από μία προκαθορισμένη απόσταση (συνήθως την *απόσταση αποκοπής*, r_c), η αλληλεπίδραση των ατόμων αυτών θεωρείται αμελητέα και επομένως η

δυναμική ενέργεια είναι επίσης αμελητέα (τείνει στο μηδέν), άρα δεν έχει νόημα ο υπολογισμός της δυναμικής ενέργειας, η οποία σε μια τέτοια περίπτωση λαμβάνεται ίση με μηδέν (0). Σε αντίθετη περίπτωση (δηλαδή $r_{ij} < r_c$), η δυναμική ενέργεια θα υπολογιστεί μέσω της κλασικής έκφρασης MPF. Κατά συνέπεια, η *truncated MPF* συνάρτηση μειώνει την πολυπλοκότητα και τη χρονική διάρκεια της υπολογιστικής επίλυσης, χωρίς όμως να μειώνει την ακρίβεια των αποτελεσμάτων που εξάγονται, με αποτέλεσμα να θεωρείται μία πολύ αποτελεσματική και ευρέως διαδεδομένη συνάρτηση.

Επομένως, σε συνεπτυγμένη μορφή, η *truncated MPF* συνάρτηση για τη δυναμική ενέργεια δύο ατόμων, $P(r_{ij})$, λαμβάνει την ακόλουθη μορφή:

$$P(r_{ij}) = \begin{cases} D \left[e^{-2a(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-a(r_{ij}-r_0)} \right], & r_{ij} < r_c \\ 0 & , r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (4.3)$$

Βέβαια, ένα κρυσταλλικό πλέγμα προφανώς και απαρτίζεται από περισσότερα των δύο άτομα, με αποτέλεσμα η ανάγκη για υπολογισμό της δυναμικής ενέργειας να μην ικανοποιείται επαρκώς εφαρμόζοντας την παραπάνω σχέση. Σε ένα άτομο, η ολική δυναμική ενέργεια δίνεται από το άθροισμα των δυναμικών ενεργειών με όλα τα άτομα με τα οποία αλληλεπιδρά. Όπως και στην προηγούμενη περίπτωση, η ανάγκη για μείωση του υπολογιστικού φόρτου χωρίς να μειώνεται η υπολογιστική ακρίβεια, μας οδήγησε στην ακόλουθη δίκλαδη σχέση, η οποία αποτελεί την τροποποιημένη μορφή της (4.3) λαμβάνοντας υπόψη την ύπαρξη περισσότερων των δύο ατόμων μέσα στο σύστημα αλληλεπίδρασης:

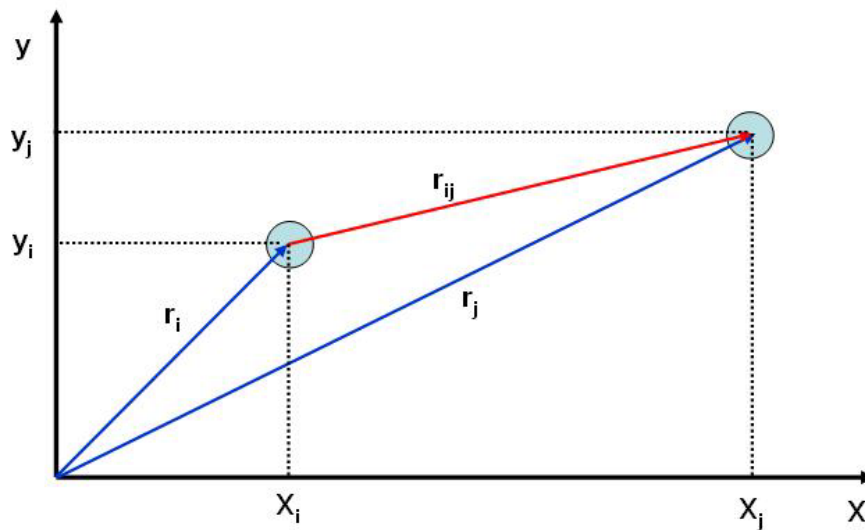
$$P(r_{ij}) = \begin{cases} D \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[e^{-2a(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-a(r_{ij}-r_0)} \right], & r_{ij} < r_c \\ 0 & , r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (4.4)$$

Αν x , y και z οι συντεταγμένες των ατόμων στον 3-διάστατο χώρο, η απόσταση r_{ij} μεταξύ του i -οστού και του j -οστού ατόμου δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2} \quad (4.5)$$

Στην περίπτωση της αλληλεπίδρασης μεταξύ ατόμων Mo, το οποίο χρησιμοποιείται ως αναφορά στην παρούσα φάση, ισχύουν τα εξής [153][161]:

- $D = 0.8032 \text{ eV}$,
- $a = 1.5079 \text{ \AA}^{-1}$,
- $r_0 = 2.976 \text{ \AA}$.



Σχήμα 4.4. Σχηματική αναπαράσταση των διανυσμάτων θέσης για δύο άτομα σε αλληλεπίδραση, στο 2-διάστατο σύστημα αξόνων (x,y) .

Τελικά, η δυναμική ενέργεια του συστήματος μπορεί να υπολογιστεί μέσω της συνδυασμένης χρήσης των 6 παρακάτω εξισώσεων:

$$P_i^* = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\exp \left[-2 \left(r_{ij}^* - r_0^* \right) \right] - 2 \exp \left[- \left(r_{ij}^* - r_0^* \right) \right] \right] \quad (4.6)$$

$$P_i^* = \frac{P_i}{D} \quad (4.7)$$

$$r_{ij}^* = r_{ij} \cdot a \quad (4.8)$$

$$r_0^* = r_0 \cdot a \quad (4.9)$$

$$r_{ij}^* = \sqrt{\left(x_i^* - x_j^* \right)^2 + \left(y_i^* - y_j^* \right)^2 + \left(z_i^* - z_j^* \right)^2} \quad (4.10)$$

$$x_i^* = x_i \cdot a \quad (4.11)$$

με σχέσεις ανάλογες της (4.11) να ισχύουν για τα x_j, y_i, y_j, z_i και z_j .

4.3.3. Κινητική ενέργεια

Η κινητική ενέργεια δίνεται, για κάθε ξεχωριστό άτομο i , μέσω της βασικής μορφής της:

$$K_i = \frac{1}{2} m_i \mathbf{v}_i^2 = \frac{1}{2} m_i \left(v_{ix} + v_{iy} + v_{iz} \right) \quad (4.12)$$

Όπου:

- m_i η ατομική μάζα,
- v_{ix} , v_{iy} και v_{iz} οι συνιστώσες του διανύσματος της ταχύτητας για το άτομο i , στους άξονες x , y και z αντίστοιχα.

Με δεδομένη την ατομική μάζα του ατόμου του μολυβδαινίου, $m_{Mo} = 95.94 amu$, αλλά και με την παραδοχή ότι το μέταλλο στο οποίο θα επέλθει φωτοαποδόμηση είναι καθαρό (χωρίς προσμίξεις με άλλα είδη ατόμων), θα ισχύει $m_i = m$ για κάθε άτομο i . Κατά συνέπεια, η παραπάνω σχέση μετασχηματίζεται στην ακόλουθη μορφή:

$$K = \frac{1}{2} m \mathbf{v}_i^2 = \frac{1}{2} m (v_{ix}^2 + v_{iy}^2 + v_{iz}^2) \quad (4.13)$$

Στην αρχική κατάσταση, την οποία θεωρούμε αυτή που αρχίζει με την τοποθέτηση των ατόμων στο κρυσταλλικό πλέγμα, η ταχύτητα του κάθε ατόμου θεωρείται μηδενική. Κατά συνέπεια, η αρχική κινητική ενέργεια των σωματιδίων είναι επίσης μηδενική.

Επιλέγοντας, μεταξύ των εξισώσεων (4.6) έως (4.11), τις απαραίτητες εξισώσεις αδιαστατοποίησης, προκύπτει εντέλει η αδιαστατοποιημένη μορφή της κινητικής ενέργειας για κάθε άτομο i :

$$K_i^* = \frac{1}{2} m_i^* v_i^{*2} \quad (4.14)$$

Αντίστοιχα, η έκφραση της ταχύτητας είναι η εξής:

$$v_i^* = v_i \sqrt{\frac{m}{D}} \quad (4.15)$$

με αποτέλεσμα η κινητική ενέργεια να μπορεί να αδιαστατοποιηθεί απλά διαιρώντας τη διαστατή μορφή της με την ενέργεια διάστασης κατά Morse:

$$K_i^* = \frac{K_i}{D} \quad (4.16)$$

4.3.4. Ολική ενέργεια του κάθε ατόμου

Η ολική ενέργεια του συστήματος είναι το άθροισμα των τιμών της κινητικής και της δυναμικής ενέργειας για το κάθε επιμέρους σωματίδιο. Δίνεται από την ακόλουθη *Hamiltonian* εξίσωση:

$$H = \sum_i \sum_{j>i} P(r_{ij}) + \sum_{i=1}^{\mathbf{u}} \frac{p_i^2}{2m_i} \quad (4.17)$$

Όπου:

- $P(r_{ij})$ η δυναμική ενέργεια του i -οστού σωματιδίου,
- p_i η ορμή του (διανυσματικό μέγεθος),

- r_{ij} η απόστασή του από άλλο σωματίδιο j .

Η δύναμη δίνεται από τη μερική παράγωγο της Hamiltonian ως προς τη θέση του i -οστού σωματιδίου, r_i :

$$F = -\frac{\partial H}{\partial r_i} \quad (4.18)$$

ενώ η ταχύτητα δίνεται από τη μερική παράγωγο της Hamiltonian ως προς την ορμή του, p_i :

$$v = -\frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (4.19)$$

Για κάθε σωματίδιο με κινητική ενέργεια K_i και δυναμική ενέργεια P_i , το άθροισμα των δύο είναι προφανώς η ολική ενέργειά του:

$$E_{tot,i} = K_i + P_i \quad (4.20)$$

Αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (4.4) για τη δυναμική ενέργεια και (4.13) για την κινητική, στη σχέση (4.20), προκύπτει μία πιο αναλυτική μορφή της ολικής ενέργειας του σωματιδίου:

$$E_{tot,i} = D \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\exp[-2a(r_{ij} - r_0)] - 2 \exp[-a(r_{ij} - r_0)] \right] + \frac{1}{2} m_i v_i^2 \quad (4.21)$$

Με τη βοήθεια των κατάλληλων εξισώσεων αδιαστατοποίησης, από τις (4.6) έως (4.11), προκύπτει η αδιαστατοποιημένη μορφή της ολικής ενέργειας:

$$E_{tot,i}^* = K_i^* + P_i^* = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \exp[-2(r_{ij}^* - r_0^*)] - 2 \exp[-(r_{ij}^* - r_0^*)] \quad (4.22)$$

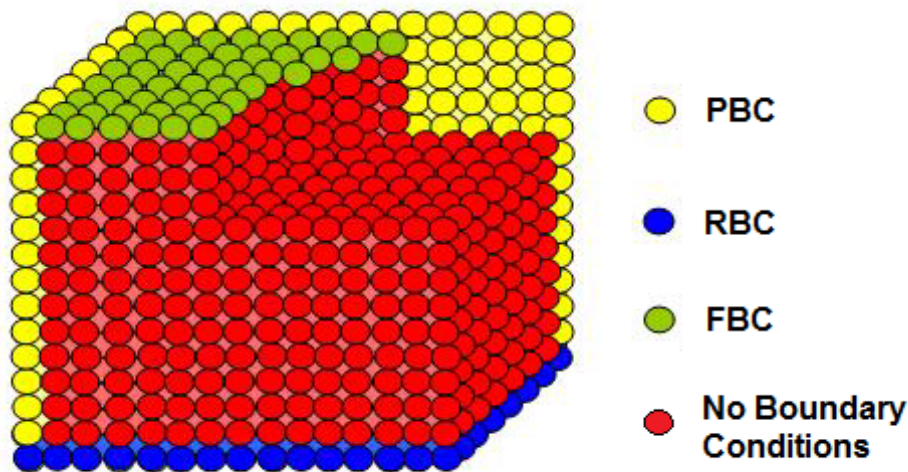
Όπου, κατ' αντιστοιχία με τη Σχέση (4.16), ισχύει ότι:

$$E_{tot,i}^* = \frac{E_{tot,i}}{D} \quad (4.23)$$

4.3.5. Καθορισμός των συνοριακών συνθηκών

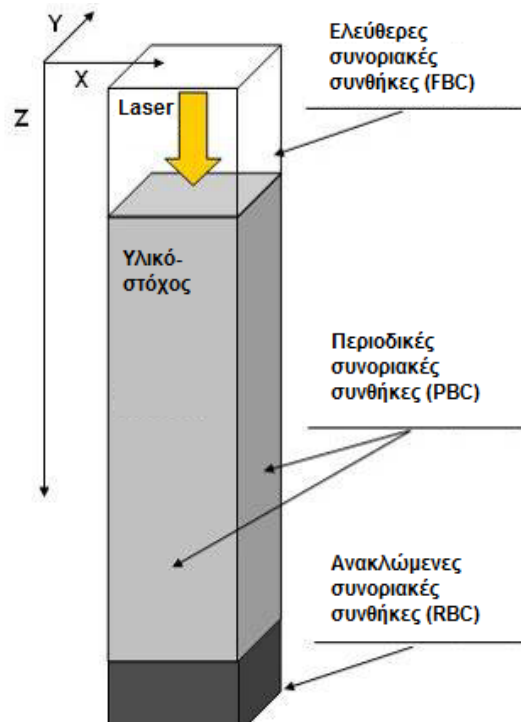
Στα πλαίσια της MD ανάλυσης που διεξάγεται στην παρούσα περίπτωση, απαιτείται η εφαρμογή μιας σειράς από συνοριακές συνθήκες, για τις οποίες εκτενής περιγραφή έχει γίνει στα πλαίσια του Κεφαλαίου 3. Το παρακάτω Σχήμα 4.5. εμφανίζει τα τρία είδη συνοριακών συνθηκών που έχουν χρησιμοποιηθεί στο παρόν πρόβλημα, καθώς επίσης και μία συνηθισμένη κατανομή των θέσεων μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα, στις οποίες αυτές οι συνθήκες εφαρμόζονται και χρησιμοποιούνται. Τα τρία είδη συνοριακών συνθηκών που χρησιμοποιούνται είναι τα εξής:

- Περιοδικές Συνοριακές Συνθήκες (Periodical Boundary Conditions – PBC),
- Ανακλώμενες Συνοριακές Συνθήκες (Reflecting Boundary Conditions – RBC),
- Ελεύθερες Συνοριακές Συνθήκες (Free Boundary Conditions – FBC).



Σχήμα 4.5.: Μία συνηθισμένη κατανομή των θέσεων, μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα, όπου εφαρμόζεται κάθε ένα από τα τρία είδη συνοριακών συνθηκών PBC, RBC και FBC.

Στην περίπτωση του εξεταζόμενου προβλήματος, επιλέγουμε να εφαρμόσουμε *περιοδικές συνοριακές συνθήκες* στο επίπεδο XY, υποθέτοντας ότι το υλικό-στόχος εκτείνεται απείρως στο υπόψη επίπεδο. Η συγκεκριμένη παραδοχή θα μας επιτρέψει να αναπτύξουμε στη συνέχεια τον κώδικα προσομοίωσης σε δύο διαστάσεις, η μία εκ των οποίων θα είναι η z , με τον άξονα z να είναι παράλληλος με τη διεύθυνση της δέσμης Laser. Στην άνω επιφάνεια του υλικού εφαρμόζονται *ελεύθερες συνοριακές συνθήκες*, με τη βοήθεια των οποίων γίνεται εφικτή η απομάκρυνση μεμονωμένων σωματιδίων ή ομάδων αυτών. Στην κατώτερη επιφάνεια του άπειρου στόχου επιλέγεται η εφαρμογή *ανακλώμενων συνοριακών συνθηκών*, με σκοπό τυχόν απομακρύνσεις σωματιδίων κατά τη φωτοαποδόμηση να μην επηρεάζουν την ολική ενέργεια, τον όγκο και τον ολικό αριθμό σωματιδίων. Με τη βοήθεια του Σχήματος 4.6. περιγράψουμε τις παραπάνω διαπιστώσεις, κατά τρόπο αντίστοιχο με αυτόν του Σχήματος 4.5.:



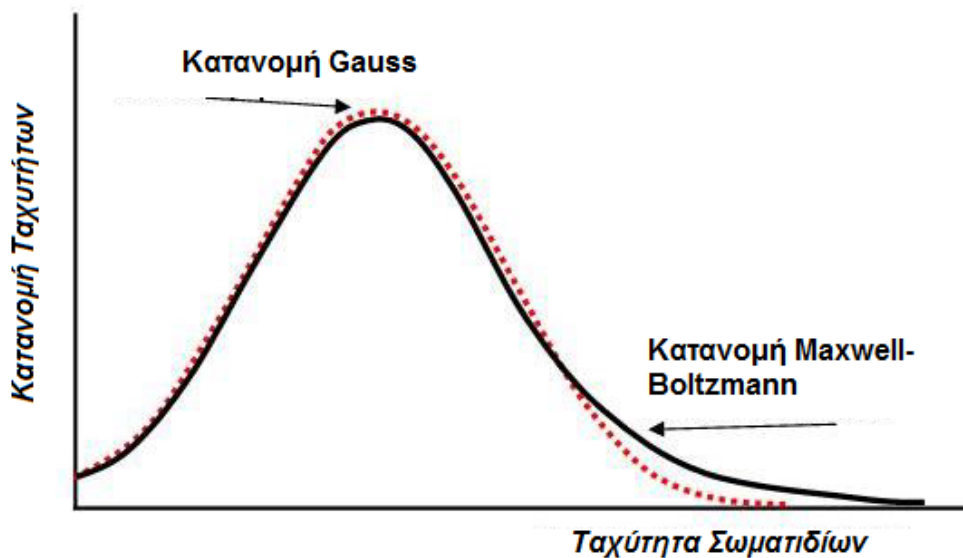
Σχήμα 4.6. Εφαρμογή διαφόρων τύπων συνοριακών συνθηκών κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης της φωτοαποδόμησης πάνω σε μεταλλικό στόχο.

4.4. Εξισορρόπηση του Συστήματος

Με τον όρο *εξισορρόπηση συστήματος* καλούμε τον ορισμό των αρχικών ταχυτήτων των ατόμων του υλικού, με σκοπό την επίτευξη της απαιτούμενης θερμοδυναμικής ισορροπίας. Ο προσδιορισμός των αρχικών ταχυτήτων των ατόμων θα γίνει με βάση την ανάγκη για ικανοποίηση των δύο παρακάτω συνοριακών συνθηκών – αρχών:

- **Αρχή διατήρησης της ορμής.** Η επιλογή των ταχυτήτων θα πρέπει να γίνει κατά τέτοιο τρόπο ώστε η ολική ορμή του συστήματος να είναι μηδενική.
- **Ικανοποίηση κατανομής Maxwell-Boltzmann** για τις ταχύτητες [130].

Προκειμένου να ικανοποιηθεί η δεύτερη συνθήκη, αρχικά επιλέγουμε τις ταχύτητες των ατόμων έτσι ώστε αυτές να ακολουθούν την κανονική κατανομή κατά Gauss, η οποία προσεγγίζει την κατανομή Maxwell-Boltzmann, χωρίς βέβαια να ταυτίζεται με αυτή, παρά μόνο σε ένα συγκεκριμένο πεδίο ταχυτήτων σωματιδίων, όπως φαίνεται και από το παρακάτω Σχήμα 4.7.. Το πλεονέκτημα της κατανομής αυτής, το οποίο οδηγεί τελικά στην επιλογή της, είναι η εύκολη υλοποίησή της. Βέβαια, το τελικό αποτέλεσμα από την εφαρμογή της διαδικασίας εξισορρόπησης, θα πρέπει να είναι η πλήρης ικανοποίηση της κατανομής Maxwell-Boltzmann για όλες τις ταχύτητες.



Σχήμα 4.7.: Σύγκριση των κατανομών ταχυτήτων Gauss και Maxwell-Boltzmann.

Με δεδομένο ότι, στο στάδιο που εξετάζουμε, οι αρχικές θέσεις, οι ταχύτητες των ατόμων του υλικού και η συνάρτηση δυναμικού *Morse*, η οποία αφορά τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων, είναι μεγέθη γνωστά, μπορεί να επιλυθεί η εξίσωση *Newton* που αφορά την κίνηση των σωματιδίων. Αυτή επιλύεται με τη μέθοδο των *Πεπερασμένων Διαφορών* (Finite Difference Method) και, πιο συγκεκριμένα, με τον *τροποποιημένο αλγόριθμο Verlet*. Προκειμένου να εξασφαλίσουμε ότι το υπό προσομοίωση σύστημα βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία, θα πρέπει η συνάρτηση της επιτάχυνσης, $a(t)$, να λάβει μία τιμή κοντά στα $5/3$, η οποία ανταποκρίνεται στην κατανομή Maxwell-Boltzmann. Στο γενικό αλγόριθμο επίλυσης περιλαμβάνεται ένας ακόμα βρόχος ελέγχου (control loop), ο οποίος έχει σχέση με τη θερμοκρασία. Σε περίπτωση που, μετά την ολοκλήρωση της διαδικασίας, η υπολογιζόμενη θερμοκρασία δε λαμβάνει την επιθυμητή τιμή, ακολουθεί η ανάθεση νέων ταχυτήτων. Ολόκληρη η διαδικασία επαναλαμβάνεται όσες φορές χρειάζεται, μέχρι να επέλθει εντέλει πλήρης θερμοδυναμική ισορροπία. Συνοπτικά, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η διαδικασία πρόσδοσης ισορροπίας στο σύστημα περιλαμβάνει τα ακόλουθα πέντε επιμέρους βήματα:

Βήμα 1^ο: Ανάθεση ταχυτήτων στα άτομα του συστήματος.

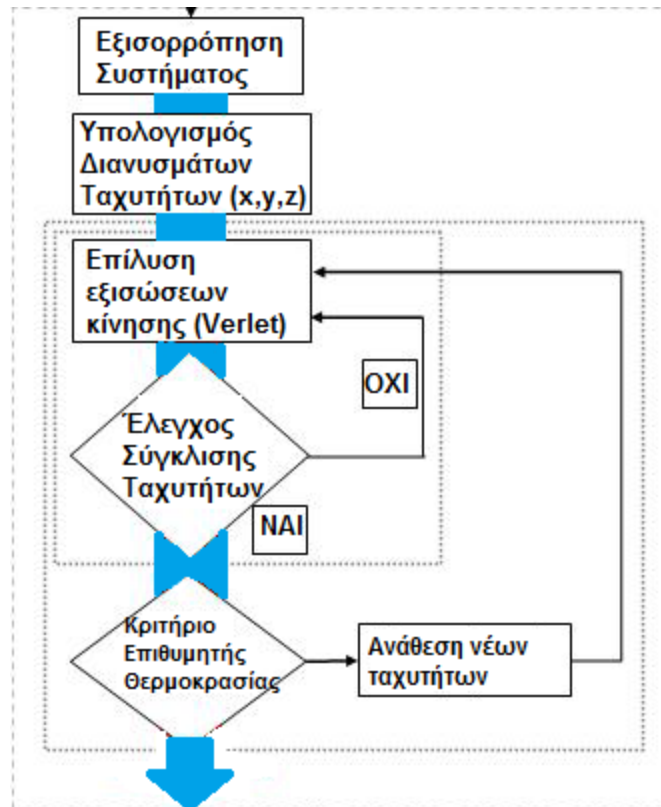
Βήμα 2^ο: Επίλυση εξίσωσης *Newton* με χρήση του τροποποιημένου αλγορίθμου *Verlet*.

Βήμα 3^ο: Έλεγχος σύγκλισης των ταχυτήτων.

Βήμα 4^ο: Έλεγχος της θερμοκρασίας.

Βήμα 5^ο: Ανάθεση νέων ταχυτήτων.

Ο τρόπος με τον οποίο αυτά τα βήματα συνδέονται μεταξύ τους, προκειμένου να επιτευχθεί ο στόχος της εξισορρόπησης του συστήματος, παρουσιάζεται σχηματικά στο παρακάτω Σχήμα 4.8.:



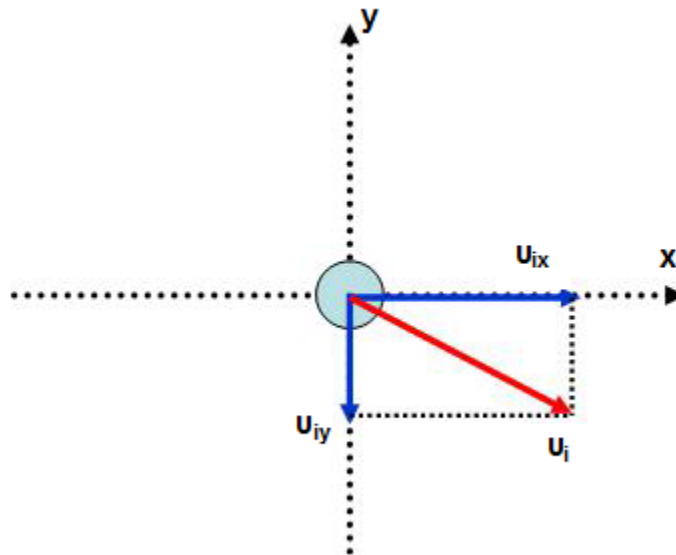
Σχήμα 4.8. Λογικό διάγραμμα διασύνδεσης των βημάτων που πρέπει να ακολουθηθούν, προκειμένου για την προσομοίωση της εξισορρόπησης του συστήματος.

4.4.1. Διανύσματα ταχυτήτων

Στα πλαίσια της προσομοίωσης που θα διεξαχθεί, η αρχική κατανομή των ταχυτήτων των ατόμων θα είναι τυχαία, ενώ η ολική κινητική ενέργεια θα αντιστοιχεί σε μία κοινώς αποδεκτή τιμή της θερμοκρασίας περιβάλλοντος εσωτερικού χώρου, όπως π.χ. οι 300 K (27°C). Η θεωρητική κατανομή ταχυτήτων σε κατάσταση ισορροπίας, η οποία είναι η κατανομή Maxwell-Boltzmann (MB), αναμένεται να προκύψει έπειτα από κάποιες εκατοντάδες επαναλήψεις στην επίλυση του τροποποιημένου αλγορίθμου Verlet, για τον οποίο έχει ήδη γίνει λόγος παραπάνω. Προκειμένου για την απλοποίηση της διαδικασίας ισορροπίας, η κατανομή MB αντικαθίσταται στην – ευκολότερα υλοποιήσιμη – Gauss. Με τη βοήθεια του Σχήματος 4.7., διαπιστώνεται ότι οι όποιες διαφορές εμφανίζονται ανάμεσα στις κατανομές Gauss και MB, όσον αφορά την κατανομή των ταχυτήτων, δεν είναι τόσο πολύ σημαντικές ώστε να υποστεί η κατανομή αυτή σημαντικές μεταβολές αλλάζοντας το είδος της κατανομής. Προφανώς, η εφαρμογή και επαναληπτική επίλυση του αλγορίθμου Verlet θα κάνει τελικώς τις ταχύτητες όλων των ατόμων του συστήματος να ακολουθούν την κατανομή MB. Βέβαια, για τις ανάγκες της παρούσας μελέτης μας, θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε εξαρχής την κατανομή Gauss και να θεωρήσουμε ότι αυτή εξασφαλίζει τη θερμοδυναμική ισορροπία του συστήματος, κάτι που μπορεί να

ελεγχθεί και με βάση ενός κριτηρίου το οποίο θα αναπτυχθεί στο Εδάφιο 4.4.3. αλλά και γενικότερα σε μεταγενέστερα σημεία του Κεφαλαίου.

Ο υπολογισμός των ταχυτήτων θα γίνει για κάθε συνιστώσα ξεχωριστά στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων, όπως για παράδειγμα στην περίπτωση ενός τυχαίου ατόμου i , τοποθετημένου σε δισδιάστατο σύστημα (x,y) :



Σχήμα 4.9. Αναπαράσταση του διανύσματος ταχύτητας για ένα τυχαίο i -οστό άτομο, στο δισδιάστατο καρτεσιανό σύστημα αξόνων (x,y) . Μαζί με το διάνυσμα εμφανίζονται και οι συνιστώσες που το αποτελούν.

Οι ακόλουθες Εξισώσεις (4.24) έως (4.34) έχουν σαν σκοπό την περιγραφή και, στη συνέχεια, την αδιαστατοποίηση όλων των μεγεθών που απαιτούνται, προκειμένου οι ταχύτητες να ακολουθούν την κατανομή Gauss και στη συνέχεια να εισαχθούν στον τροποποιημένο αλγόριθμο Verlet, με σκοπό την επίλυση των εξισώσεων Newton.

Κατά τα γνωστά από τη Θεωρία των Μετρήσεων Τεχνικών Μεγεθών, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι, στην κανονική κατανομή κατά Gauss, κάθε μία από τις συνιστώσες του διανύσματος της ταχύτητας \vec{v} , στους άξονες x , y και z ενός τρισδιάστατου καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων, περιγράφεται ως το άθροισμα της μέσης τιμής της κατανομής για την ταχύτητα, v_{cm} (όπου cm : *center mean* = κεντρικός μέσος) και ενός ακόμα όρου $\sigma \cdot x_{nD}$, όπου σ η τυπική απόκλιση και x_{nD} μία μεταβλητή που ακολουθεί κανονική κατανομή:

$$v_{x,y,z} = v_{cm} + \sigma x_{nD} \quad (4.24)$$

Η τιμή της μέσης ταχύτητας v_{cm} είναι αυτή που αντιστοιχεί στην κινητική ενέργεια του συστήματος, σε μία δοθείσα θερμοκρασία T . Εξισώνοντας τις σχέσεις της κινητικής ενέργειας και της ενέργειας συναρτήσει της θερμοκρασίας T , προκύπτει τελικώς η ζητούμενη τιμή:

$$\frac{1}{2} m_i v_{cm}^2 = \frac{1}{2} k_B T \Rightarrow v_{cm} = \sqrt{\frac{k_B T}{m_i}} \quad (4.25)$$

Η τυπική απόκλιση σ μπορεί να υπολογιστεί με τη βοήθεια της παρακάτω σχέσης, που δίνει το τετράγωνο αυτής (σε μετρήσεις μεγεθών και αναλύσεις κατανομών, συνήθως το τετράγωνο του σ είναι το μέγεθος που χρησιμοποιείται ευρύτερα). Προφανώς η τετραγωνική ρίζα του ευρεθέντος μεγέθους από την (4.26) δίνει το σ .

$$\sigma^2 = \frac{k_B T}{m_i} \quad (4.26)$$

Η μεταβλητή x_{nD} , η οποία εμφανίζεται για πρώτη φορά στη σχέση (4.24), ακολουθεί την κανονική κατανομή και μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει των παραμέτρων n_1, n_2, \dots, n_k , οι οποίες ακολουθούν ομοιόμορφη κατανομή στο κλειστό διάστημα $[0,1]$. Τρεις εξισώσεις, οι (4.27) έως (4.29), μπορούν να οδηγήσουν στην παραγωγή της μεταβλητής x_{nD} :

$$x_{nD} = \sqrt{-2 \ln n_1} \cos 2\pi n_2 \quad (4.27)$$

$$x_{nD} = \sqrt{-2 \ln n_2} \sin 2\pi n_1 \quad (4.28)$$

$$x_{nD} = \sum_{i=1}^{12} n_i - 6 \quad (4.29)$$

Οι εξισώσεις (4.25) έως (4.27) μπορούν τώρα να αδιαστατοποιηθούν, με αποτέλεσμα να προκύψουν οι (4.30) έως (4.32):

$$v_{x,y,z}^* = v_{cm}^* + \sigma^* x_{nD} \quad (4.30)$$

$$v_{cm}^* = \sqrt{\frac{T^*}{m_i^*}} \quad (4.31)$$

$$\sigma^{*2} = \frac{T^*}{m_i^*} \quad (4.32)$$

Όπου:

$$m_i^* = \frac{m_i}{m} \quad (4.33)$$

$$T^* = \frac{k_B T}{D} \quad (4.34)$$

4.4.2. Επισκόπηση των κυριότερων μεθόδων πεπερασμένων διαφορών

Στο πρόβλημα της φωτοαποδόμησης με Laser, όπως θα επιχειρήσουμε να το επιλύσουμε με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής, υπεισέρχεται μία σειρά από συνήθεις διαφορικές εξισώσεις (ΣΔΕ), οι οποίες θα επιλυθούν με χρήση κάποιας μεθόδου πεπερασμένων διαφορών (Finite Difference Method). Δύο χαρακτηριστικές εξισώσεις που επιλύονται με τη βοήθεια της μεθόδου αυτής, για ένα τυχαίο στοιχείο i , είναι οι εξής:

$$m_i \ddot{r}_i = f_i \quad (4.35)$$

$$\dot{r}_i = \frac{p_i}{m_i} \quad (4.36)$$

όπου $\dot{r}_i = \frac{dr_i}{dt}$ και $\ddot{r}_i = \frac{d^2 r_i}{dt^2}$.

Με δεδομένες τις θέσεις των ατόμων, τις ταχύτητές τους καθώς επίσης και άλλα δυναμικά χαρακτηριστικά για την εξεταζόμενη χρονική στιγμή t , γίνεται προσπάθεια υπολογισμού των θέσεων, των ταχυτήτων και όλων των υπόλοιπων χαρακτηριστικών που μας ενδιαφέρουν, σε μία μεταγενέστερη χρονική στιγμή $t + \delta t$, με σχετικά ικανοποιητική ακρίβεια. Η επίλυση αυτών των εξισώσεων γίνεται σε πολλά χρονικά βήματα, με το μέγεθος του βήματος δt να διαφέρει ανάλογα με τη μέθοδο επίλυσης, ακολουθώντας όμως μία βασική αρχή, την οποία αναφέρουν οι Allen και Tildesley στη βιβλιογραφία [114] και σύμφωνα με την οποία θα πρέπει το δt να είναι σημαντικά μικρότερο από το χρόνο που απαιτείται για ένα άτομο ώστε να διασχίσει το ίδιο του το μήκος. Διάφοροι αλγόριθμοι που εντάσσονται στις μεθόδους πεπερασμένων διαφορών έχουν αναπτυχθεί κατά τα τελευταία χρόνια, αλλά αυτοί που χρησιμοποιούνται στις περισσότερες εφαρμογές και μελέτες είναι οι *Verlet* [154] και *Gear Predictor – Corrector*, με τον τελευταίο να ανήκει στη γενικότερη κατηγορία των μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης. Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος δε συνιστάται για εφαρμογές MD σαν και αυτή που θέλουμε να διεξαγάγουμε, λόγω του μέγιστου υπολογιστικού κόστους σε σχέση με όλους τους υπόλοιπους αλγόριθμους Verlet. Τα προβλήματα που δημιουργούνται από τη χρήση του συγκεκριμένου αλγορίθμου γίνονται ακόμα μεγαλύτερα όταν επιχειρήσουμε να αυξήσουμε την τάξη της μεθόδου, καθώς το υπολογιστικό κόστος αυξάνεται ακόμα περαιτέρω, χωρίς όμως να επιτυγχάνεται μεγαλύτερη υπολογιστική ακρίβεια!

Παρακάτω θα γίνει εκτενέστερη ανάλυση σχετικά με τους παρακάτω συχνά χρησιμοποιούμενους αλγορίθμους πεπερασμένων διαφορών:

- Κλασικός αλγόριθμος Verlet.
- Μέθοδοι πρόβλεψης – διόρθωσης (Predictor – Corrector Methods).

- Μέθοδος βατραχοδρασκελισμών Verlet (Leapfrog Verlet). Μάλιστα ο τελευταίος θα χρησιμοποιηθεί καθ'όλη τη διάρκεια της ανάπτυξης του κώδικα Μοριακής Δυναμικής, προκειμένου για τη μελέτη της φωτοαποδόμησης με Laser.

4.4.2.1. Κλασσικός αλγόριθμος Verlet

Ο αλγόριθμος Verlet αναπτύχθηκε από τον ομώνυμο Γάλλο ερευνητή το 1967, ο οποίος μάλιστα συνέταξε μία μελέτη στην οποία περιγράφεται η μεθοδολογία που ακολούθησε [154]. Πιο συγκεκριμένα, πρόκειται για μία μέθοδο ευθείας επίλυσης συνήθων διαφορικών εξισώσεων δεύτερης τάξης. Για την κατάστρωση της γενικής μορφής της εξίσωσης Verlet, χρησιμοποιούνται οι τιμές της τρέχουσας θέσης $r(t)$, της επιτάχυνσης $a(t)$ και της θέσης του προηγούμενου βήματος $r(t-\delta t)$. Οι ταχύτητες $v(t)$ δεν υπεισέρχονται στην εξίσωση Verlet. Η εξίσωση αυτή βασίζεται στο ανάπτυγμα κατά Taylor των ποσοτήτων $r(t+\delta t)$ και $r(t-\delta t)$:

$$\left. \begin{aligned} r(t+\delta t) &= r(t) + \delta t \cdot v(t) + \frac{\delta t^2}{2} a(t) + O(\delta t^3) \\ r(t-\delta t) &= r(t) - \delta t \cdot v(t) + \frac{\delta t^2}{2} a(t) + O(\delta t^3) \end{aligned} \right\} \quad (4.37)$$

Η τελική μορφή της εξίσωσης προκύπτει με προσθήκη των δύο εξισώσεων του παραπάνω συστήματος κατά μέλη, και έχοντας υπόψη ότι $v(t) = \dot{r}(t)$, $a(t) = \ddot{r}(t)$:

$$r(t+\delta t) = 2r(t) - r(t-\delta t) + \delta t^2 a(t) + O(\delta t^4) \quad (4.38)$$

με τον όρο $O(\delta t^4)$ να είναι πολύ μικρός σε σχέση με τους υπόλοιπους και επομένως να μπορεί να αμεληθεί.

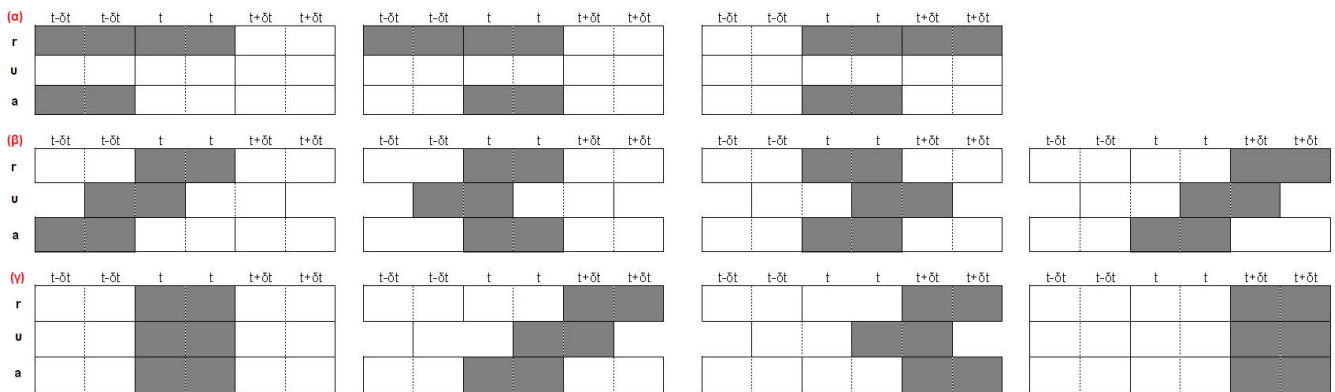
Πάντως, επειδή οι ταχύτητες $v(t)$ πρέπει να χρησιμοποιηθούν για τον υπολογισμό της κινητικής ενέργειας, μέσω του οποίου θα εξαχθεί συνακόλουθα και η ολική ενέργεια, υπάρχει η ανάγκη για εξαγωγή μιας σχέσης που δίνει τις ταχύτητες. Αυτή είναι η εξής:

$$v(t) = \frac{r(t+\delta t) - r(t-\delta t)}{2\delta t} + O(\delta t^2) \quad (4.39)$$

Ο αλγόριθμος Verlet, στη βασική του μορφή, παρουσιάζει ορισμένα μειονεκτήματα τα οποία αρκετές φορές τον καθιστούν δύσχρηστο, κυρίως όσον αφορά τον υπολογισμό της ταχύτητας. Παρατηρώντας την εξίσωση (4.38), βλέπουμε ότι ο όρος $\delta t^2 a(t)$, τάξης $O(\delta t^2)$, προστίθεται σε μία σειρά από όρους πολύ μεγαλύτερους του, τάξης $O(\delta t^0)$. Κατά συνέπεια, είναι πολύ πιθανό η αριθμητική ακρίβεια, στην

προσπάθεια υπολογισμού τόσο των ταχυτήτων όσο και των τροχιών, να μειωθεί, πράγμα που είναι ανεπιθύμητο. Προκειμένου να περιοριστούν ή ακόμα και να εξαλειφθούν αυτά τα μειονεκτήματα που παρατηρούνται, έχουν αναπτυχθεί δύο βελτιωμένες τροποποιήσεις του αλγορίθμου, οι οποίες μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε προβλήματα MD δίνοντας περισσότερο ικανοποιητικά αποτελέσματα. Αυτοί είναι ο αλγόριθμος *Verlet* που βασίζεται στην ταχύτητα (*Velocity Verlet*), καθώς επίσης και η μέθοδος *Verlet* των *βατραχοδρασκεισμών* (*Leapfrog Verlet*). Όπως αναφέρεται και στη βιβλιογραφία [155], η μέθοδος *Leapfrog Verlet* αντιμετωπίζει με επιτυχία τα προβλήματα που εμφανίζονται στα πλαίσια της χρήσης του βασικού αλγορίθμου *Verlet*. Το θέμα της αριθμητικής ακρίβειας δεν τυγχάνει και του καλύτερου χειρισμού όταν γίνεται χρήση του αλγορίθμου *Leapfrog Verlet*, κάτι που έχει οδηγήσει στην κατάστροφη ενός περαιτέρω βελτιωμένου αλγορίθμου, ο οποίος όμως χαρακτηρίζεται από σαφώς μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος σε σχέση με τη μέθοδο των *βατραχοδρασκεισμών*. Βέβαια, ο συγκεκριμένος αλγόριθμος μπορεί να έχει, σε διάφορες περιπτώσεις, το ίδιο υπολογιστικό κόστος με τον κλασικό αλγόριθμο *Verlet*. Τελικά, ο *Leapfrog Verlet* προτιμάται για τις περισσότερες εφαρμογές MD έχοντας ως πλεονεκτήματα την καλή αριθμητική σταθερότητα, την ευκολία και την απλότητα στη χρήση του, καθώς επίσης και το ικανοποιητικού βαθμού υπολογιστικό κόστος. Παρακάτω θα γίνει αναλυτικότερη επισκόπηση του συγκεκριμένου αλγορίθμου.

Το παρακάτω Σχήμα 4.10. έχει ως σκοπό τη σύγκριση μεταξύ των τριών εναλλακτικών μορφών του αλγορίθμου *Verlet* που χρησιμοποιούνται σε περιπτώσεις επίλυσης προβλημάτων MD. Στην αριστερή πλευρά κάθε στήλης εμφανίζονται τα μεγέθη που θα υπολογιστούν (θέση r , ταχύτητα v , επιτάχυνση a), ενώ στην πάνω πλευρά τα χρονοβήματα ($t-\delta t$, t , $t+\delta t$). Τα σκιασμένα κελιά δείχνουν σε ποια χρονοβήματα υπολογίζεται κάθε ένα από τα μεγέθη r , v , a . Είναι σημαντικό να έχουμε στο νου μας ότι, στα πλαίσια της εφαρμογής MD ανάλυσης, μας ενδιαφέρει κατά κύριο λόγο να διατηρούνται συγκεκριμένα μεγέθη, όπως η ενέργεια. Η καλή ακρίβεια στη διατήρηση της ενέργειας είναι ένα πολύ βασικό χαρακτηριστικό που θα πρέπει να έχει μία μέθοδος ολοκλήρωσης προκειμένου να επιλεγεί και να εφαρμοστεί εντέλει.



Σχήμα 4.10. Αναπαράσταση των μεγεθών και χρονοβημάτων επίλυσης για τους παρακάτω αλγορίθμους:
(α) κλασσικός Verlet, (β) Leapfrog Verlet, (γ) Velocity Verlet.

4.4.2.2. Μέθοδοι Πρόβλεψης – Διόρθωσης

Οι μέθοδοι πρόβλεψης – διόρθωσης (Predictor – Corrector Methods) χαρακτηρίζονται ως μέθοδοι *πολλαπλών τιμών*. Αυτό σημαίνει ότι, στα πλαίσια της διαδικασίας αριθμητικής ολοκλήρωσης, γίνεται χρήση πλήθους πληροφοριών που υπολογίζονται σε ένα ή περισσότερα προηγούμενα χρονικά βήματα, δηλαδή σε προηγούμενες χρονικές στιγμές $t - k \cdot \Delta t$, όπου k θετική ακέραια σταθερά. Η ονομασία των μεθόδων αυτών («πρόβλεψης – διόρθωσης») σημαίνει ουσιαστικά ότι υπολογίζεται μία αρχική εκτίμηση του μεγέθους που θέλουμε να βρούμε, ενώ στη συνέχεια αυτή η τιμή βελτιώνεται καθώς ο υπολογισμός εξελίσσεται.

Δύο είναι οι μέθοδοι πρόβλεψης – διόρθωσης που βρίσκουν ευρεία εφαρμογή σε διάφορες περιπτώσεις:

- Η μέθοδος *Adams*, στις οποίες χρησιμοποιούνται οι τιμές της επιτάχυνσης προηγούμενων χρονικών βημάτων.
- Η μέθοδος *Nordsieck*, στις οποίες χρησιμοποιούνται παράγωγοι της επιτάχυνσης για την τρέχουσα χρονική στιγμή. Η ανάλυση της συγκεκριμένης μεθόδου βρίσκεται εκτός των ορίων της μελέτης μας, επειδή δε θα χρησιμοποιηθούν οι παράγωγοι της επιτάχυνσης στα πλαίσια αυτής, με το σκεπτικό ότι αυτές δε συμμετέχουν στη δυναμική του Newton με συγκεκριμένο τρόπο [113].

Η γενική μορφή της διαφορικής εξίσωσης, την οποία καλείται ο χρήστης ή το υπολογιστικό πακέτο αριθμητικής ολοκλήρωσης να επιλύσει με τη βοήθεια της μεθόδου Adams, είναι η εξής:

$$\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) \tag{4.40}$$

Για την περίπτωση κατά την οποία υπεισέρχεται η παράμετρος της θέσης ενός σωματιδίου, $r(t)$, καθώς επίσης και οι παράγωγοι αυτών – έως και $2^{ης}$ τάξης – ως προς το χρόνο, η (4.40) λαμβάνει την ακόλουθη μορφή:

$$\dot{r} = f(r, \dot{r}, t) \quad (4.41)$$

Η αρχική φάση εφαρμογής της μεθόδου, η οποία είναι η φάση πρόβλεψης (prediction phase), χρησιμοποιεί τις τιμές διαφόρων μεγεθών που έχουν υπολογιστεί κατά τα χρονικά βήματα t , $t - \delta t$ κ.ο.κ., ώστε να εξαχθεί μία πρώτη εκτίμηση για τη θέση του σωματιδίου τη χρονική στιγμή $t + \delta t$. Ο τύπος που θα χρησιμοποιηθεί σε αυτή την περίπτωση είναι ο *Adams-Bashforth*:

$$P(r): r(t + \delta t) = r(t) + \delta t \cdot \dot{r}(t) + \delta t^2 \sum_{i=1}^{k-1} [b_i f(t + (1-i)\delta t)] \quad (4.42)$$

όπου b_i πραγματικοί συντελεστές.

Για δεδομένη τιμή του k , η σχέση (4.42) μπορεί να παράσχει ακριβή αποτελέσματα για όλα τα πολυώνυμα του τύπου $r(t) = t^q$, εφόσον $q \leq k$. Στην περίπτωση αυτή το τοπικό σφάλμα είναι $O(h^{k+1})$. Βέβαια, η απαίτηση αυτή ικανοποιείται εφόσον οι συντελεστές b_i ικανοποιούν το παρακάτω σύστημα των $k - 1$ εξισώσεων:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1-i)^q b_i = \frac{1}{(q+1)(q+2)}, \text{ με } q = 0, 1, \dots, k-2 \quad (4.43)$$

Η επίλυση αυτού του συστήματος είναι εύκολη και δίνει ρητές συναρτήσεις για τους συντελεστές b_i .

Για την ταχύτητα $v(t) = \dot{r}(t)$, η σχέση πρόβλεψης που θα χρησιμοποιηθεί είναι η εξής:

$$P(\dot{r}): \delta t \cdot \dot{r}(t + \delta t) = r(t + \delta t) - r(t) + \delta t^2 \sum_{i=1}^{k-1} [c_i f(t + (1-i)\delta t)] \quad (4.44)$$

Οι συντελεστές c_i που υπεισέρχονται στην (4.44) θα πρέπει να ικανοποιούν το παρακάτω σύστημα των $k - 1$ εξισώσεων:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1-i)^q b_i = \frac{1}{q+2} \quad (4.45)$$

Αφού υπολογιστούν οι προβλέψεις για τη θέση r και την ταχύτητα v του υπό εξέταση σωματιδίου, κατά τη χρονική στιγμή $t + \delta t$, στη συνέχεια γίνεται χρήση αυτών προκειμένου να υπολογιστούν οι νέες θέσεις και ταχύτητες στο νέο αυτό χρονοβήμα. Αυτή η διαδικασία ακολουθείται κατά τη φάση της *διόρθωσης* (correction phase), όπου εφαρμόζονται οι παρακάτω σχέσεις των *Adams-Moulton*:

$$C(r): r(t + \delta t) = r(t) + \delta t \cdot \mathcal{R}(t) + \delta t^2 \sum_{i=1}^{k-1} d_i f[t + (2-i)\delta t] \quad (4.46)$$

$$C(\mathcal{R}): \delta t \cdot \mathcal{R}(t + \delta t) = r(t + \delta t) - r(t) + \delta t^2 \sum_{i=1}^{k-1} g_i f[t + (2-i)\delta t] \quad (4.47)$$

Οι συντελεστές d_i, g_i θα πρέπει να ικανοποιούν τις παρακάτω συνθήκες:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (2-i)^q d_i = \frac{1}{(q+1)(q+2)} \quad (4.48)$$

$$\sum_{i=1}^{k-1} (2-i)^q g_i = \frac{1}{q+2} \quad (4.49)$$

Παρατηρούμε εδώ ότι οι σχέσεις πρόβλεψης δεν υπεισέρχονται στις εξισώσεις διόρθωσης (4.46) και (4.47), παρά μόνο όταν πρόκειται να υπολογιστεί το f . Για $k = 4$ και $k = 5$, ο Rapaport παρουσιάζει [113] τους συντελεστές b_i, c_i, d_i, g_i που υπεισέρχονται στις σχέσεις πρόβλεψης και διόρθωσης για τις θέσεις και τις ταχύτητες (τις οποίες ο ίδιος συμβολίζει με x και \dot{x} αντίστοιχα), στον παρακάτω Πίνακα 4.2.:

$k = 4 (\times 1/24)$	1	2	3	
$P(x):$	19	-10	3	
$P(\dot{x}):$	27	-22	7	
$C(x):$	3	10	-1	
$C(\dot{x}):$	7	6	-1	
$k = 5 (\times 1/360)$	1	2	3	4
$P(x):$	323	-264	159	-38
$P(\dot{x}):$	502	-621	396	-97
$C(x):$	38	171	-36	7
$C(\dot{x}):$	97	114	-39	8

Πίνακας 4.2.: Παρουσίαση των τιμών για τις παραμέτρους πρόβλεψης και διόρθωσης για δευτεροβάθμιες εξισώσεις, για τις περιπτώσεις κατά τις οποίες $k = 4$ και $k = 5$ [113].

Ο Rapaport έχει προτείνει την εφαρμογή της μεθόδου πρόβλεψης – διόρθωσης Adams και για την επίλυση εξισώσεων του τύπου:

$$\mathcal{R} = f(r, t) \quad (4.50)$$

Στην προκειμένη περίπτωση, οι σχέσεις πρόβλεψης $P(t)$ και διόρθωσης $C(t)$ είναι οι ακόλουθες:

$$P(t): r(t + \delta t) = r(t) + \delta t \sum_{i=1}^k m_i f[t + (1-i)\delta t] \quad (4.51)$$

$$C(t): r(t + \delta t) = r(t) + \delta t \sum_{i=1}^k n_i f [t + (2-i)\delta t] \quad (4.52)$$

Οι συντελεστές m_i και n_i θα πρέπει να ικανοποιούν τις παρακάτω σχέσεις:

$$\sum_{i=1}^k (1-i)^q m_i = \frac{1}{q+1} \quad (4.53)$$

$$\sum_{i=1}^k (2-i)^q n_i = \frac{1}{q+1} \quad (4.54)$$

Οι τιμές των συντελεστών αυτών για διάφορες περιπτώσεις, όπως παρουσιάζονται στη μελέτη [113] του Karaport, εμφανίζονται στον παρακάτω Πίνακα 6.3. (όπου η τιμή r αντικαθίσταται με x):

$k = 3 (\times 1/12)$	1	2	3	
$P(x):$	23	-16	5	
$C(x):$	5	8	-1	
$k = 4 (\times 1/24)$	1	2	3	4
$P(x):$	55	-59	37	-9
$C(x):$	9	19	-5	1

Πίνακας 4.3.: Παρουσίαση των τιμών για τις παραμέτρους πρόβλεψης και διόρθωσης για πρωτοβάθμιες εξισώσεις, για τις περιπτώσεις κατά τις οποίες $k = 3$ και $k = 4$ [113].

4.4.2.3. Τροποποιημένος αλγόριθμος Verlet βατραχοδρασκελισμών (Leapfrog Verlet) και υπολογισμός δυνάμεων

Ο αλγόριθμος βατραχοδρασκελισμών Verlet (Leapfrog Verlet) είναι μία τροποποιημένη μορφή του κλασσικού αλγορίθμου Verlet. Χρησιμοποιείται για την επίλυση των εξισώσεων κίνησης των σωματιδίων, μία διαδικασία που επαναλαμβάνεται όσες φορές χρειάζεται προκειμένου το υπό εξέταση σύστημα να περιέλθει σε πλήρη ισορροπία.

Το χρονικό σχήμα που χαρακτηρίζει τη μέθοδο Leapfrog Verlet χαρακτηρίζεται από τις εξής δύο εξισώσεις:

$$\mathbf{u}_{n+1/2} = \mathbf{u}_{n-1/2} + \alpha_n \delta t \quad (4.55)$$

$$\mathbf{x}_{n+1/2} = \mathbf{x}_n + \mathbf{u}_{n+1/2} \delta t \quad (4.56)$$

όπου:

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

- \mathbf{x}_n , α_n είναι αντίστοιχα οι τρισδιάστατοι ταχυστές που παριστάνουν τη θέση και την επιτάχυνση ενός σωματιδίου τη χρονική στιγμή n ,
- $\mathbf{u}_{n\pm 1/2}$ είναι ο τρισδιάστατος ταχυστής που περιγράφει την ταχύτητα στις χρονικές στιγμές $n \pm 1/2$,
- δt είναι το χρονοβήμα.

Αναπτύσσοντας τις (4.55) και (4.56) στο τρισδιάστατο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων $Oxyz$, προκύπτουν εντέλει οι ακόλουθες σχέσεις, για κάθε ξεχωριστό σωματίδιο i :

$$\begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_{n+1/2} = \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_{n-1/2} + \begin{bmatrix} a_{ix} \\ a_{iy} \\ a_{iz} \end{bmatrix}_n \delta t \quad (4.57)$$

$$\begin{bmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{bmatrix}_{n+1} = \begin{bmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{bmatrix}_n + \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_{n+1/2} \delta t \quad (4.58)$$

Στον αλγόριθμο Leapfrog Verlet, οι θέσεις είναι γνωστές στις χρονικές στιγμές $n, n+1, n+2$ κλπ., αλλά οι ταχύτητες είναι γνωστές στις χρονικές στιγμές $n-1/2, n+1/2, n+3/2$ κ.ο.κ., με αποτέλεσμα να μην είναι εφικτός ο ταυτόχρονος υπολογισμός της κινητικής και της δυναμικής ενέργειας. Μία επιλογή που προκρίνεται είναι η χρήση μιας παραπάνω εξίσωσης για τον υπολογισμό των ταχυτήτων σε ακέραιο πλήθος χρονοβημάτων. Βέβαια, αυτή η επιλογή αποδεικνύεται τελικά το ίδιο χρονοβόρα (ως προς τον αριθμό διαδικασιών και την εξαγωγή των τελικών αποτελεσμάτων) με την επιλογή του κλασσικού αλγορίθμου Verlet.

Η επιπρόσθετη εξίσωση παρουσιάζεται παρακάτω, τόσο στην ταχυστική της μορφή, (4.59), όσο και στην ανεπτυγμένη της, (4.60):

$$\mathbf{v}_n = \frac{\mathbf{v}_{n+1/2} + \mathbf{v}_{n-1/2}}{2} \quad (4.59)$$

$$\begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_n = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_{n+1/2} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_{n-1/2} \quad (4.60)$$

Η υλοποίηση του τροποποιημένου αλγορίθμου Verlet απαιτεί τη γνώση των θέσεων (x, y, z) , των ταχυτήτων (v_x, v_y, v_z) και των επιταχύνσεων (a_x, a_y, a_z) για κάθε άτομο. Από το πρώτο βήμα είναι ήδη γνωστή η αρχική θέση του κάθε σωματιδίου, μέσω της κρυσταλλικής δομής του πλέγματος (π.χ. bcc ή fcc) πριν την έναρξη της διαδικασίας φωτοαποδόμησης. Επίσης, η ταχύτητα του κάθε σωματιδίου είναι

γνωστή από το δεύτερο κίόλας βήμα, λόγω της αρχικής κατανομής Gauss των ταχυτήτων που έχουμε υποθέσει ότι χαρακτηρίζει τα σωματίδια (όπως αναφέραμε και παραπάνω, ο σκοπός της επαναληπτικής επίλυσης είναι τελικά οι ταχύτητες να ακολουθούν την κατανομή Maxwell-Boltzmann). Όμως, το μέγεθος της επιτάχυνσης είναι άγνωστο για τα σωματίδια, πράγμα που σημαίνει ότι πρέπει να υπολογιστεί. Για κάθε άτομο του οποίου την επιτάχυνση θέλουμε να βρούμε, πρέπει πρώτα να γίνει γνωστή (μέσω του υπολογισμού της) η ολική δύναμη που ασκείται πάνω στο υπόψη άτομο. Αυτή θα βρεθεί αθροίζοντας τα διανύσματα των δυνάμεων από τα γειτονικά άτομα. Εάν το σύστημα περιλαμβάνει N άτομα, τότε συνολικά θα ασκούνται $N(N-2)$ δυνάμεις, από τις οποίες θα πρέπει να υπολογίσουμε μόνο τις μισές, δηλαδή $\frac{N(N-2)}{2}$, λόγω του γεγονότος ότι $\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji}$, όπως ορίζεται από τον τρίτο νόμο του Newton.

Η δύναμη \mathbf{F}_i θα δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\mathbf{F}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}} \frac{\partial}{\partial r} P_i(r) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}} f_{ij} \quad (4.61)$$

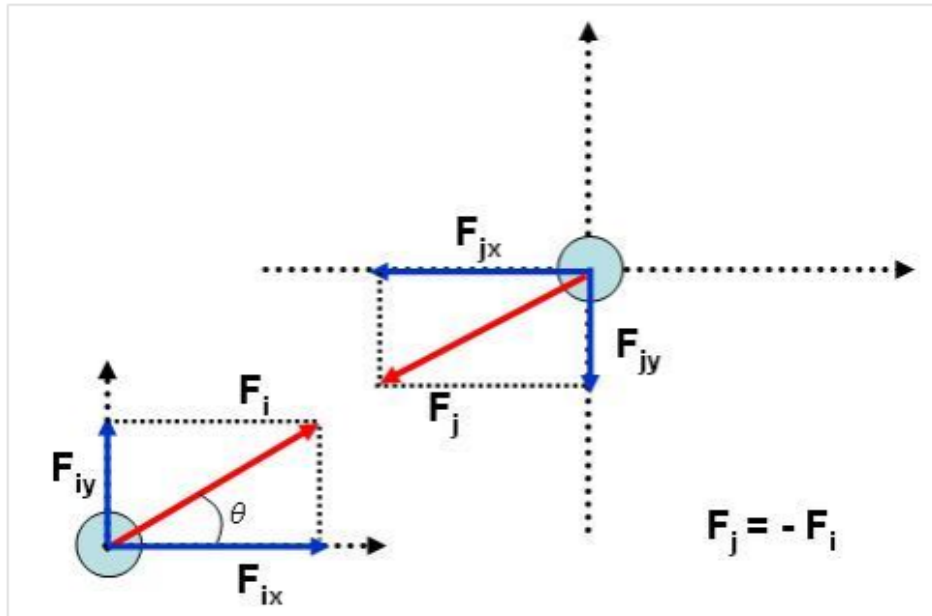
όπου το μέτρο της δύναμης, f_{ij} , είναι, εξ ορισμού, η μερική παράγωγος της δυναμικής ενέργειας ως προς την απόσταση:

$$f_{ij} = -\frac{\partial}{\partial r_{ij}} P_i(r_{ij}) \quad (4.62)$$

Για τρισδιάστατες προσομοιώσεις, η δύναμη θα πρέπει και αυτή να υπολογιστεί στις τρεις διαστάσεις. Η (4.61) μπορεί, κατά συνέπεια, να αναπτυχθεί στην (4.63) εισάγοντας τα μοναδιαία διανύσματα \mathbf{i}, \mathbf{j} και \mathbf{k} , το μέτρο της δύναμης f_{ij} (μέσω της 4.62) και τα συνημίτονα κατεύθυνσης $\left(\frac{x_i - x_j}{r_{ij}}\right), \left(\frac{y_i - y_j}{r_{ij}}\right)$ και $\left(\frac{z_i - z_j}{r_{ij}}\right)$. Για δισδιάστατες προσομοιώσεις MD στο σύστημα αξόνων (x,y) , οι οποίες μπορούν να χρησιμοποιηθούν ευρέως σε διάφορες εφαρμογές φωτοαποδόμησης, προφανώς οι όροι που σχετίζονται με την τρίτη διάσταση z αμελούνται.

$$\mathbf{F}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}} \frac{\partial}{\partial r} P_i(r) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}} \frac{\partial}{\partial r} f_{ij} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[(x_j - x_i), (y_j - y_i), (z_j - z_i) \right] \begin{bmatrix} \mathbf{i} \\ \mathbf{j} \\ \mathbf{k} \end{bmatrix} \frac{f_{ij}}{r_{ij}} \quad (4.63)$$

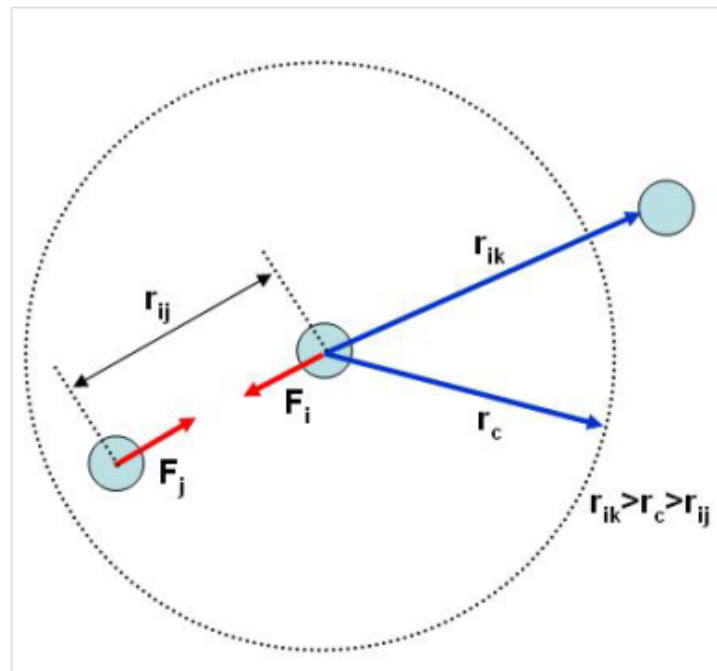
Σε ένα δισδιάστατο σύστημα αξόνων (x,y) , το παρακάτω Σχήμα 4.11. παρουσιάζει τις κατευθύνσεις των δυνάμεων και των συνιστωσών τους, για κάθε τυχαίο σωματίδιο i και j , λαμβάνοντας υπόψη προφανώς ότι $\mathbf{F}_j = -\mathbf{F}_i$ πάντα λόγω του τρίτου νόμου του Newton.



Σχήμα 4.11. Αναπαράσταση των διανυσμάτων για τις δυνάμεις τυχόντων σωματιδίων i και j , καθώς επίσης και των συνιστωσών τους στους άξονες x και y .

Στο παρακάτω Σχήμα 4.12. εμφανίζεται και η έννοια της απόστασης αποκοπής, r_c , η οποία είναι η μέγιστη απόσταση δύο σωματιδίων πέρα από την οποία οι μεταξύ τους δυνάμεις αλληλεπίδρασης αμελούνται. Οι δυνάμεις \mathbf{F}_i , \mathbf{F}_j που εμφανίζονται στο συγκεκριμένο Σχήμα υπολογίζονται με τη βοήθεια μιας σχέσης που περιλαμβάνει τη διάμετρο ενός νοητού κύκλου, D , την ατομική ακτίνα αναφοράς \mathbf{a} , τις αποστάσεις μεταξύ των ζευγών ατόμων (i,j) και (i,k) , r_{ij}, r_{ik} , καθώς επίσης και την απόσταση αποκοπής r_c , η οποία θα μπορούσε να αντικατασταθεί από την απόσταση ισορροπίας r_0 . Σημειώνεται εδώ ότι, στο υπόψη σχήμα, τα σωματίδια i και j βρίσκονται εντός του κύκλου, ενώ το k εκτός αυτού.

$$\begin{bmatrix} f_{ix} \\ f_{iy} \\ f_{iz} \end{bmatrix} = 2aD \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \begin{bmatrix} x_j - x_i \\ y_j - y_i \\ z_j - z_i \end{bmatrix} \frac{\left[-\exp(-2a(r_{ij} - r_0)) + \exp(-a(r_{ij} - r_0)) \right]}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \quad (4.64)$$



Σχήμα 4.12. Αναπαράσταση των διανυσμάτων των δυνάμεων, καθώς επίσης και της απόστασης αποκοπής r_c , πέρα από την οποία δύο σωματίδια παρουσιάζουν αμελητέα μεταξύ τους αλληλεπίδραση.

Με τη βοήθεια του δεύτερου νόμου του Newton, σύμφωνα με τον οποίο η επιτάχυνση είναι ο λόγος της δύναμης προς τη μάζα, εξάγονται οι ακόλουθες σχέσεις για την επιτάχυνση:

$$\alpha_i = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} = \frac{1}{m_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}} \frac{\partial}{\partial r} P(r)_{r=r_{ij}} \quad (4.65)$$

$$\alpha_i = \frac{1}{m_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[(x_j - x_i), (y_j - y_i), (z_j - z_i) \right] \begin{bmatrix} \mathbf{i} \\ \mathbf{j} \\ \mathbf{k} \end{bmatrix} \frac{f_{ij}}{r_{ij}} \quad (4.66)$$

Από τις δύο παραπάνω σχέσεις, αλλά και από την (4.64), θα προκύψουν τα εξής:

$$\begin{bmatrix} a_{ix} \\ a_{iy} \\ a_{iz} \end{bmatrix}_n = \frac{1}{m_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \begin{bmatrix} x_j - x_i \\ y_j - y_i \\ z_j - z_i \end{bmatrix}_n \frac{f_{ij}}{r_{ij}} \quad (4.67)$$

$$\begin{bmatrix} a_{ix} \\ a_{iy} \\ a_{iz} \end{bmatrix}_n = \frac{1}{m_i} \begin{bmatrix} f_{ix} \\ f_{iy} \\ f_{iz} \end{bmatrix}_n = \frac{2aD}{m} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \begin{bmatrix} x_j - x_i \\ y_j - y_i \\ z_j - z_i \end{bmatrix}_n \frac{\left[-\exp(-2a(r_{ij} - r_0)) + \exp(-a(r_{ij} - r_0)) \right]}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \quad (4.68)$$

Οι εξισώσεις (4.55), (4.56), (4.59), (4.64) και (4.68) θα χρησιμοποιηθούν στον αλγόριθμο Verlet στην αδιαστατοποιημένη τους μορφή. Έτσι προκύπτουν αρχικά οι αδιαστατοποιημένες εξισώσεις για τη θέση και την ταχύτητα του κάθε σωματιδίου:

$$\mathbf{u}_{n+1/2}^* = \mathbf{u}_{n-1/2}^* + \alpha_n^* \delta t^* \quad (4.69)$$

$$\mathbf{x}_{n+1}^* = \mathbf{x}_n^* + \mathbf{u}_{n+1/2}^* \delta t^* \quad (4.70)$$

$$\mathbf{u}_n^* = \frac{\mathbf{u}_{n+1/2}^* + \mathbf{u}_{n-1/2}^*}{2} \quad (4.71)$$

Η αδιαστατοποιημένη σχέση για τη δύναμη είναι η εξής:

$$f_i^* = 2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[-\exp(-2(r_{ij}^* - r_0^*)) + 2 \exp(-(r_{ij}^* - r_0^*)) \right] \quad (4.72)$$

η οποία μπορεί να λάβει και την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{bmatrix} f_{ix} \\ f_{iy} \\ f_{iz} \end{bmatrix}^* = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \begin{bmatrix} x_j - x_i \\ y_j - y_i \\ z_j - z_i \end{bmatrix}^* \frac{f_{ij}^*}{r_{ij}^*} = 2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \begin{bmatrix} x_j - x_i \\ y_j - y_i \\ z_j - z_i \end{bmatrix}^* \frac{\left[-\exp(-2(r_{ij}^* - r_0^*)) + \exp(-(r_{ij}^* - r_0^*)) \right]}{\sqrt{(x_i^* - x_j^*)^2 + (y_i^* - y_j^*)^2 + (z_i^* - z_j^*)^2}} \quad (4.73)$$

Η αδιαστατοποιημένη εξίσωση για την επιτάχυνση είναι η εξής:

$$\begin{bmatrix} a_{ix} \\ a_{iy} \\ a_{iz} \end{bmatrix}^* = \frac{1}{m_i^*} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \begin{bmatrix} x_j - x_i \\ y_j - y_i \\ z_j - z_i \end{bmatrix}^* \frac{f_{ij}^*}{r_{ij}^*} = \frac{2}{m_i^*} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \begin{bmatrix} x_j - x_i \\ y_j - y_i \\ z_j - z_i \end{bmatrix}^* \frac{\left[-\exp(-2(r_{ij}^* - r_0^*)) + \exp(-(r_{ij}^* - r_0^*)) \right]}{\sqrt{(x_i^* - x_j^*)^2 + (y_i^* - y_j^*)^2 + (z_i^* - z_j^*)^2}} \quad (4.74)$$

4.4.3. Συνάρτηση σύγκλισης ταχυτήτων και έλεγχος της σύγκλισης

Προκειμένου να αποφανθούμε για το αν έχει επιτευχθεί ισορροπία μετά την επαναληπτική εκτέλεση του επιθυμητού αλγορίθμου MD, εισάγουμε εδώ την έννοια της *συνάρτησης σύγκλισης ταχύτητας*. Ο Rieth [130] τη συμβολίζει με $\alpha(t)$, αλλά προκειμένου να μην υπάρχει σύγχυση με το συμβολισμό της επιτάχυνσης, που είναι επίσης α , θα την ονομάσουμε εδώ $C(t)$, όπου το αρχικό γράμμα C αντιστοιχεί στον όρο *Convergence* (σύγκλιση). Εάν ικανοποιείται η συνθήκη ισορροπίας που δίνεται από την υπόψη συνάρτηση, τότε θεωρούμε ότι το σύστημα βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία [130]. Ακολουθεί το στάδιο της ακτινοβολίας, όπου προσομοιώνεται η επίδραση της ακτίνας Laser στο υλικό. Αν η απαιτούμενη συνθήκη δεν ικανοποιείται, η διαδικασία επίλυσης αλγορίθμων Verlet συνεχίζεται, έως ότου τελικώς αποκατασταθεί η θερμοδυναμική ισορροπία.

Η συνάρτηση σύγκλισης ταχυτήτων δίνεται από τον παρακάτω τύπο:

$$C(t) = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [v_{ix}^2 + v_{iy}^2 + v_{iz}^2]^2}{\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [v_{ix}^2 + v_{iy}^2 + v_{iz}^2] \right]^2} \quad (4.75)$$

Η συνθήκη θερμοδυναμικής ισορροπίας ικανοποιείται στην περίπτωση κατά την οποία $\left| C(t) - \frac{5}{3} \right| \leq 0.2$. Βέβαια, εάν η ακρίβεια του πειράματος μεταβληθεί, ενδέχεται η τιμή σύγκλισης (0.2) να μεταβληθεί και αυτή.

Η αδιαστατοποιημένη μορφή της (4.75) είναι η εξής:

$$[C(t)]^* = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[(v_{ix}^*)^2 + (v_{iy}^*)^2 + (v_{iz}^*)^2 \right]^2}{\left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[(v_{ix}^*)^2 + (v_{iy}^*)^2 + (v_{iz}^*)^2 \right] \right\}^2} \quad (4.76)$$

4.4.4. Συνάρτηση επιθυμητής θερμοκρασίας

Η θερμοκρασία του συστήματος εκφράζεται μέσω του μέσου τετραγώνου των ταχυτήτων των N ατόμων. Δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$T = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{i=1}^N v_i^2 = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{i=1}^N (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \quad (4.77)$$

Η θερμοκρασία που επιθυμούμε να λάβει το σύστημα των σωματιδίων (*desired temperature*), ώστε η προσομοίωση MD να προχωρήσει, συμβολίζεται με T_d . Η συνθήκη επιθυμητής θερμοκρασίας ικανοποιείται στην περίπτωση κατά την οποία $|T - T_d| \leq 3$ K. Αν η παραπάνω προϋπόθεση δεν ικανοποιείται, τότε γίνεται ανάθεση νέων ταχυτήτων. Η επαναληπτική διαδικασία λαμβάνει τέλος όταν τελικώς η συνθήκη ικανοποιηθεί.

Καθώς εργαζόμαστε με αδιαστατοποιημένες εξισώσεις στην παρούσα περίπτωση, απαιτείται να αδιαστατοποιηθεί και η (4.77), η οποία τελικώς θα λάβει την παρακάτω μορφή:

$$T^* = \frac{1}{N} \frac{m_i^*}{3} \sum_{\substack{i=1 \\ j \neq i}}^N v_i^2 = \frac{1}{N} \frac{m_i^*}{3} \sum_{\substack{i=1 \\ j \neq i}}^N \left[(v_x^*)^2 + (v_y^*)^2 + (v_z^*)^2 \right] \quad (4.78)$$

4.4.5. Ανάθεση νέων ταχυτήτων

Η ανάθεση νέων ταχυτήτων είναι μία απαραίτητη διαδικασία που θα πρέπει να ακολουθηθεί σε περίπτωση που το κριτήριο επιθυμητής θερμοκρασίας, το οποίο περιγράφηκε παραπάνω, δεν ικανοποιηθεί έπειτα από την εκτέλεση μιας επανάληψης του αλγορίθμου Μοριακής Δυναμικής. Οι σχέσεις (4.79) και (4.80) χρησιμοποιούνται για την ανάθεση νέων ταχυτήτων, με τις νέες αυτές ταχύτητες να χρησιμοποιούνται σε επόμενες επιλύσεις του αλγορίθμου Verlet. Ουσιαστικά η (4.80) αποτελεί την ανεπτυγμένη μορφή της (4.79), με τις δύο εξισώσεις να διατυπώνονται ως εξής:

$$(\mathbf{u}_i)^{new} = (\mathbf{u}_i)^{old} \cdot \sqrt{\frac{T_d}{T}} \quad (4.79)$$

$$\begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}^{new} = \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}^{old} \cdot \sqrt{\frac{T_d}{T}} \quad (4.80)$$

Η αδιαστατοποιημένη μορφή των δύο παραπάνω εξισώσεων είναι η εξής:

$$(\mathbf{u}_i^*)^{new} = (\mathbf{u}_i^*)^{old} \cdot \sqrt{\frac{T_d}{T}} \quad (4.81)$$

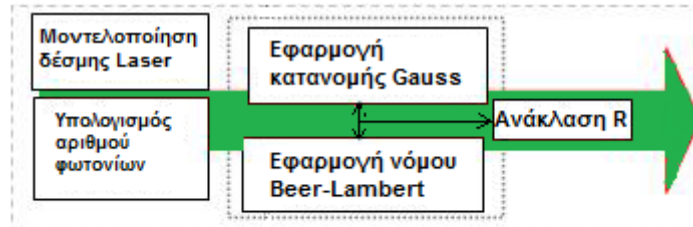
$$\begin{bmatrix} v_{ix}^* \\ v_{iy}^* \\ v_{iz}^* \end{bmatrix}^{new} = \begin{bmatrix} v_{ix}^* \\ v_{iy}^* \\ v_{iz}^* \end{bmatrix}^{old} \cdot \sqrt{\frac{T_d}{T}} \quad (4.82)$$

4.5. Μοντελοποίηση της ακτινοβολίας Laser

Πέρα από τη μοντελοποίηση των σωματιδίων και της κίνησης αυτών, στα πλαίσια της μελέτης του προβλήματος που εξετάζεται και πρόκειται να επιλυθεί με τη βοήθεια της μεθόδου Μοριακής Δυναμικής, η συνολική διαδικασία επίλυσης του προβλήματος απαιτεί και τη μοντελοποίηση της δέσμης Laser που πρόκειται να προσπέσει πάνω στην επιφάνεια του υπό φωτοαποδόμηση υλικού. Η προσέγγιση της ακτινοβολίας γίνεται, επί του παρόντος, κυρίως σε ενεργειακό επίπεδο. Η προσομοίωση της δέσμης γίνεται με βάση το διαχωρισμό σε *χρονική* και *χωρική προτυποποίηση*, δύο διαφορετικά επίπεδα (ή προφίλ) τα οποία ακολουθούν διαφορετικές κατανομές. Πιο συγκεκριμένα, επιλέγεται το χωρικό προφίλ μιας ακτίνας Laser να ακολουθεί κατανομή Gauss, ενώ το χρονικό προφίλ ακολουθεί ομοιόμορφη κατανομή. Η μοντελοποίηση της ακτινοβολίας συμπληρώνεται μέσω της εφαρμογής του νόμου *Beer-Lambert*, ο οποίος είναι εφικτό να εφαρμοστεί από τη στιγμή που στη μοντελοποίηση συμπεριλαμβάνονται η ανάκλαση της δέσμης, λόγω των οπτικών ιδιοτήτων του υλικού, αλλά και ο δείκτης αποβλίττων της δέσμης Laser (*Laser Beam Waste*). Επομένως, μπορούμε να πούμε ότι ολόκληρη

η διαδικασία μοντελοποίησης της δέσμης βασίζεται στη *χρονική προτυποποίηση*, στη *χωρική προτυποποίηση* και στην *ανάκλαση της δέσμης*.

Ο τρόπος με τον οποίο διασυνδέονται τα διάφορα στάδια μοντελοποίησης εμφανίζεται στο λογικό διάγραμμα του παρακάτω Σχήματος 4.13.:



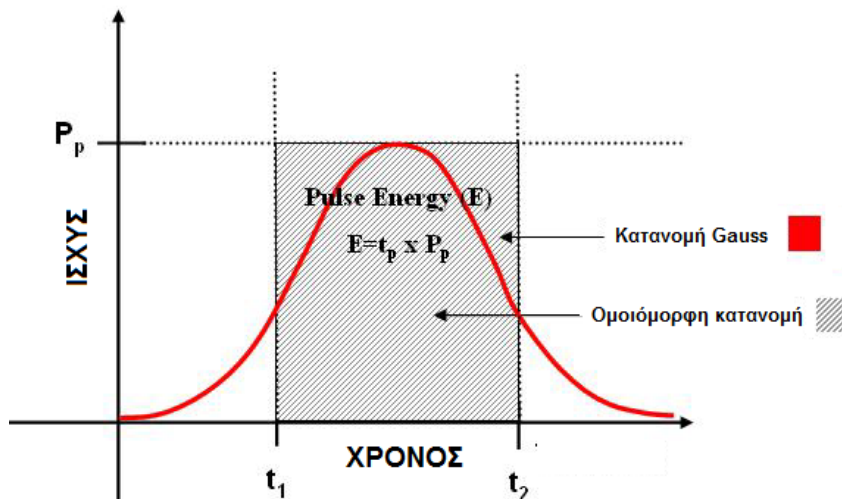
Σχήμα 4.13. Λογικό διάγραμμα περιγραφής της διαδικασίας μοντελοποίησης της ακτινοβολίας Laser.

4.5.1. Χρονική προτυποποίηση

Σε χρονικό επίπεδο, η κατανομή του προφίλ των βραχέων και υπερβραχέων παλμών Laser είναι η *Gauss*. Στην περίπτωση των Laser με διάρκεια παλμού της τάξης των nanosecond και picosecond, τα οποία εξετάζουμε επί του παρόντος, μελέτες όπως η [155] επιβεβαιώνουν την ακρίβεια αυτής της κατανομής (εκτός βέβαια πολύ μικρών παρεκκλίσεων) για μεγαλύτερες διάρκειες παλμών από την τάξη των femtoseconds.

Το μήκος του παλμού λαμβάνεται ως το «μέγιστο πλάτος στο ήμισυ του μεγίστου» (*Full Width at Half Maximum, FWHM*) ενός παλμού που παρουσιάζει κανονική κατανομή. Πάντως, όταν η ανεξάρτητη μεταβλητή είναι ο χρόνος, προτιμάται η δέσμη να παρουσιάζει ομοιόμορφη κατανομή στο χρόνο. Στο παρακάτω Σχήμα 4.14. εμφανίζεται η διαφορά μεταξύ κανονικής και ομοιόμορφης κατανομής. Στην περίπτωση της ομοιόμορφης κατανομής, η ενέργεια του παλμού υπολογίζεται απλά ως το εμβαδό της γραμμοσκιασμένης περιοχής (απλό γινόμενο της ισχύος επί το χρόνο), δηλαδή:

$$E = P_p \cdot t_p = P_p (t_2 - t_1) \quad (4.83)$$



Σχήμα 4.14. Σύγκριση της ομοιόμορφης χρονικής κατανομής με την κατανομή Gauss, για την ενέργεια της δέσμης Laser.

Αν $t_p = t_2 - t_1$ η χρονική διάρκεια του παλμού και $t_0 = \frac{t_1 + t_2}{2}$ το χρονικό κέντρο της διάρκειας του παλμού, τότε ο όρος για την κανονική (κατά Gauss) χρονική κατανομή της δέσμης δίνεται από την παρακάτω Σχέση 4.84.:

$$S_{p,Gauss} = \frac{1}{t_p \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{t-t_0}{t_p}\right)^2 \quad (4.84)$$

Υπάρχουν ορισμένες μελέτες, με χαρακτηριστικότερη την [157], οι οποίες, για λόγους απλοποίησης, χρησιμοποιούν την ομοιόμορφη κατανομή αντί της Gauss για τη χρονική προτυποποίηση της συμπεριφοράς των φωτονίων της δέσμης Laser. Η γραφική αναπαράσταση αυτής της κατανομής εμφανίζεται στο παραπάνω Σχήμα 4.13., στο ίδιο σύστημα αξόνων με την απεικόνιση της κατανομής Gauss. Η προσέγγιση της ομοιόμορφης κατανομής παρουσιάζει το σημαντικό πλεονέκτημα της μείωσης του υπολογιστικού φόρτου και της χρονικής διάρκειας των υπολογισμών, για αυτό το λόγο και θα εφαρμοστεί επί του παρόντος.

4.5.2. Χωρική προτυποποίηση κατά τον άξονα Z

Ο άξονας Z ακολουθεί τη διεύθυνση μετάδοσης των ακτίνων Laser, οι οποίες πρόκειται να προσπέσουν στο μεταλλικό στόχο. Για τη μοντελοποίηση της ακτινοβολίας, θα πρέπει να ληφθούν υπόψη τρία βασικά στοιχεία: το χαρακτηριστικό απώλειας – Laser Beam Waste, το φαινόμενο του Plasma Shielding και ο νόμος Beer-Lambert.

A. Χαρακτηριστικό απώλειας – Laser Beam Waste

Κατά τα γνωστά από τις βασικές αρχές της Οπτικής, η διάμετρος μιας ακτίνας (και κατ'επέκταση ολόκληρης της δέσμης) Laser δεν παραμένει σταθερή καθώς διεισδύει στο υλικό-στόχο, αλλά αυξάνεται σε σχέση με την εκάστοτε θέση του θεωρητικού επιπέδου που σχηματίζει κατά τη διεύθυνση μετάδοσης. Παρακάτω διατυπώνεται η σχέση που δίνει την ακτίνα της δέσμης Laser, r , συναρτήσει του βάθους διείσδυσης εντός του υλικού, z :

$$r(z) = r_{f_0} \left[1 + \left(M^2 \frac{\lambda (z + \delta_f)^2}{\pi \cdot r_{f_0}^2} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (4.85)$$

όπου M το μοριακό βάρος του υλικού, λ το μήκος κύματος της ακτινοβολίας, και r_{f_0} , δ_f αντίστοιχα η ακτίνα και η διάμετρος της δέσμης στο ουδέτερο επίπεδο, $z = 0$ (ακριβώς πάνω στην επιφάνεια του στόχου). Εάν ο λόγος $\frac{r(z)}{r_{f_0}}$ είναι κοντά στη μονάδα, ή, με άλλα λόγια, αν ο όρος εντός αγκύλων στην

(4.85) είναι κοντά στη μονάδα, η ακτίνα δε μεταβάλλεται σημαντικά ως προς την αρχική της τιμή, με αποτέλεσμα να μη χρειάζεται να χρησιμοποιηθεί ο παράγοντας απώλειας Laser Beam Waste. Επειδή η παρούσα μελέτη μας χρησιμοποιεί, κατά κύριο λόγο, διαστάσεις τάξης μεγέθους μερικών nm, ο παράγοντας αυτός δεν επηρεάζει τη συμπεριφορά της ακτινοβολίας και, επομένως, μπορεί να αμεληθεί.

B. Φαινόμενο του Plasma Shielding

Το συγκεκριμένο φαινόμενο, για το οποίο έχει ήδη γίνει εκτενής αναφορά στο Κεφάλαιο 2, είναι υπεύθυνο για την εξασθένηση της ακτινοβολίας του Laser πριν αυτή έρθει σε επαφή με το υλικό-στόχο. Λόγω της εξάτμισης σωματιδίων του υλικού, ήδη μετά από την επενέργεια του πρώτου παλμού Laser, αρχίζει να αναπτύσσεται ένα νέφος πλάσματος άνωθεν του στόχου, με το νέφος αυτό να θερμαίνεται και να διαστέλλεται από παλμό σε παλμό, δεσμεύοντας σε όλο και μεγαλύτερο βαθμό την ενέργεια του Laser.

Όπως έχει τονιστεί και στο Κεφάλαιο 2, η τιμή της έντασης της ακτινοβολίας που προσπίπτει στην επιφάνεια (surface) του στόχου, έπειτα από τη διέλευσή του διαμέσου του νέφους πλάσματος, πάχους $\Lambda(t)$, δίνεται από την ακόλουθη σχέση [26]:

$$I_s = I_0 \exp[-\Lambda(t)] \quad (4.86)$$

με τις τιμές I_0 , I_s να αντιπροσωπεύουν αντίστοιχα την ένταση της ακτινοβολίας πριν και μετά τη διέλευση από το νέφος πλάσματος. Προφανώς, πριν την επενέργεια του πρώτου παλμού Laser πάνω στην

επιφάνεια, το πάχος του νέφους είναι μηδενικό, με αποτέλεσμα να ισχύει $I_s = I_0$. Η εύρεση του πάχους του νέφους πλάσματος γίνεται εφικτή με τη βοήθεια της παρακάτω σχέσης:

$$\Lambda(t) = A \cdot \Delta z(t) + B \cdot E_a(t) \quad (4.87)$$

Όπου $\Delta z(t)$ το βάθος διείσδυσης ανά παλμό, $E_a(t)$ η ολική (μέχρι την εξεταζόμενη χρονική στιγμή) απορροφούμενη ενέργεια από το υλικό-στόχο, $A = \frac{\rho f(T_v)}{m}$ και $B = (\gamma - 1) \left. \frac{\partial f}{\partial T} \right|_{T_v} \cdot k^{-1}$, με τις ποσότητες A και B να εξαρτώνται προφανώς από τη θερμοκρασία εξάτμισης των σωματιδίων, T_v .

Γ. Νόμος Beer-Lambert

Ο πολύ διαδεδομένος, ειδικά στον τομέα της Οπτικής, νόμος των *Beer* και *Lambert* συσχετίζει την απορρόφηση της ακτινοβολίας με τις ιδιότητες του υλικού-στόχου, διαμέσου του οποίου διέρχεται η υπόψη ακτινοβολία. Η ένταση της ακτινοβολίας σε βάθος z συνδέεται με την ένταση στην επιφάνεια του στόχου ($z = 0$). Εκτός από το βάθος, η τελική τιμή της έντασης της ακτινοβολίας εντός του στόχου εξαρτάται και από το συντελεστή απορρόφησης για το εκάστοτε υλικό, β , οπότε η εμπειρική σχέση *Beer-Lambert* λαμβάνει την ακόλουθη μορφή:

$$I = I_s \exp(-\beta z) \quad (4.88)$$

Μία ιδιαίτερα διαδεδομένη τιμή για το συντελεστή απορρόφησης, όπως αυτή έχει προταθεί στη βιβλιογραφία [158], είναι τα 0.01 A^{-1} .

Η ενέργεια της ακτινοβολίας Laser γίνεται να εκφραστεί ως το γινόμενο της ενέργειας ενός φωτονίου επί το συνολικό αριθμό φωτονίων που περιλαμβάνει ένας παλμός Laser:

$$E_v = N_p E_p = N_p h\nu = N_p h \frac{c}{\lambda} \quad (4.89)$$

όπου E_v η ενέργεια ολόκληρου του παλμού, N_p ο αριθμός των φωτονίων που περιλαμβάνει, h η σταθερά του Planck, c η ταχύτητα του φωτός και λ το μήκος κύματος της ακτινοβολίας. Με δεδομένο ότι η ένταση I ενός παλμού είναι ουσιαστικά το πηλίκο της ενέργειάς του, E , προς το εμβαδό της ακτινοβολούμενης επιφάνειας, την οποία, χωρίς βλάβη της γενικότητας, μπορούμε να θεωρήσουμε κυκλική, με εμβαδό $\pi(r(z))^2$. Έχουμε λοιπόν διαδοχικά ότι:

$$I = I_s \exp(-\beta z) \Leftrightarrow \frac{E}{\pi(r(z))^2} = \frac{E_s}{\pi r_{fo}^2} \exp(-\beta z) \Leftrightarrow E = E_s \left(\frac{r(z)}{r_{fo}} \right)^2 \exp(-\beta z) \quad (4.90)$$

Αντικαθιστώντας τώρα την (4.89) στην (4.90) προκύπτουν τα εξής:

$$N_p E_p = P_L \delta t \left(\frac{r(z)}{r_{f0}} \right)^2 \exp(-\beta z) \Rightarrow N_p = \frac{P_L \delta t \lambda}{hc} \left(\frac{r(z)}{r_{f0}} \right)^2 \exp(-\beta z) \quad (4.91)$$

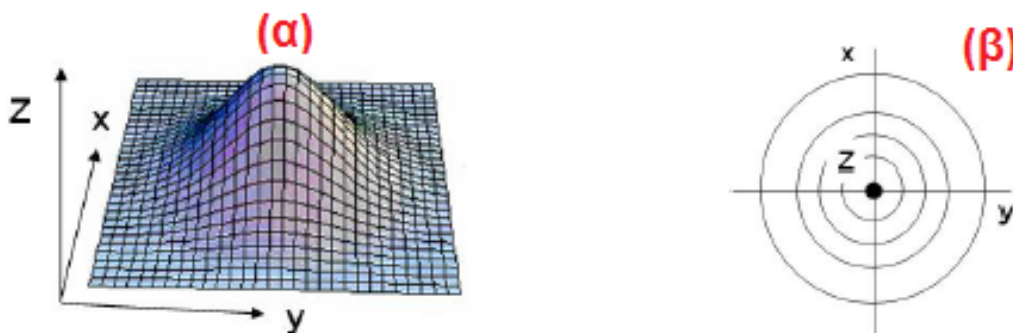
Όπως όμως έχουμε αναφέρει και παραπάνω, ο λόγος $\frac{r(z)}{r_{f0}}$ είναι σχεδόν ίσος με τη μονάδα, όταν αναφερόμαστε στην κλίμακα των νανομέτρων. Με βάση την παραπάνω πρόταση, η (4.91) μετασχηματίζεται σε μία σαφώς απλούστερη μορφή:

$$N_p = \frac{P_L \delta t \lambda}{hc} \exp(-\beta z) \quad (4.92)$$

η οποία εντέλει παρέχει το πλήθος των φωτονίων σε συνάρτηση με το βάθος, με γνωστά μεγέθη την ισχύ, τη διάρκεια παλμού και το μήκος κύματος της ακτινοβολίας.

4.5.3. Χωρική προτυποποίηση κατά το επίπεδο X-Y

Στο δισδιάστατο επίπεδο που ορίζεται από τους άξονες X και Y, η ενέργεια του Laser ακολουθεί κατανομή Gauss σε δύο διαστάσεις. Αυτό φαίνεται ξεκάθαρα με τη βοήθεια του παρακάτω Σχήματος 4.15.:

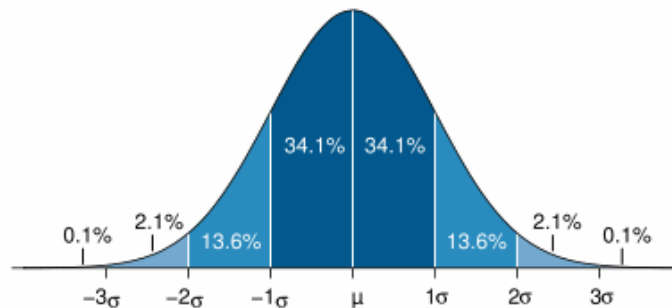


Σχήμα 4.15. (α) Τρισδιάστατη κατανομή Gauss, (β) Κάτοψη αυτής στο επίπεδο X-Y.

Για την περιγραφή της κατανομής Gauss στο επίπεδο X-Y, θα χρησιμοποιηθεί μία μεταβλητή δύο διαστάσεων, $f(x,y)$. Αυτή θα εξαρτάται από τις θέσεις πάνω στους άξονες x και y, τις μέσες τιμές μ_i και τις τυπικές αποκλίσεις σ_i σε κάθε έναν από τους άξονες, καθώς επίσης και από το τετράγωνο του συντελεστή συσχέτισης ρ :

$$f(x,y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y\sqrt{1-\rho^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2(1-\rho^2)} \left[\frac{(x-\mu_x)^2}{\sigma_x^2} - 2\rho \frac{(x-\mu_x)(y-\mu_y)}{\sigma_x\sigma_y} + \frac{(y-\mu_y)^2}{\sigma_y^2} \right] \right\} \quad (4.93)$$

Αν θεωρήσουμε ότι η γεωμετρία της ακτίνας Laser που αλληλεπιδρά με την επιφάνεια του στόχου στο επίπεδο $z = 0$ είναι ένας κύκλος με ακτίνα r_b , είναι προφανές ότι η τυπική απόκλιση σ είναι ίδια στους άξονες x και y , δηλαδή $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$. Επίσης, όπως παρατηρούμε και με τη βοήθεια του ακόλουθου Σχήματος 4.16., και κατά τα γνωστά από τη θεωρία Μετρήσεων Τεχνικών Μεγεθών, το 95.44% της ολικής ενέργειας του Laser βρίσκεται εντός εύρους 4σ γύρω από τη μέση τιμή της κατανομής Gauss. Αυτό το εύρος της τάξης του 4σ είναι μια καλή επιλογή που μπορεί να ληφθεί υπόψη στο πρόβλημά μας, προκειμένου να πετύχουμε μία σχετικά καλή ακρίβεια. Παρ'όλα αυτά, αν θέλουμε να αυξήσουμε ακόμα περισσότερο την ακρίβειά μας, μπορούμε εναλλακτικά να χρησιμοποιήσουμε ως εύρος το 6σ , γύρω από το οποίο βρίσκεται περίπου το 99.8% της ολικής ενέργειας του Laser.

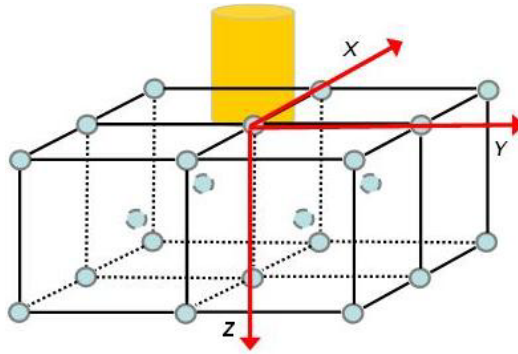


Σχήμα 4.16. Ποσοστιαία κατανομή του πλήθους τιμών που βρίσκονται γύρω από τη μέση τιμή μιας κατανομής Gauss.

Το πρόβλημα της ακρίβειας μπορεί να αντιμετωπιστεί αποτελεσματικά χρησιμοποιώντας μία παράμετρο ακρίβειας, έστω a_c , η οποία δίνει τις απαιτούμενες τιμές εάν πολλαπλασιαστεί με την τυπική απόκλιση:

$$a_c \sigma = 2r_b \Rightarrow \sigma = \frac{2}{a_c} r_b \quad (4.94)$$

Στο τρισδιάστατο σύστημα συντεταγμένων που ορίζουμε για το παρόν πρόβλημα, ως αρχή των αξόνων $(0,0,0)$ λαμβάνεται το κέντρο επίδρασης της ακτίνας του Laser και του υλικού. Κατά συνέπεια, θεωρούμε ότι το εστιακό επίπεδο βρίσκεται στην επιφάνεια του υλικού, όπως φαίνεται και στο παρακάτω Σχήμα 4.17.:

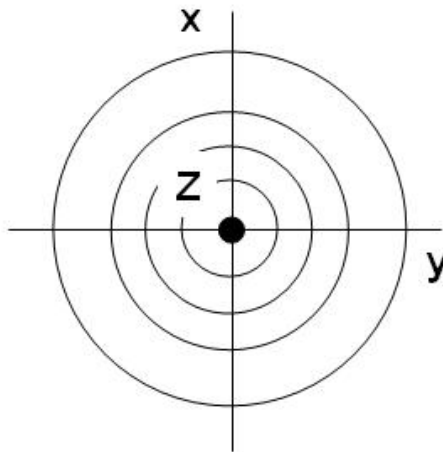


Σχήμα 4.17. Εστιακό επίπεδο ακτίνας και αρχή του συστήματος συντεταγμένων, για τη μέθοδο επίλυσης του παρόντος προβλήματος.

Για το παραπάνω σύστημα συντεταγμένων, το σημείο αναφοράς θα πρέπει να είναι το κέντρο της ακτίνας του Laser που επιδρά στο επίπεδο $X-Y$ του υλικού, για τη θέση $z = 0$, η οποία προφανώς αντιστοιχεί στην επιφάνεια του στόχου. Πρόκειται για μία συμφέρουσα επιλογή, η οποία εκμηδενίζει τις μέσες τιμές των θέσεων x και y , δηλαδή:

$$\mu_x = \mu_y = 0 \quad (4.95)$$

Για την περιγραφή της κατανομής Gauss σε δύο διαστάσεις, απαιτείται ο υπολογισμός του συντελεστή συσχέτισης ρ . Επειδή στο επίπεδο $X-Y$ το σχήμα της ακτινοβολίας λαμβάνεται κυκλικό, συμπεραίνουμε ότι δεν υπάρχει καθόλου συσχέτιση μεταξύ των μεταβλητών στους άξονες x και y , άρα $\rho = 0$. Σε αυτή την περίπτωση, η κατανομή Gauss, σε κάτοψη στο επίπεδο $X-Y$, παρουσιάζεται σχηματικά ως εξής:



Σχήμα 4.18. Κάτοψη της κατανομής Gauss στο επίπεδο $X-Y$, για συντελεστή συσχέτισης $\rho = 0$ μεταξύ των μεταβλητών x και y .

Με τη βοήθεια των παραδοχών και παρατηρήσεων απλοποίησης της (4.93), όπως επίσης και των σχέσεων (4.94) και (4.95), καταλήγουμε εντέλει σε μία απλούστερη σχέση περιγραφής της δισδιάστατης κατανομής Gauss:

$$f(x, y) = \frac{a_c^2}{8\pi r_b^2} \exp\left[-\frac{a_c^2}{8r_b^2}(x^2 + y^2)\right] \quad (4.96)$$

Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να δώσει, μέσω της ολοκλήρωσής της, την πιθανότητα να βρίσκεται ένα φωτόνιο στη θέση (x, y) . Η αντίστοιχη σχέση ολοκλήρωσης, για ακτίνα ατόμου r_a , είναι οι εξής:

$$J = \int_{x-r_a}^{x+r_a} \int_{y-r_a}^{y+r_a} f(x, y) dy dx \quad (4.97)$$

Η εύρεση μίας τελικής τιμής, ως αποτέλεσμα υπολογισμού του παραπάνω ολοκληρώματος, είναι μία εν γένει χρονοβόρα διαδικασία. Προκειμένου για την εξοικονόμηση χρόνου στη διαδικασία επίλυσης, χωρίς όμως να επηρεάζονται σημαντικά τα τελικά αποτελέσματα, επιλέγουμε την κανονικοποίηση της δισδιάστατης κατανομής Gauss. Σε αυτό το σημείο, σκοπεύουμε να υπολογίσουμε την πιθανότητα να υπάρχουν φωτόνια σε μία συγκεκριμένη θέση του X-Y επιπέδου. Με άλλα λόγια, θέλουμε να βρούμε το ποσοστό φωτονίων στην υπόψη θέση σε σχέση με ολόκληρο το X-Y επίπεδο προσομοίωσης. Για τον ολικό αριθμό φωτονίων, χρησιμοποιούμε τη σχέση (4.92), η οποία προκύπτει από την εφαρμογή του νόμου Beer-Lambert. Όσο για την πιθανότητα ύπαρξης φωτονίου στη θέση (x, y) , θα γίνει χρήση της παρακάτω έκφρασης:

$$\Pi(x-r_a \leq X \leq x+r_a, y-r_a \leq Y \leq y+r_a) \quad (4.98)$$

η οποία, σε κανονικοποιημένη μορφή, γίνεται ως εξής:

$$\Pi\left(\frac{x-r_a-\mu_x}{\sigma_x} \leq \frac{X-\mu_x}{\sigma_x} \leq \frac{x+r_a-\mu_x}{\sigma_x}, \frac{y-r_a-\mu_y}{\sigma_y} \leq \frac{Y-\mu_y}{\sigma_y} \leq \frac{y+r_a-\mu_y}{\sigma_y}\right) \quad (4.99)$$

Λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις (4.94) και (4.95), η (4.99) λαμβάνει την παρακάτω μορφή:

$$\Pi\left(a_c \frac{x-r_a}{2r_b} \leq a_c \frac{X}{2r_b} \leq a_c \frac{x+r_a}{2r_b}, a_c \frac{y-r_a}{2r_b} \leq a_c \frac{Y}{2r_b} \leq a_c \frac{y+r_a}{2r_b}\right) \quad (4.100)$$

Κατά συνέπεια, η πιθανότητα να βρίσκεται κάποιο φωτόνιο σε μία συγκεκριμένη θέση (x, y) πάνω στο δισδιάστατο επίπεδο X-Y, δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\begin{aligned} & \Pi\left(a_c \frac{x-r_a}{2r_b} \leq a_c \frac{X}{2r_b} \leq a_c \frac{x+r_a}{2r_b}, a_c \frac{y-r_a}{2r_b} \leq a_c \frac{Y}{2r_b} \leq a_c \frac{y+r_a}{2r_b}\right) = \\ & = \left(\Phi\left(a_c \frac{x+r_a}{2r_b}\right) - \Phi\left(a_c \frac{x-r_a}{2r_b}\right)\right) \left(\Phi\left(a_c \frac{y+r_a}{2r_b}\right) - \Phi\left(a_c \frac{y-r_a}{2r_b}\right)\right) \end{aligned} \quad (4.101)$$

όπου Φ η κανονικοποιημένη συνάρτηση αθροιστικής πιθανότητας (*cumulative probability function*).

4.5.4. Ανάκλαση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας

Από την ακτινοβολία που, έχοντας διέλθει από το νέφος πλάσματος, προσπίπτει πάνω στην επιφάνεια του στόχου, ένα ποσοστό ανακλάται, με αποτέλεσμα να επιδρούν στο υλικό λιγότερα φωτόνια από όσα παράγει το Laser. Ο δείκτης ανάκλασης R (Reflectivity Index) δίνει το ποσοστό της ανακλώμενης ακτινοβολίας, και εξαρτάται από το υλικό και το μήκος κύματος της ακτινοβολίας. Για παράδειγμα, στη βιβλιογραφία [159] αναφέρεται ότι ο συντελεστής ανάκλασης ακτινοβολίας Laser με μήκος κύματος 775 nm πάνω σε στόχο από σίδηρο (Fe) είναι ίσος με $R = 0.65$. Προφανώς, αν ο δείκτης ανάκλασης είναι R , τότε το ποσοστό της ακτινοβολίας που απορροφάται από το υλικό είναι ίσο με $1-R$.

4.5.5. Ολική εξίσωση ακτινοβολίας

Έστω S η ακτινοβολία που τελικώς προσπίπτει πάνω στο δοκίμιο-στόχο. Αυτή είναι το γινόμενο του ποσοστού απορροφούμενης ακτινοβολίας έπειτα από την ανάκλαση, $1-R$, επί τους ακόλουθους παράγοντες:

- Ενέργεια φωτονίων, λόγω του νόμου Beer-Lambert.
- Χρονική κατανομή.
- Χωρική κατανομή, λαμβάνοντας υπόψη την κατανομή Gauss και την εξίσωση του Laser Beam Waste.

Όπως έχουμε αναφέρει και παραπάνω, ο παράγοντας Laser Beam Waste, $\frac{r(z)}{r_{fo}}$, λαμβάνεται περίπου ίσος με τη μονάδα. Επίσης, η χωρική και χρονική κατανομή στην υπό μελέτη περίπτωση είναι η *Gauss*. Με τη βοήθεια των σχέσεων (4.84) και (4.96), καθώς επίσης και το νόμο Beer-Lambert (4.88), προκύπτει η ακόλουθη σχέση για την περιγραφή της ακτινοβολίας S :

$$S = (1-R) \left[\frac{P_L}{\delta t \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{t-t_0}{t_p}\right)^2 \exp(-\beta z) \right] \left[\frac{a_c^2}{8\pi(r(z))^2} \left(\frac{r(z)}{r_{fo}}\right)^2 \exp\left(-\frac{a_c^2}{8r(z)^2}(x^2+y^2)\right) \right] \quad (4.102)$$

Με βάση τις προαναφερθείσες υποθέσεις και παραδοχές, η εξίσωση που τελικώς παρέχει την απορροφούμενη ενέργεια από το υλικό αποτελεί ουσιαστικά μια απλοποιημένη μορφή της (4.102):

$$S = (1-R) \left[P_L \delta t \exp(-\beta z) \right] \left[\frac{a_c^2}{8\pi r_b^2} \exp\left(-\frac{a_c^2}{8r_b^2}(x^2+y^2)\right) \right] \quad (4.103)$$

Εντέλει, ο αριθμός των απορροφούμενων φωτονίων, N_{AP} , σε κάθε σημείο του κρυστάλλου, υπολογίζεται με τη βοήθεια της ακόλουθης Εξίσωσης, για τη διατύπωση της οποίας έχει προηγουμένως απαιτηθεί η ολοκλήρωση της κατανομής Gauss. Η (4.104) εξάγεται από τις (4.101) και (4.103):

$$N_{AP} = (1-R) [P_L \delta t \exp(-\beta z)] \left[\left(\Phi \left(a_c \frac{x+r_a}{2r_b} \right) - \Phi \left(a_c \frac{x-r_a}{2r_b} \right) \right) \left(\Phi \left(a_c \frac{y+r_a}{2r_b} \right) - \Phi \left(a_c \frac{y-r_a}{2r_b} \right) \right) \right] \quad (4.104)$$

4.6. Φόρτιση σωματιδίων

Στη φάση της φόρτισης των σωματιδίων του υλικού, αυτά απορροφούν την ενέργεια των φωτονίων της δέσμης *Laser*, με συνέπεια να αυξάνεται η ολική ενέργεια του συστήματος των σωματιδίων. Καθώς τα σωματίδια του κρυστάλλου απορροφούν φωτόνια, επέρχεται αύξηση της κινητικής ενέργειας των σωματιδίων, με άμεση συνέπεια την αύξηση της ταχύτητάς τους. Για αυτό το λόγο, μετά την επενέργεια του κάθε παλμού, θα πρέπει να υπολογιστούν οι καινούργιες ταχύτητες, κάνοντας ταυτόχρονα την παραδοχή ότι η δυναμική ενέργεια παραμένει σταθερή. Αυτή η παραδοχή δεν απέχει από την πραγματικότητα, καθώς η εξέταση της μεταβολής της κινητικής ενέργειας γίνεται σε ένα απειροελάχιστο χρονικό διάστημα, έστω dt . Αν ΔE_k η ενέργεια φωτονίων που απορροφάται από τα σωματίδια, αυτή θα ισούται με:

$$\Delta E_k = N_{AP} \cdot E_p = N_{AP} \cdot h \frac{c}{\lambda} \quad (4.105)$$

με το πλήθος απορροφούμενων φωτονίων, N_{AP} , να έχει υπολογιστεί παραπάνω, με τη βοήθεια της σχέσης (4.104).

Επειδή, στα πλαίσια της παρούσας μελέτης, θα εργαστούμε με *αδιαστατοποιημένα* μεγέθη, όπως άλλωστε υπαγορεύουν και οι απαιτήσεις της μεθόδου Μοριακής Δυναμικής, διαιρώντας την τιμή ΔE_k με την παράμετρο D του δυναμικού Morse θα προκύψει το επιθυμητό αδιαστατοποιημένο μέγεθος:

$$\Delta E_k^* = \frac{\Delta E_k}{D} \quad (4.106)$$

4.7. Αναπαράσταση της συμπεριφοράς των σωματιδίων

Σε αυτή τη φάση της ακολουθούμενης μεθοδολογίας MD, συγκρίνουμε το άθροισμα της κινητικής ενέργειας του σωματιδίου και της ενέργειας που απορροφήθηκε από αυτό, με την ενέργεια συνοχής της κάθε σωματιδιακής μονάδας. Αν το άθροισμα είναι μεγαλύτερο από την ενέργεια συνοχής, τότε το σωματίδιο απομακρύνεται από τον κρύσταλλο. Σε αντίθετη περίπτωση, η ταχύτητα του σωματιδίου αυξάνεται αλλά το σωματίδιο παραμένει στο bulk υλικό.

Μετά την εξισορρόπηση του συστήματος, η ενέργεια που μεταφέρεται στο υλικό από τα φωτόνια της ακτινοβολίας απορροφάται από τα σωματίδια του στόχου. Με τη βοήθεια του κριτηρίου ενέργειας απομάκρυνσης, διερευνούμε ποια σωματίδια έχουν αποκτήσει εκείνο το ποσό ενέργειας που τους επιτρέπει να μεταβούν σε άλλη κατάσταση. Όσα σωματίδια έχουν μεταπέσει σε αέρια φάση απομακρύνονται από το κυρίως υλικό, άρα και από τον όγκο προσομοίωσης. Οι απαιτούμενοι υπολογισμοί για να εξαγάγουμε τα αντίστοιχα συμπεράσματα απλοποιούνται σημαντικά λόγω του γεγονότος ότι η μεταβλητή του χρόνου είναι ανεξάρτητη. Οι τιμές που λαμβάνει ο χρόνος ξεκινούν από το πρώτο χρονικό βήμα της MD προσομοίωσης και καταλήγουν στο τελευταίο.

Η διάρκεια της ακτινοβολίας του Laser ελέγχεται μέσω ενός βρόχου (loop), μέσω του οποίου εξασφαλίζεται ότι θα εκτελεστεί ένας καινούργιος κύκλος προσομοίωσης σε περίπτωση που δεν έχει παρέλθει το 100% του καθοριζόμενου χρόνου προσομοίωσης. Σε όσα σωματίδια δεν έχουν απομακρυνθεί από το στόχο, υπολογίζονται οι καινούργιες ταχύτητες και εκτελείται μία νέα επανάληψη της διαδικασίας προσομοίωσης.

4.7.1. Κριτήριο απομάκρυνσης σωματιδίων

Η ενέργεια συνοχής, με την οποία θα συγκριθεί το άθροισμα της κινητικής ενέργειας του σωματιδίου και της ενέργειας που απορροφήθηκε από αυτό, είναι ένα πολύ σημαντικό μέγεθος για τη Μοριακή Δυναμική Ανάλυση, καθώς προσδιορίζει πόση ενέργεια μπορεί να απορροφήσει κάθε σωματίδιο του στόχου. Σε μία σειρά από μελέτες που χρησιμοποιούν MD ανάλυση, το βασικό πρόβλημα που ανακύπτει είναι η εξάρτηση της τιμής της ενέργειας συνοχής από τον αριθμό σωματιδίων που περιλαμβάνει ο κρύσταλλος, όταν αναφερόμαστε σε νανοδομές. Για την απλούστευση της διαδικασίας, χρησιμοποιούμε την τιμή $C = -6.82 \text{ eV}$ που αναφέρει η βιβλιογραφία για το υλικό *μολυβδαίνιο* (Mo), όσον αφορά όμως το *μακροσκοπικό* επίπεδο. Το Mo θα χρησιμοποιηθεί κατά κόρον στις πειραματικές μελέτες που θα διεξαγάγουμε στη συνέχεια.

Στα πλαίσια του κριτηρίου της ενέργειας συνοχής, θα ισχύουν οι παρακάτω δύο συνθήκες:

- Αν $|C| \leq \Delta E_{K,i} + K_i$, τότε έχουμε *αφαίρεση ατόμου*. (4.107)

- Αν $|C| > \Delta E_{K,i} + K_i$ τότε *υπολογίζονται νέες ταχύτητες*. (4.108)

4.7.2. Υπολογισμός νέων ταχυτήτων

Στην περίπτωση κατά την οποία ισχύει η συνθήκη που περιγράφεται από την ανίσωση (4.108), υπολογίζονται νέες ταχύτητες στα σωματίδια αφότου έχει επιδράσει η ακτινοβολία Laser. Ο λόγος για τον οποίο επιβάλλεται να προχωρήσουμε σε μία τέτοια ενέργεια είναι το γεγονός ότι τα φωτόνια της ακτινοβολίας αυξάνουν την κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων της εξωτερικής στιβάδας του ατόμου, ενώ με τη σειρά της αυξάνεται και η κινητική ενέργεια του πυρήνα. Αφού πλέον ολόκληρο το άτομο παρουσιάζει μεγαλύτερη κινητική ενέργεια από ό,τι πριν την επενέργεια του κάθε παλμού Laser, είναι προφανές ότι η ταχύτητα του ατόμου αυξάνεται και επομένως θα πρέπει να επαναυπολογιστεί.

Η αύξηση της κινητικής ενέργειας των ατόμων, αμέσως μετά την επενέργεια του παλμού, δε συνεπάγεται και αύξηση της δυναμικής ενέργειας, καθώς οι θέσεις των ατόμων παραμένουν σταθερές. Οπότε, για κάθε άτομο i , η νέα κινητική ενέργεια θα είναι ουσιαστικά η αρχική κινητική ενέργεια προσαυξημένη κατά μία ποσότητα $\Delta E_{K,i}^{(R)}$, η οποία αναπαριστά την πρόσθετη ενέργεια από τα φωτόνια ενέργειας. Η διαδικασία αυτή θα εφαρμόζεται για κάθε απαραίτητη επανάληψη R :

$$K_i^{(R+1)} = K_i^{(R)} + \Delta E_{K,i}^{(R)} \quad (4.109)$$

Η νέα ταχύτητα θα προκύψει με επίλυση της (4.109) ως προς την ταχύτητα του σωματιδίου:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m_i \left(v_i^{(R+1)} \right)^2 &= \Delta E_{K,i}^{(R)} + \frac{1}{2} m_i \left(v_i^{(R)} \right)^2 \Rightarrow \\ \Rightarrow v_i^{(R+1)} &= \sqrt{\frac{2 \left(\Delta E_{K,i}^{(R)} + K_i^{(R)} \right)}{m_i}} = \sqrt{\frac{2 \Delta E_{K,i}^{(R)}}{m_i} + \left(v_i^{(R)} \right)^2} \end{aligned} \quad (4.110)$$

Η παραπάνω σχέση αδιαστατοποιείται και λαμβάνει τελικώς την ακόλουθη μορφή:

$$\left(v_i^{(R+1)} \right)^* = \sqrt{\frac{2 \left(\Delta E_{K,i}^{(R)} + K_i^{(R)} \right)}{m_i^*}} = \sqrt{\frac{2 \Delta E_{K,i}^{(R)}}{m_i^*} + \left(v_i^{(R)*} \right)^2} \quad (4.111)$$

4.7.3. Διατύπωση σχέσεων Leapfrog Verlet για θέσεις, ταχύτητες και επιταχύνσεις

Ο αλγόριθμος βατραχοδρασκελισμών Verlet επαναλαμβάνεται για όσο διαρκεί η ακτινοβολία Laser, σε κάθε ορισμένο χρονικό βήμα δt . Όλη η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι τελικώς να επέλθει νέα ισορροπία στο σύστημα. Οι εξισώσεις που περιγράφουν τον αλγόριθμο υπολογισμού των επιθυμητών μεγεθών κατά τη $n+1$ (καινούργια) επανάληψη είναι οι εξής:

$$v_{n+1/2}^{(R+1)} = v_{n-1/2}^{(R+1)} + a_n^{(R+1)} \delta t \quad (4.112)$$

$$x_{n+1}^{(R+1)} = x_n^{(R+1)} + v_n^{(R+1)} \delta t \quad (4.113)$$

όπου $x_n^{(R+1)}$, $a_n^{(R+1)}$ αντίστοιχα η θέση και η επιτάχυνση τη χρονική στιγμή n , $v_{n+\frac{1}{2}}^{(R+1)}$ η ταχύτητα τη χρονική στιγμή $n + \frac{1}{2}$ και δt το χρονικό βήμα.

Για την περίπτωση τρισδιάστατου προβλήματος, οι (4.112) και (4.113) μπορούν να μετασχηματιστούν στην ακόλουθη τανυστική μορφή:

$$\begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_{n+\frac{1}{2}}^{(R+1)} = \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_{n-\frac{1}{2}}^{(R+1)} + \begin{bmatrix} a_{ix} \\ a_{iy} \\ a_{iz} \end{bmatrix}_n^{(R+1)} \cdot \delta t \quad (4.114)$$

$$\begin{bmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{bmatrix}_{n+1}^{(R+1)} = \begin{bmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{bmatrix}_n^{(R+1)} + \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_n^{(R+1)} \cdot \delta t \quad (4.115)$$

Όπως τονίσαμε και σε προηγούμενο Εδάφιο, δεν είναι εφικτός ο ταυτόχρονος υπολογισμός της δυναμικής και της κινητικής ενέργειας, επειδή οι θέσεις είναι γνωστές στις χρονικές στιγμές $n, n+1, n+2$ κ.ο.κ., ενώ οι ταχύτητες στις χρονικές στιγμές $n - \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}, n + \frac{3}{2}$ κ.ο.κ.. Για να ξεπεραστεί αυτή η δυσκολία που παρουσιάζεται στην επίλυση του προβλήματος, κρίνεται αναγκαία η διατύπωση μίας επιπλέον σχέσης, μέσω της οποίας θα υπολογίζονται, στις χρονικές στιγμές $n, n+1, n+2, \dots$, οι ταχύτητες των σωματιδίων που δεν έχουν απομακρυνθεί από το κυρίως υλικό:

$$v_n^{(R+1)} = \frac{v_{n+\frac{1}{2}}^{(R+1)} + v_{n-\frac{1}{2}}^{(R+1)}}{2} \quad (4.116)$$

Και σε τρισδιάστατη τανυστική μορφή:

$$\begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_n^{(R+1)} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_{n+\frac{1}{2}}^{(R+1)} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_{n-\frac{1}{2}}^{(R+1)} \quad (4.117)$$

Ο υπολογισμός της επιτάχυνσης απαιτεί αρχικά τον υπολογισμό της *δύναμης*, από την οποία θα εξαχθεί τελικώς η επιτάχυνση μέσω του δεύτερου νόμου του Newton. Η συνολική δύναμη που ασκείται στο κάθε άτομο ισούται με το άθροισμα όλων των δυνάμεων από τα γειτονικά άτομα:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij}^{(R+1)} &= \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{u}^{(R+1)}_i - \mathbf{u}^{(R+1)}_j}{r_{ij}^{(R+1)}} \frac{\partial}{\partial r} P_i(r^{(R+1)})_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{u}^{(R+1)}_i - \mathbf{u}^{(R+1)}_j}{r_{ij}^{(R+1)}} f_{ij}^{(R+1)} \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathbf{F}_{ij}^{(R+1)} &= \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[x_j^{(R+1)} - x_i^{(R+1)}, y_j^{(R+1)} - y_i^{(R+1)}, z_j^{(R+1)} - z_i^{(R+1)} \right] \begin{bmatrix} \mathbf{i} \\ \mathbf{j} \\ \mathbf{k} \end{bmatrix} \frac{f_{ij}^{(R+1)}}{r_{ij}^{(R+1)}} \end{aligned} \quad (4.118)$$

Οι επιθυμητές τιμές της δύναμης κατά τους τρεις άξονες x, y, z δίνονται από την ακόλουθη σχέση:

$$\begin{bmatrix} f_{ix} \\ f_{iy} \\ f_{iz} \end{bmatrix}^{(R+1)} = 2aD \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \begin{bmatrix} x_j - x_i \\ y_j - y_i \\ z_j - z_i \end{bmatrix}^{(R+1)} \frac{\left[-\exp\left(-2a\left(r_{ij}^{(R+1)} - r_0\right)\right) + \exp\left(2a\left(r_{ij}^{(R+1)} - r_0\right)\right) \right]}{\sqrt{\left(x_j^{(R+1)} - x_i^{(R+1)}\right)^2 + \left(y_j^{(R+1)} - y_i^{(R+1)}\right)^2 + \left(z_j^{(R+1)} - z_i^{(R+1)}\right)^2}} \quad (4.119)$$

Με τη βοήθεια του 2^{ου} νόμου του Newton υπολογίζεται η νέα επιτάχυνση:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{a_i}^{(R+1)} &= \frac{\mathbf{F}_{ij}^{(R+1)}}{m_i} = \frac{1}{m_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{u}^{(R+1)}_i - \mathbf{u}^{(R+1)}_j}{r_{ij}^{(R+1)}} \frac{\partial}{\partial r} P_i(r^{(R+1)})_{r_{ij}^{(R+1)}} \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathbf{r}_{a_i}^{(R+1)} &= \frac{1}{m} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[x_j^{(R+1)} - x_i^{(R+1)}, y_j^{(R+1)} - y_i^{(R+1)}, z_j^{(R+1)} - z_i^{(R+1)} \right] \begin{bmatrix} \mathbf{i} \\ \mathbf{j} \\ \mathbf{k} \end{bmatrix} \frac{f_{ij}^{(R+1)}}{r_{ij}^{(R+1)}} \end{aligned} \quad (4.120)$$

Και σε τρισδιάστατη μορφή:

$$\begin{bmatrix} a_{ix} \\ a_{iy} \\ a_{iz} \end{bmatrix}^{(R+1)} = \frac{1}{m_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \begin{bmatrix} x_j - x_i \\ y_j - y_i \\ z_j - z_i \end{bmatrix}^{(R+1)} \frac{f_{ij}^{(R+1)}}{r_{ij}^{(R+1)}} \quad (4.121)$$

Οι νέες ταχύτητες και θέσεις (υπολογιζόμενες κατά τη $R+1$ επανάληψη) των σωματιδίων που δεν έχουν απομακρυνθεί από τον κρύσταλλο θα υπολογιστούν τώρα με βάση τις αντίστοιχες αδιαστατοποιημένες εξισώσεις Verlet:

$$\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}^{*(R+1)} = \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}}^{*(R+1)} + \mathbf{a}_n^{*(R+1)} \delta t^* \quad (4.122)$$

$$\mathbf{x}_{n+1}^{*(R+1)} = \mathbf{x}_n^{*(R+1)} + \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}^{*(R+1)} \delta t^* \quad (4.123)$$

$$\mathbf{v}_n^{*(R+1)} = \frac{\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}^{*(R+1)} + \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}}^{*(R+1)}}{2} \quad (4.124)$$

Η δύναμη μπορεί να υπολογιστεί με τη βοήθεια των ακόλουθων αδιαστατοποιημένων εξισώσεων:

$$f_i^{*(R+1)} = 2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[-\exp\left(2\left(r_{ij}^{*(R-1)} - r_0^*\right)\right) + 2 \exp\left(2\left(r_{ij}^{*(R-1)} - r_0^*\right)\right) \right] \quad (4.125)$$

$$\begin{bmatrix} f_{ix} \\ f_{iy} \\ f_{iz} \end{bmatrix}^{*(R+1)} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \begin{bmatrix} x_j - x_i \\ y_j - y_i \\ z_j - z_i \end{bmatrix}^{*(R+1)} \frac{f_{ij}^{*(R+1)}}{r_{ij}^{*(R+1)}} = 2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \begin{bmatrix} x_j - x_i \\ y_j - y_i \\ z_j - z_i \end{bmatrix}^{*(R+1)} \frac{\left[-\exp\left(2\left(r_{ij}^{*(R-1)} - r_0^*\right)\right) + 2 \exp\left(2\left(r_{ij}^{*(R-1)} - r_0^*\right)\right) \right]}{\sqrt{\left(x_i^{*(R+1)} - x_j^{*(R+1)}\right)^2 + \left(y_i^{*(R+1)} - y_j^{*(R+1)}\right)^2 + \left(z_i^{*(R+1)} - z_j^{*(R+1)}\right)^2}} \quad (4.126)$$

Τέλος, από την (4.126) και το δεύτερο νόμο του Newton εξάγεται η επιτάχυνση:

$$\begin{bmatrix} a_{ix} \\ a_{iy} \\ a_{iz} \end{bmatrix}^{*(R+1)} = \frac{1}{m} \begin{bmatrix} f_{ix} \\ f_{iy} \\ f_{iz} \end{bmatrix}^{*(R+1)} = \frac{2}{m} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\left[-\exp\left(2\left(r_{ij}^{*(R-1)} - r_0^*\right)\right) + 2 \exp\left(2\left(r_{ij}^{*(R-1)} - r_0^*\right)\right) \right]}{\sqrt{\left(x_i^{*(R+1)} - x_j^{*(R+1)}\right)^2 + \left(y_i^{*(R+1)} - y_j^{*(R+1)}\right)^2 + \left(z_i^{*(R+1)} - z_j^{*(R+1)}\right)^2}} \quad (4.127)$$

4.8. Εύρεση νέων μονάδων μέτρησης μεγεθών κατόπιν αδιαστατοποίησης

Η επιλογή των μονάδων μέτρησης για τα μεγέθη που μας ενδιαφέρουν, είτε σχετίζονται με τα δεδομένα του προβλήματος, είτε τις ενδιάμεσες υπολογιζόμενες ποσότητες, είτε με τα τελικά αποτελέσματα, είναι ένα ιδιαίτερα βασικό ζήτημα που πρέπει να ληφθεί υπόψη στα πλαίσια της μοντελοποίησης της ακτινοβόλησης υλικών με Laser και της εξέλιξης της φωτοαποδόμησής τους. Στα προηγούμενα Εδάφια έχουμε κάνει λόγο για διάφορες τυπικές σχέσεις αδιαστατοποίησης, οι οποίες μπορούν να χρησιμοποιηθούν από διάφορους μελετητές σε μία σειρά από κώδικες που αποσκοπούν στην περιγραφή του φαινομένου της φωτοαποδόμησης, και να τροποποιηθούν ανάλογα με το υπολογιστικό περιβάλλον (π.χ. γλώσσα προγραμματισμού σε H/Y) της αρεσκείας του κάθε μελετητή. Σε αυτή την Υποενότητα θα παραθέσουμε μία σειρά από σχετικά απλές σχέσεις αδιαστατοποίησης, τις οποίες θα χρησιμοποιήσουμε προκειμένου να εισαγάγουμε τα επιθυμητά μεγέθη στον κώδικα προσομοίωσης σε γλώσσα προγραμματισμού MATLAB, τον οποίο θα αναπτύξουμε στο Κεφάλαιο 5.

Οι λόγοι που υπαγορεύουν αδιαστατοποίηση, αντίθετα με την επιλογή των μονάδων SI για την πραγματοποίηση της ανάλυσής μας (αν και κάτι τέτοιο θα μπορούσε να γίνει χωρίς πρόβλημα, εφόσον προσεχθούν πλήρως οι μονάδες μέτρησης – θεμελιώδεις ή παράγωγες – αλλά και οι αριθμητικές τιμές κάθε επιθυμητής ποσότητας), είναι πολλοί. Ο πρώτος έχει να κάνει με τη χρήση μονάδων που δεν απέχουν σε μεγάλο βαθμό από την κλίμακα που χαρακτηρίζει τη μελέτη μας. Ο δεύτερος σχετίζεται με τις πολύ μικρές τιμές των μεγεθών σε ατομική κλίμακα, οι οποίες είναι σαφώς μικρότερες από αυτές που χρησιμοποιούνται στο μακρόκοσμο. Με άλλα λόγια, είναι λογικό να επιθυμούμε να επιλέξουμε μονάδες μέτρησης που βρίσκονται αρκετές τάξεις μεγέθους κάτω από τις θεμελιώδεις μονάδες που χαρακτηρίζουν το μακρόκοσμο (όπως π.χ. m για το μήκος και kg για τη μάζα), από τη στιγμή που τα φαινόμενα που

θέλουμε να μελετήσουμε υπολογιστικά εκτυλίσσονται κατά κύριο λόγο σε *νανοκλίμακα*, με τις διατομικές αποστάσεις – για παράδειγμα – να είναι συνήθως της τάξης των μερικών *Angstrom* (με $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$), και τις μάζες των ατόμων (σωματιδίων) να είναι γύρω στις 25 τάξεις μεγέθους μικρότερες του 1 kg. Τέλος, στην προσπάθειά μας να μπορούμε να περιγράψουμε ένα μεγάλο εύρος προβλημάτων χωρίς να αυξήσουμε σε μεγάλο βαθμό την πολυπλοκότητα του μοντέλου, επιλέγουμε τις αδιάστατες μονάδες για την ανάπτυξη του κώδικα, και, στη συνέχεια, τις μετασχηματίζουμε στις φυσικές μονάδες που μας ενδιαφέρουν, εφόσον κάτι τέτοιο κριθεί αναγκαίο από την πλευρά μας.

Προκειμένου να γίνει εφικτή και αξιόπιστη η αξιολόγηση των αποτελεσμάτων, θα πρέπει η αδιαστατοποίησή μας να γίνει με βάση μία ή περισσότερες θεμελιώδεις μονάδες που θα μας είναι *εύχρηστες* κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Όπως είδαμε νωρίτερα μέσα στο κεφάλαιο, χρησιμοποιούμε την έκφραση της συνάρτησης δυναμικού *Morse* προκειμένου να υπολογίσουμε τις δυνάμεις αλληλεπίδρασης μεταξύ των ατόμων, που απέχουν μεταξύ τους αποστάσεις λίγων \AA . Επίσης, η ενέργεια των φωτονίων που περικλείει μέσα της η δέσμη Laser, και η οποία εκφράζεται σε *eV*, είναι μια ποσότητα-κλειδί στην ανάλυση που έχουμε σκοπό να κάνουμε στο επόμενο Κεφάλαιο, οπότε και θα αναπτύξουμε τον κώδικα σε MATLAB. Οι παραπάνω λόγοι είναι αρκετά ισχυροί ώστε να μας οδηγήσουν στο να επιλέξουμε τις μονάδες *μήκους* και *ενέργειας* ως *θεμελιώδεις* για το μοντέλο μας. Πάνω σε αυτά τα μεγέθη, τα υπόλοιπα που θέλουμε να χρησιμοποιήσουμε θα χαρακτηρίζονται από *παράγωγες* μονάδες μέτρησης, οι οποίες θα εξαρτώνται από αυτές τις δύο θεμελιώδεις μονάδες.

Οι χρησιμοποιούμενες μονάδες για το μήκος και την ενέργεια, με βάση τα όσα ελέχθησαν παραπάνω, θα είναι οι εξής:

$$[L] = 10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ \AA} \quad (4.128)$$

$$[E] = 1 \text{ eV} = 1.602176 \cdot 10^{-19} \text{ J} \quad (4.129)$$

Με βάση την έκφραση του δυναμικού Morse, μπορούμε να οδηγηθούμε στο συμπέρασμα ότι η διαίρεση της (4.129) με την (4.128) κατά μέλη εξάγει τη μονάδα μέτρησης της *δύναμης* *F*, που θα μας χρησιμεύσει στους μετέπειτα υπολογισμούς MD που θα διεξαγάγουμε:

$$[F] = [a][D] = \frac{[E]}{[L]} = \frac{\text{eV}}{\text{\AA}} = \frac{1.602176 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{10^{-10} \text{ m}} = 1.602176 \cdot 10^{-9} \text{ N}$$

(4.130)

Όσον αφορά τη μάζα, μπορούμε να λάβουμε υπόψη το γεγονός ότι ο κώδικας που θέλουμε να αναπτύξουμε βασίζεται στην ακτινοβολήση, εγχάραξη (*scribing*) και φωτοαποδόμηση τεμαχίου-στόχου από το υλικό *μολυβδαίνιο* (Mo), του οποίου η (μέση) ατομική μάζα ισούται με 95.94 amu. Η επιλογή αυτής της τιμής για την αναπαράσταση της μάζας των ατόμων του Mo μπορεί να κριθεί αποδεκτή, εάν

υποτεθεί ότι, μέσα στο σύστημα της προσομοίωσης, εμφανίζονται όλα τα ισότοπα του Mo, στα ίδια ποσοστά (ανά ισότοπο) με τα οποία απαντώνται και στη φύση. Μία πιθανή προσέγγιση κατά την οποία θα θεωρούσαμε τη μάζα των ατόμων Mo ίση με αυτή του συνηθέστερου ισότοπου του, δηλαδή του ^{98}Mo (με ατομική μάζα 97.91 amu), δε θα μπορούσε να θεωρηθεί αποδεκτή, γιατί το ποσοστό εμφάνισης αυτού του ισότοπου αντιπροσωπεύει μόνο το 24.14% του συνολικού Mo που υπάρχει στη φύση [Πηγή: http://en.wikipedia.org/wiki/Isotopes_of_molybdenum], με δεδομένο ότι υπάρχουν και άλλα ισότοπα του Mo με πιθανότητα εμφάνισης ιδιαίτερα μεγάλη (μεταξύ 15-20%), όπως η ίδια πηγή μαρτυρά.

Από τη στιγμή που μας ενδιαφέρει, επί του παρόντος, η μάζα του Mo, και γενικότερα, σε κάθε μοντέλο, ανάλογα με το υλικό, θα μας ενδιαφέρει η μάζα μόνο ενός υλικού και όχι περισσότερων, με το σκεπτικό ότι ο κώδικας που θέλουμε να αναπτύξουμε αφορά αμιγή υλικά (κυρίως μέταλλα, ίσως και υλικά με χαρακτηριστικά μεταξύ μετάλλων και ημιαγωγών, όπως το Al), η αδιαστατοποίηση της μάζας επί του παρόντος μπορεί να γίνει μόνο για το Mo. Επομένως, θα ισχύει ότι:

$$[m] = \frac{[M]}{[M_r]} = \frac{95.94 \cdot 10^{-26}}{6.022} = 1.5932 \cdot 10^{-25} \text{ kg} \quad (4.131)$$

Έχοντας στο νου μας ότι $[a] = \frac{[F]}{[m]}$, καθώς επίσης και το γεγονός ότι η επιτάχυνση a αποτελεί τη

δεύτερη παράγωγο της θέσης, έστω r , ως προς το χρόνο, μπορούμε να υπολογίσουμε τη μονάδα μέτρησης του χρόνου με τη βοήθεια της ακόλουθης Σχέσης (4.132):

$$[a] = [\ddot{r}] = \frac{[F]}{[m]} = \frac{[L]}{[t]^2} \Rightarrow [t] = \sqrt{\frac{[L][m]}{[F]}} = \sqrt{\frac{10^{-10} \cdot 1.5392 \cdot 10^{-25}}{1.602 \cdot 10^{-9}}} = \sqrt{0.9608 \cdot 10^{-26}} \text{ s} = 0.9802 \cdot 10^{-13} \text{ s} = 98.02 \text{ fs} \quad (4.132)$$

Ένα ακόμα ιδιαίτερα σημαντικό μέγεθος, που θα μας χρησιμεύσει σε μεγάλο βαθμό στην ανάπτυξη του υπολογιστικού κώδικα, είναι η θερμοκρασία, καθώς με βάση αυτή θα μπορέσουμε να επιλέξουμε τις αρχικές ταχύτητες των ατόμων του δοκιμίου. Εμείς μπορούμε να βασιστούμε πάνω στην ακόλουθη σχέση, την οποία έχει προτείνει ο Rapaport στη βιβλιογραφία [113], η οποία συσχετίζει την κινητική ενέργεια κάθε ατόμου σε ένα σύστημα αποτελούμενο από N άτομα, με τη θερμική ενέργεια που εξαρτάται από τη θερμοκρασία και τη σταθερά του Boltzmann. Για αριθμό διαστάσεων $d = 3$, που θα χρησιμοποιήσουμε και στο παρόν μας πρόβλημα, θα ισχύουν τα εξής:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{2} k_B T &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} m v_i^2 \right) \Leftrightarrow T = \frac{m}{k_B d N} \sum_{i=1}^N (v_i^2) \stackrel{d=3}{=} \frac{m v_{rms}^2}{3 k_B N} \Rightarrow \\ \Rightarrow [T] &= \frac{[v]^2 [m]}{[k_B]} = \frac{[L]^2 [m]}{[t]^2 [k_B]} = \frac{[L]^2 [\mathcal{M}]}{[L][\mathcal{M}][F]^{-1} [k_B]} = 11604.505 \text{ K} \end{aligned} \right\} \quad (4.133)$$

4.9. Ανακεφαλαίωση της διαδικασίας υπολογιστικής επίλυσης με χρήση MD

Οι υπολογιστικές σχέσεις που έχουν διατυπωθεί στα πλαίσια του Κεφαλαίου 4, είναι απαραίτητο να εφαρμοστούν προκειμένου να περαιωθούν με επιτυχία τα τέσσερα βήματα της γενικής μεθοδολογίας επίλυσης ενός κώδικα MD, προκειμένου να μπορεί το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης να αναπαρασταθεί με τη μέγιστη δυνατή αξιοπιστία. Για λόγους ανακεφαλαίωσης αλλά και πιο συγκεντρωτικής παράθεσης, εμφανίζονται παρακάτω, σε συνοπτική μορφή, τα τέσσερα γενικά βήματα που θα πρέπει να ακολουθηθούν, ένα προς ένα, στα πλαίσια της μεθοδολογίας, ώστε να επιτευχθούν οι σκοποί που έχουμε θέσει στα πλαίσια της υπολογιστικής προσομοίωσης. Αυτά τα τέσσερα βήματα είναι τα εξής:

Βήμα 1^ο: Προετοιμασία Συστήματος. Δημιουργία αρχικής διαμόρφωσης συστήματος, Ορισμός συνάρτησης δυναμικού, αρχικών θέσεων, ταχυτήτων και επιταχύνσεων, και καθορισμός συνοριακών συνθηκών.

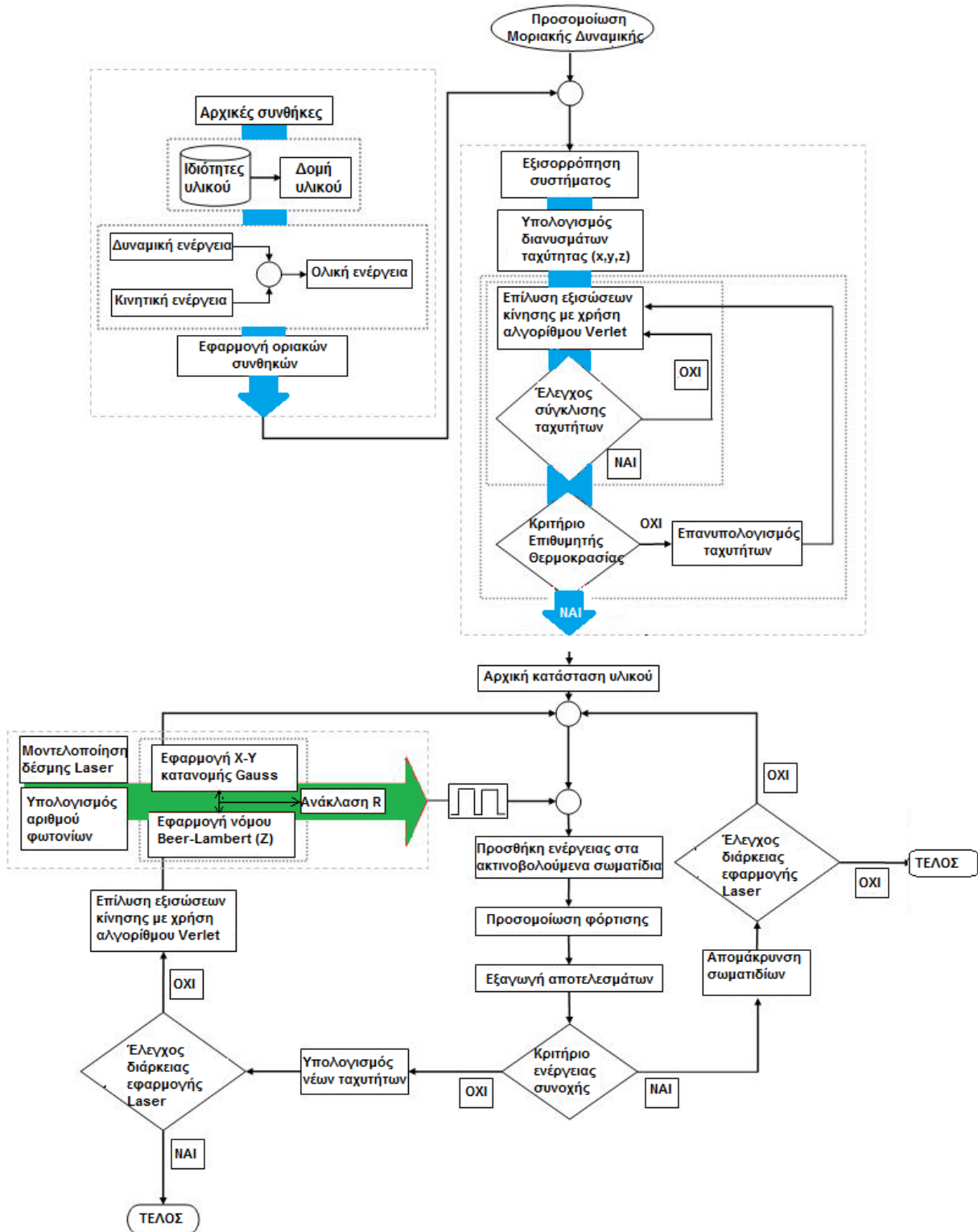
Βήμα 2^ο: Εξισορρόπηση Συστήματος. Ολοκλήρωση εξισώσεων κίνησης (με τη βοήθεια του επαναληπτικού αλγορίθμου Verlet) για όσα χρονοβήματα απαιτούνται ώστε να επέλθει θερμοδυναμική ισορροπία, επανυπολογισμός ταχυτήτων για το καθοριζόμενο ενεργειακό επίπεδο, εκτέλεση κριτηρίου επιθυμητής θερμοκρασίας (εφόσον αυτό είναι αναγκαίο).

Βήμα 3^ο: Προσομοίωση Φόρτισης. Διατύπωση σχέσεων για την ακτινοβολία Laser, με γνωστή την ενέργειά του αλλά και γνωστά χαρακτηριστικά, προσδιορισμός του αριθμού απορροφούμενων φωτονίων και ακτινοβολήση σωματιδίων του υλικού.

Βήμα 4^ο: Εξαγωγή Αποτελεσμάτων: Μετάβαση στο επόμενο χρονικό βήμα, υπολογισμός νέων θέσεων, ταχυτήτων και επιταχύνσεων των ατόμων, αλλά και νέων δυνάμεων αλληλεπίδρασης ανάμεσα στα άτομα, απομάκρυνση σωματιδίων λαμβάνοντας υπόψη το κριτήριο ενέργειας συνοχής.

Το Σχήμα 4.18. που παρατίθεται παρακάτω, παριστάνει, σε μορφή λογικού διαγράμματος, όλες τις ενέργειες που θα πρέπει να ακολουθηθούν κατά την προσομοίωση, και οι οποίες θα πραγματοποιηθούν μέσω μιας σειράς υπολογισμών που βασίζονται στη Μοριακή Δυναμική (MD) ανάλυση, για την οποία έγινε λόγος αρχικά στο Κεφάλαιο 3 και, εν συνεχεία, στο τρέχον Κεφάλαιο, όπου και ασχοληθήκαμε διεξοδικά με την ανάπτυξη του επιθυμητού υπολογιστικού κώδικα. Το Σχήμα αυτό μπορεί να αποτελέσει κατευθυντήρια γραμμή για οποιαδήποτε κώδικα προσομοίωσης θέλουμε να αναπτύξουμε προκειμένου να μοντελοποιήσουμε τη φωτοαποδόμηση υλικών, ενώ αξίζει να σημειωθεί ότι ο κάθε ερευνητής μπορεί να χρησιμοποιήσει τις σχέσεις και τα συστήματα μονάδων που τον εξυπηρετούν στο μέγιστο δυνατό βαθμό, εφόσον τα αποτελέσματα που εντέλει εξάγονται είναι αξιόπιστα και μπορούν να αναπαραστήσουν με ρεαλιστικό τρόπο την υπό περιγραφή διεργασία.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ



Σχήμα 4.18. Τυπικό λογικό διάγραμμα ανάπτυξης ενός υπολογιστικού κώδικα προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής (MD), για τη μοντελοποίηση της κατεργασίας ακτινοβολήσης και της φωτοαποδόμησης υλικών με χρήση δέσμης παλμικού Laser.

5. ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΚΩΔΙΚΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΤΗΣ ΦΩΤΟΑΠΟΔΟΜΗΣΗΣ ΜΕ LASER ΣΤΗ ΓΛΩΣΣΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΥ MATLAB

5.1. Εισαγωγικά στοιχεία – Γενικά για τη γλώσσα προγραμματισμού MATLAB

Για την προσομοίωση του φαινομένου της φωτοαποδόμησης μεταλλικών στόχων με Laser, μέσω της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής (MD), είναι διαθέσιμα μέχρι στιγμής πολλά και διάφορα υπολογιστικά πακέτα που επιτρέπουν τον προγραμματισμό όλων των στοιχείων, συνθηκών και παραμέτρων που απαιτούνται για την όσο το δυνατόν ορθότερη και πληρέστερη απεικόνιση και παρακολούθηση της εξέλιξης της διαδικασίας φωτοαποδόμησης. Ένας εκ των βασικών σκοπών της παρούσας Εργασίας είναι η απόπειρα σύνταξης ενός παρόμοιου με τους προαναφερθέντες κώδικα, ο οποίος θα προσομοιώνει επαρκώς τα επιμέρους φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα από τη στιγμή που οι παλμοί Laser αρχίζουν και προσπίπτουν πάνω στην επιφάνεια του στόχου. Οι όποιες ρυθμίσεις και τροποποιήσεις χρειαστεί να γίνουν κατά τη σύνταξη του κώδικα θα πρέπει να λαμβάνουν υπόψη το γεγονός ότι η πειραματική διαδικασία, τα αποτελέσματα της οποίας θα συγκριθούν με τα αντίστοιχα υπολογιστικά, θα πραγματοποιηθεί με χρήση *nanosecond* παλμών Laser, οι οποίοι ανήκουν στην κατηγορία των *βραχέων* και όχι των *υπερβραχέων* παλμών, όπως συμβαίνει με τα *femtosecond* Laser.

Η ανάπτυξη του κώδικα MD θα γίνει με χρήση ενός από τα πιο ευρέως διαδεδομένα πακέτα λογισμικού για προγραμματισμό σε εφαρμογές Μηχανικών, το *MATLAB* (Matrix Laboratory) της εταιρείας MathWorks. Πρόκειται για ένα περιβάλλον αριθμητικής επίλυσης προβλημάτων και μία γλώσσα προγραμματισμού τέταρτης γενεάς, η πρώτη μορφή της οποίας εμφανίστηκε στα τέλη της δεκαετίας του 1970, έχοντας αναπτυχθεί από τον *C. Moler*, διευθυντή του Τμήματος Μηχανικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών στο Πανεπιστήμιο του New Mexico (ΗΠΑ). Ήδη από το 2004, η συγκεκριμένη γλώσσα προγραμματισμού χρησιμοποιούνταν, για διάφορους βιομηχανικούς και ακαδημαϊκούς σκοπούς, από τουλάχιστον ένα εκατομμύριο χρήστες παγκοσμίως. Εφαρμόστηκε αρχικά στο πεδίο των Συστημάτων Αυτομάτου Ελέγχου (ΣΑΕ), προτού αρχίσει να βρίσκει ολοένα και πιο διαδεδομένες εφαρμογές στη Γραμμική Άλγεβρα, την Αριθμητική Ανάλυση και – ακολούθως – την

Επιστήμη και Τεχνολογία Υλικών και τις Κατεργασίες Υλικών. Είναι πάντως σημαντικό να αναφερθεί ότι η MATLAB μπορεί, σε ορισμένες εφαρμογές μοντελοποίησης, να συνδυαστεί άκρως αποτελεσματικά με το συνεργαζόμενο πακέτο λογισμικού *Simulink*.

Η χρησιμοποιούμενη έκδοση στην παρούσα Εργασία είναι η R2011a. Όπως τονίζεται συνοπτικά από το Musa στη βιβλιογραφία [17], το λογισμικό MATLAB θεωρείται από πολλούς ειδικούς και τεχνικούς επαγγελματίες ως ένα χρήσιμο και δεσπόζον εργαλείο όσον αφορά τον προγραμματισμό και την προσομοίωση διαφόρων φαινομένων, όπως επίσης και την εξεύρεση αναλυτικών λύσεων σε μία σειρά από προβλήματα. Μάλιστα, η χρήση της γλώσσας MATLAB έχει ενταθεί κατά τα τελευταία χρόνια όσον αφορά υπολογιστικές εφαρμογές σε νανοσυστήματα, καθώς επίσης και την επίλυση πρακτικών προβλημάτων που τα αφορούν. Η πληθώρα εντολών και συναρτήσεων που μπορούν να εισαχθούν στο υπολογιστικό μοντέλο, η μεγάλη ταχύτητα εκτέλεσης ακόμα και ενός κώδικα μεγάλου μήκους, καθώς επίσης και η δυνατότητα εφαρμογής διαφόρων μεθόδων μοριακής προσομοίωσης (π.χ. Ανάλυση Πεπερασμένων Στοιχείων / FEA, Προσομοίωση Monte-Carlo / MC, Μοριακή Δυναμική / MD), έχουν καταστήσει τη MATLAB ένα πολύ χρήσιμο και ισχυρό εργαλείο στα χέρια ενός προγραμματιστή και ενός Μηχανικού.

5.2. Επισκόπηση της γενικής μεθόδου επίλυσης του προβλήματος

Η επίλυση του προβλήματος της φωτοαποδόμησης με Laser, με τη βοήθεια της MATLAB, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι περιλαμβάνει πέντε (5) φάσεις που θα πρέπει να ακολουθηθούν μέχρι την ολοκλήρωσή της. Έχοντας ως τελικό σκοπό τον υπολογισμό του βάθους φωτοαποδόμησης και της θερμοκρασιακής κατανομής, καθώς εξελίσσεται η διαδικασία, καθώς επίσης και στο πέρας αυτής, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι επιμέρους φάσεις επίλυσης χαρακτηρίζονται από την παρακάτω περιγραφή:

Φάση 1^η / Προετοιμασία Συστήματος: Δημιουργία της αρχικής διαμόρφωσης του συστήματος. Ορισμός του *δυναμικού αλληλεπίδρασης*, το οποίο είναι απαραίτητο για τη μοντελοποίηση της επαφής μεταξύ του κάθε παλμού Laser και της επιφάνειας (ή του όγκου) του υλικού. Προσδιορισμός των αρχικών ταχυτήτων και των συνοριακών συνθηκών που διέπουν το φαινόμενο.

Φάση 2^η / Εξισορρόπηση Συστήματος: Ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης για καθορισμένο αριθμό χρονικών βημάτων και επαναληπτικός υπολογισμός των ταχυτήτων για κάθε διαφορετικό ενεργειακό επίπεδο στο οποίο γίνεται μετάπτωση από χρονοβήμα σε χρονοβήμα.

Φάση 3^η / Φόρτιση του Στόχου: Προσομοίωση της ακτίνας δέσμης Laser, έχοντας υπόψη πληροφορίες για το μήκος κύματος της δέσμης, την πυκνότητα περιεχόμενης ενέργειας σε αυτή (*ένταση* της δέσμης)

και τη διάρκεια του παλμού. Ακτινοβολήση των σωματιδίων του υλικού, από τη δέσμη Laser που φέρει τα παραπάνω χαρακτηριστικά.

Φάση 4^η / Εξαγωγή των Αποτελεσμάτων: Προαγωγή των συντεταγμένων και των ταχυτήτων για κάθε σωματίδιο, στο αμέσως επόμενο χρονικό βήμα. Στο νέο χρονικό βήμα υπολογίζονται εκ νέου οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων, καθώς επίσης και οι ταχύτητες και οι θέσεις αυτών.

Φάση 5^η / Περαιώση Κώδικα Προσομοίωσης: Απομάκρυνση των σωματιδίων από το σύστημα (με τη λογική ότι πλέον χαρακτηρίζονται ως *απόβλιττα*). Η φάση αυτή μπορεί να μοντελοποιηθεί με τη βοήθεια του κριτηρίου ενέργειας συνοχής.

Ο κώδικας Μοριακής Δυναμικής που θα αναπτυχθεί στη MATLAB περιλαμβάνει συνολικά τρία στάδια, τα οποία είναι σε γενικές γραμμές ίδια, ανεξάρτητα από το χρησιμοποιούμενο υπολογιστικό πακέτο. Τα στάδια αυτά είναι τα εξής:

- **Αρχικοποίηση δεδομένων** (Pre-Processing), με το αντίστοιχο εργαλείο να καλείται *Pre-Processor*.
- **Επίλυση προβλήματος** (Solution), το οποίο είναι το βασικότερο στάδιο του αλγορίθμου, που διενεργείται από το *Solver*.
- **Εξαγωγή και επεξεργασία των αποτελεσμάτων** (Post-Processing), με το αντίστοιχο εργαλείο να ονομάζεται *Post-Processor*.

Η διαδικασία που ακολουθείται κατά την ανάπτυξη του κώδικα βασίζεται σε όλα όσα έχουν ειπωθεί σε προηγούμενα Κεφάλαια σχετικά με το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης, λαμβάνοντας κυρίως υπόψη τις μαθηματικές σχέσεις και την αλληλουχία αυτών, όπως περιγράφηκε στα πλαίσια του Κεφαλαίου 4.

Όπως λέει και ο όρος, κατά την *αρχικοποίηση* των δεδομένων ορίζουμε τα χαρακτηριστικά του συστήματός μας πριν ξεκινήσει η διαδικασία της προσομοίωσης. Πρώτα απ' όλα, ορίζουμε τον αριθμό των ατόμων που περιλαμβάνει το δοκίμιο, η διάταξή τους στο χώρο και οι αρχικές θέσεις τους. Στην παρούσα ανάλυσή μας, και για λόγους απλοποίησης, θα λάβουμε υπόψη τις δύο από τις τρεις διαστάσεις του δοκιμίου, κατά τους άξονες X και Z (*μήκος / length* και *βάθος / depth*), με τον άξονα Z να είναι παράλληλος στη διεύθυνση πρόσπτωσης της δέσμης Laser. Τονίζουμε εδώ ότι στην περίπτωση μελέτης του *bulk* υλικού, οι X και Z διαστάσεις του δοκιμίου είναι συγκρίσιμες μεταξύ τους, σε αντίθεση με την περίπτωση του *λεπού υμενίου* (thin film), όπου η Z διάσταση είναι αμελητέα σε σχέση με τη X. Είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι οι θέσεις των ατόμων σχετίζονται άμεσα με τη δομή του υπό μελέτη υλικού. Για λόγους απλοποίησης, θα θεωρήσουμε πλήρως *ορθογωνική* την επιφάνεια του δοκιμίου, κάτι που προφανώς αποτελεί ιδανική περίπτωση και δεν ανταποκρίνεται συνήθως στην πραγματικότητα, καθώς

ακόμα και τα τεμάχια που έχουν πράγματι ορθογωνική διατομή παρουσιάζουν διάφορες ατέλειες που επηρεάζουν τοπικά τις διαστάσεις.

Στη συνέχεια, είναι σημαντικό να ορίσουμε τις αρχικές ταχύτητες των ατόμων του τεμαχίου όταν η προσομοίωση ξεκινήσει. Αυτές εξαρτώνται από τη θερμοκρασία του τεμαχίου και θα πρέπει να έχουν τιμή τέτοια ώστε η συνολική ορμή του συστήματος να είναι μηδενική, δηλαδή να μη μεταβάλλεται η θέση του κέντρου μάζας. Στη συνέχεια, ορίζουμε τις αρχικές επιταχύνσεις όλων των σωματιδίων, τις οποίες και θεωρούμε μηδενικές.

Έπειτα από την αρχικοποίηση, η προσομοίωση προχωρά στο βήμα της *επίλυσης*. Στο βήμα αυτό ενσωματώνονται και ολοκληρώνονται οι εξισώσεις κίνησης. Αρχικά υπολογίζεται η δύναμη αλληλεπίδρασης κάθε ατόμου με τα γειτονικά του. Θα πρέπει βεβαίως να ληφθεί υπόψη, με βάση τα όσα αναφέρθηκαν στο προηγούμενο Κεφάλαιο, ότι η δύναμη αλληλεπίδρασης σε ένα ζεύγος ατόμων θα είναι μηδενική στην περίπτωση κατά την οποία τα δύο άτομα θα απέχουν απόσταση μεγαλύτερη από μία συγκεκριμένη *απόσταση αποκοπής* r_c . Το άθροισμα όλων των επιμέρους δυνάμεων που δέχεται το άτομο από κάθε ένα γειτονικό του, μας δίνει τη συνισταμένη δύναμη τη δεδομένη χρονική στιγμή. Η τιμή αυτή μπορεί, στη συνέχεια, να διαιρεθεί με την ατομική μάζα (για κάθε άτομο) ώστε να εξαχθεί η επιτάχυνσή του.

Έπειτα, ενσωματώνουμε στον κώδικα τη χρησιμοποιούμενη μέθοδο *αριθμητικής ολοκλήρωσης*, η οποία, για λόγους ευχρηστίας, θα είναι η μέθοδος *Leapfrog Verlet*. Χρησιμοποιώντας τις επιταχύνσεις των ατόμων, και λαμβάνοντας υπόψη το γεγονός ότι η επιτάχυνση είναι η πρώτη παράγωγος της ταχύτητας, μπορεί πλέον να υπολογιστεί η ταχύτητα του κάθε ατόμου σε ένα ορισμένο διάστημα ολοκλήρωσης. Αντίστοιχα, το γεγονός ότι η ταχύτητα είναι η πρώτη παράγωγος της θέσης μάς βοηθάει να υπολογίσουμε τη *μετατόπιση* του κάθε ατόμου εντός του καθορισμένου διαστήματος ολοκλήρωσης για το οποίο έχει γίνει λόγος.

Το αμέσως επόμενο βήμα *επίλυσης* θα ενσωματώνει την *ακτινοβολία Laser*, η οποία προσπίπτει στο υλικό κάθετα στο μήκος του, και παράλληλα με τον άξονα Z και το βάθος του υλικού. Ως αρχικές μεταβλητές ορίζονται το *μήκος κύματος*, η *διάρκεια παλμού*, η *ένταση της ακτινοβολίας* και ο *ρυθμός επαναληψιμότητας* (repetition rate). Η μετάβαση σε αυτό το βήμα θα γίνει μόνο όταν το εξεταζόμενο σύστημα βρεθεί σε κατάσταση *πλήρους θερμοδυναμικής ισορροπίας*. Η ακτινοβολία του υλικού από τα φωτόνια της δέσμης Laser προκαλεί αύξηση της κινητικής ενέργειας των σωματιδίων, η οποία, με τη σειρά της, αυξάνει την ταχύτητά τους. Τα σωματίδια που έχουν ολική ενέργεια μεγαλύτερη της ενέργειας συνοχής απομακρύνονται, με αποτέλεσμα να δημιουργείται ένα είδος «κοιλότητας» που αρχίζει από το κέντρο του μήκους και εκτείνεται προς τα δύο άκρα του, καθώς το βάθος της κοιλότητας αυξάνεται. Αυτό το βάθος είναι και το μέγεθος που καλούμαστε να υπολογίσουμε καθ'όλη τη διάρκεια της

προσομοίωσης, και το οποίο είναι το βάθος φωτοαποδόμησης (ablation depth). Σημαντικό ρόλο παίζει και η έκταση της θερμικά επηρεαζόμενης ζώνης ή ζώνης θερμικής επιρροής (Heat-Affected Zone, HAZ), η οποία δημιουργείται και αναπτύσσεται λόγω της ακτινοβολίας Laser. Είναι ένα σημείο το οποίο θα πρέπει και αυτό να ληφθεί σοβαρά υπόψη στα πλαίσια της ανάπτυξης του κώδικα. Τα όσα αναπτύχθηκαν στα προηγούμενα Κεφάλαια, αλλά και οι σημειώσεις του *D. C. Rapaport* [113] σχετικά με τη δημιουργία υπολογιστικών κωδίκων MD σε H/Y, αποτελούν άκρως υποβοηθητικά σημεία αναφοράς πάνω στα οποία μπορεί να στηριχθεί ένας πλήρης και επιτυχής κώδικας, του οποίου τα εξαγόμενα αποτελέσματα προσεγγίζουν ικανοποιητικά τα πειραματικά και έχουν τη δυνατότητα να δώσουν μία αρκετά αξιόπιστη εικόνα σχετικά με τη φωτοαποδόμηση με Laser.

Το αρχείο MATLAB στο οποίο περιλαμβάνεται ο πηγαίος κώδικας ονομάζεται **mdcode.m**. Το αρχείο αυτό θα υποστηρίζεται από δύο ακόμα βοηθητικούς υπο-κώδικες του ίδιου τύπου, με τις ονομασίες **vnorm.m** και **normvec.m**. Στη συνέχεια της περιγραφής μας θα παρουσιαστεί συνοπτικά το περιεχόμενο των συγκεκριμένων κωδίκων, ενώ η πηγαία μορφή αυτών θα περιέχεται και αυτή στο Παράρτημα.

5.3. Περιγραφή του υπολογιστικού κώδικα MATLAB

5.3.1. Έναρξη ανάπτυξης κώδικα

Το πρώτο βήμα που θα πρέπει να ακολουθήσουμε, στα πλαίσια της κατάστρωσης του κώδικα Μοριακής Δυναμικής σε MATLAB, είναι οι διαστάσεις του υπό περιγραφή συστήματος, το χρονικό βήμα, η αρχική θερμοκρασία του συστήματος και ορισμένες παράμετροι που σχετίζονται με την εξέλιξη του φαινομένου, όπως π.χ. ο ρυθμός εξαγωγής των αποτελεσμάτων.

Αυτό που μας ενδιαφέρει κατά πρώτο λόγο είναι να μπορούμε να αναπαραστήσουμε την εξέλιξη του φαινομένου με ακρίβεια ενός *picosecond* (ps). Παρά το γεγονός ότι η ανάλυσή μας βασίζεται στην ενσωμάτωση και χρήση ενός *nanosecond* (ns) Laser στο σύστημα προσομοίωσης, οι διάφορες μεταβολές σε ταχύτητα, θερμοκρασία και αριθμό αφαιρούμενων σωματιδίων είναι ραγδαίες και, για αυτό το λόγο, μπορεί πολύ συχνά να γίνονται σημαντικά αντιληπτές ακόμα και σε πολύ μικρά χρονικά διαστήματα. Για αυτό το λόγο, το βήμα ολοκλήρωσης, dt , θα θεωρηθεί ίσο με:

$$dt = 10 \text{ ps} = 10^{-3} \cdot t_{MD} \quad (5.1)$$

όπου t_{MD} η νέα, νοητή μονάδα μέτρησης του χρόνου, η οποία χρησιμοποιείται στα πλαίσια της αδιαστατοποίησης.

Η θερμοκρασία του συστήματος επιλέγεται να είναι ίση με 300 K (27°C), η οποία είναι μία συνήθης τιμή που αντιστοιχεί σε θερμοκρασία περιβάλλοντος. Άρα:

$$T = 300K = \frac{300}{11604.505} = 0.025852 \cdot T_{MD}$$

όπου T_{MD} η νέα, νοητή μονάδα μέτρησης της θερμοκρασίας, που χρησιμοποιείται και αυτή στα πλαίσια της αδιαστατοποίησης.

Η σταθερά dt θα παρουσιαστεί στον κώδικα ως $deltaT$ και η τιμή αυτής θα είναι:

$$deltaT = 1e-3; \quad (5.3)$$

Σημειώνουμε εδώ τα εξής δύο πολύ σημαντικά πράγματα: Αρχικά οι μονάδες μέτρησης δεν αναφέρονται μέσα στον κώδικα MATLAB, ενώ επίσης το ελληνικό ερωτηματικό (*semicolon*) στο τέλος της (5.3) επιτρέπει στο πρόγραμμα να περάσει την τιμή $deltaT$ στη μνήμη, χωρίς να εμφανιστεί στην οθόνη εξαγωγής αποτελεσμάτων. Όσον αφορά την αρχική θερμοκρασία του συστήματος, όπως αυτή αναφέρεται στον κώδικα, αυτή θα συμβολίζεται με $TempInit$.

5.3.2. Καθορισμός βασικών παραμέτρων προσομοίωσης

Το επόμενο βήμα μας, όσον αφορά την κατάστρωση του κώδικα, είναι ο καθορισμός βασικών παραμέτρων ζωτικής σημασίας για την προσομοίωση, με τη βοήθεια της συνάρτησης *SetParameters*. Η βασικότερη παράμετρος που θα χρειαστεί να λάβουμε υπόψη είναι η απόσταση αποκοπής, την οποία και θα συμβολίσουμε εδώ με $rCutoff$. Ο αριθμός που θα εκχωρήσουμε στην αντίστοιχη μεταβλητή θα είναι η απόσταση δύο ατόμων, σε μονάδες *Angstrom* (\AA), πέρα από την οποία οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης θα είναι μηδενικές. Μία ενδεικτική τιμή για την απόσταση αποκοπής, r_c , είναι αυτή που ορίζει το δυναμικό Lennard-Jones 12-6, και η οποία είναι ίση με $2^{1/6} ; 1.12246$. Εμείς, παρ'όλα αυτά, θα επιλέξουμε μία σαφώς μεγαλύτερη απόσταση, ώστε, λαμβάνοντας υπόψη το μέγεθος του συστήματος, να μπορούμε να λάβουμε ακριβέστερα και πιο εμπειριστατωμένα αποτελέσματα για το συγκεκριμένο σύστημα. Για τον παραπάνω λόγο, θα επιλέξουμε την τιμή 10\AA για την απόσταση αποκοπής, κάτι που σημαίνει ότι θα υπολογίζονται δυνάμεις μόνο για τα ζεύγη ατόμων που απέχουν μεταξύ τους απόσταση μικρότερη από την παραπάνω τιμή. Επομένως, στη MATLAB θα διατυπώσουμε την παραπάνω σχέση ως εξής:

$$rCutoff = 10; \quad (5.4)$$

Από εδώ και στο εξής θα παραλείπεται το *semicolon*, αλλά θα πρέπει να έχουμε στο νου μας ότι, σε όλες τις περιπτώσεις κατά τις οποίες εξάγεται κάποιο αποτέλεσμα, θα πρέπει στην αντίστοιχη γραμμή της εντολής να ενσωματώνεται το *semicolon* προκειμένου να μην εμφανίζεται στο κεντρικό παράθυρο της MATLAB το εξαγόμενο αποτέλεσμα.

5.3.3. Διαδικασία αρχικοποιήσεων – Η συνάρτηση *SetupJob*

Αμέσως μετά τον ορισμό των αρχικών παραμέτρων, θα ακολουθήσει η φάση της *αρχικοποίησης* βασικών μεταβλητών, κατά τη διάρκεια της οποίας θα ορίσουμε και το σύστημα στο οποίο θα λάβει χώρα η προσομοίωση. Η συγκεκριμένη φάση θα λάβει χώρα μέσα από την κλήση της συνάρτησης *SetupJob*. Σε αυτή τη συνάρτηση, θα οριστεί αρχικά ο αριθμός των ατόμων που απαρτίζει το υπό ακτινοβολία δοκίμιο, καθώς επίσης και η διάταξη των συγκεκριμένων ατόμων στο επίπεδο. Θεωρούμε ότι το σύστημα προσομοίωσης είναι *δισδιάστατο* και εκτεινόμενο κατά τους άξονες x και z . Ο αριθμός των διαστάσεων θα εμφανιστεί στη MATLAB ως $NDIM = 2$.

Το τεμάχιο θα απαρτίζεται συνολικά από δύο είδη ατόμων: τα *Newtonian Atoms*, τα οποία έχουν μη μηδενικές ταχύτητες και παίζουν ενεργό ρόλο στην προσομοίωση, και τα *Boundary Atoms*, τα οποία βρίσκονται σε όσα από τα άκρα του τεμαχίου δεν έρχονται ποτέ σε επαφή με τη δέσμη Laser, δηλαδή ουσιαστικά στις περιοχές όπου εφαρμόζονται περιοδικές συνοριακές συνθήκες (PBC). Μπορούμε να ξεχωρίσουμε το είδος των ατόμων ανάλογα με το αν χαρακτηρίζονται ως *Newtonian* ή *Boundary*, με τη βοήθεια της μεταβλητής *moltype*. Είναι ένα διάνυσμα – γραμμή που περιλαμβάνει τόσες στήλες όσα και τα άτομα του μοντέλου. Ορίζουμε λοιπόν αντίστοιχα, για τα *Newtonian* και *Boundary Atoms*, τα εξής:

$$moltype(1, partNewton) = 1 \quad (5.5)$$

$$moltype(1, partBoundary) = 2 \quad (5.6)$$

Κατά συνέπεια, παρατηρούμε ότι οι μεταβλητές *moltype*, *partNewton* και *partBoundary* βοηθούν στον ακριβή ορισμό και στη διάκριση των ατόμων που περιλαμβάνει το σύστημα. Ο όγκος προσομοίωσης (ή, ακριβέστερα, η *επιφάνεια* προσομοίωσης, μιας και θα μελετήσουμε το φαινόμενο σε δύο διαστάσεις) μπορεί να εκληφθεί απλά ως ένα καθορισμένο τμήμα του δοκιμίου, με σκοπό να ελαττώσουμε το υπολογιστικό κόστος. Θεωρούμε ότι οι ιδιότητες του υλικού παρουσιάζουν περιοδικό χαρακτήρα, κάτι που σημαίνει ότι παραμένουν οι ίδιες κατά καθορισμένα χωρικά διαστήματα, και πέρα από τα άκρα του όγκου προσομοίωσης. Εδώ θα θεωρήσουμε ότι ο όγκος προσομοίωσης απαρτίζεται από συνολικά 3000 άτομα, κατανεμημένα στους δύο άξονες κατά τρόπο που προσομοιάζει στην περίπτωση του πειράματος. Για τον παραπάνω λόγο θα τοποθετήσουμε 200 άτομα στον άξονα X και 15 στον άξονα Z . Ο προσδιορισμός του πλήθους των *boundary atoms* μπορεί να γίνει με τη βοήθεια του Σχήματος 4.5. και της αναγωγής αυτού σε δύο διαστάσεις. Παρατηρούμε ότι η πάνω, η κάτω και η αριστερή στρώση (2 στρώσεις κατά X , μία κατά Z) αποτελούνται από *boundary atoms*, κάτι που μας οδηγεί στο να επιλέξουμε συνολικά 415 άτομα για το σύστημα και να διεξαγάγουμε την προσομοίωσή μας κατά αυτό τον τρόπο.

Ακολουθεί ο ακριβής καθορισμός των θέσεων των ατόμων πάνω στην επιφάνεια, με τη βοήθεια της συνάρτησης *InitCoords*, η οποία θα κληθεί ως τμήμα της *SetupJob*. Ορίζουμε λοιπόν τις αρχικές

συντεταγμένες των ατόμων του δοκιμίου στο δισδιάστατο σύστημα αξόνων (x,z) , οι οποίες εξαρτώνται από τη δομή του υλικού. Ως μία πρώτη υπόθεση εργασίας, θα θεωρήσουμε ότι το υλικό μας είναι *μολυβδαίνιο* (Mo), για το οποίο ήδη υπάρχουν γνωστές τιμές χρήσιμων παραμέτρων στη βιβλιογραφία [153][161]. Η δομή του μολυβδαινίου είναι κυβική χωροκεντρωμένη (*bcc*) και δύο γειτονικά άτομα μέσα στη δομή απέχουν μεταξύ τους απόσταση ίση με 1.36 \AA [E4]. Όπως τονίσαμε και παραπάνω, για λόγους απλοποίησης τόσο στη διεξαγωγή της προσομοίωσης όσο και στην εξαγωγή των αποτελεσμάτων, θεωρούμε ότι το τεμάχιο έχει την πιο απλή μορφή, δηλαδή την *ορθογωνική*.

Έπειτα από τις αρχικές θέσεις των ατόμων, θα πρέπει να ορίσουμε και τις ταχύτητες που αυτά θα έχουν κατά την έναρξη της προσομοίωσης. Η μεταβλητή *rv* θα είναι αυτή που θα χρησιμοποιηθεί για την περιγραφή τους, η οποία θα γίνει εφικτή μέσα από τη συνάρτηση *InitVelsPart*. Τα άτομα αρχικά *δεν* είναι ακίνητα, αλλά έχουν αρχικές ταχύτητες που εξαρτώνται από τη θερμοκρασία και επιλέγονται με κριτήριο το μηδενισμό της ορμής του συστήματος, ώστε να μη μετατοπίζεται το κέντρο μάζας. Στην παρούσα μελέτη δε μας αφορά άμεσα η εύρεση και ο υπολογισμός της ταχύτητας κάθε ξεχωριστού ατόμου, κάτι που μας επιτρέπει να δούμε το σύνολο των ατόμων ως ένα *σύστημα*, το οποίο θα χαρακτηρίζεται από μία ενιαία αρχική ταχύτητα. Πληροφοριακά πάντως αναφέρουμε ότι, στην πραγματικότητα, τα άτομα *δεν* έχουν την ίδια αρχική ταχύτητα, αλλά ταχύτητες που ακολουθούν μία συγκεκριμένη κατανομή (Gauss ή *Maxwell-Boltzmann*, στην πιο ακριβή περίπτωση).

Η μεταβλητή που θα χρησιμοποιηθεί για τον ορισμό της ταχύτητας είναι η *velMag*, η οποία θα οριστεί στη MATLAB ως εξής:

$$velMag = (2 \times (1 - 1/nMolNewton) \times T)^{0.5} \quad (5.7)$$

Η σχέση αυτή αποτελεί αναπαράσταση της (5.8) σε MATLAB:

$$v = \sqrt{2 \times \left(1 - \frac{1}{N_m}\right) \times T} \quad (5.8)$$

Όπου N_m ο αριθμός των Newtonian σωματιδίων. Η κατεύθυνση καθενός από τα σωματίδια ορίζεται να είναι *τυχαία*.

Παρά το γεγονός ότι θα λάβουμε κυρίως υπόψη το σύνολο των ατόμων του υλικού-στόχου ως ένα *σύστημα*, αναφορικά με τις ταχύτητες, θα ήταν ελλιπές για την ανάλυσή μας να παραβλέψουμε τον ορισμό των ταχυτήτων σε κάθε μία από τις θέσεις πάνω στον όγκο προσομοίωσης. Θα λάβουμε υπόψη τα λεγόμενα του Rieth [130] και θα σχηματίσουμε ένα προφίλ ταχυτήτων που χαρακτηρίζεται από κανονική κατανομή, με τη μέση τιμή αυτής να ισούται με την τιμή της *VelMag* και την τυπική απόκλιση με τη συγκεκριμένη τιμή, διαιρεμένη με $\sqrt{3}$, οδηγώντας έτσι σε μία αξιόπιστη αναπαράσταση της κατανομής αυτής. Θα χρησιμοποιηθούν οι σχέσεις (4.24) έως (4.34) για να δημιουργήσουμε τη δική μας γεννήτρια

τυχαίων τιμών ταχύτητας, που όμως ανταποκρίνονται στην κανονική κατανομή. Η μοναδική διαφοροποίηση από αυτά που δίνει ο Rieth θα υπάρχει στη σχέση (4.26), με δεδομένο ότι η τιμή σ που θέλουμε να εκχωρήσουμε επιθυμούμε να οδηγεί και σε σύγκλιση των ταχυτήτων, ώστε κατευθείαν με το που αρχίσει η ακτινοβολή να επέλθει θερμοδυναμική ισορροπία, χωρίς την ανάγκη εφαρμογής αλγορίθμων Verlet πριν την ακτινοβολή αλλά και χωρίς να εμφανίζεται απόκλιση από ρεαλιστικές συνθήκες κατεργασίας.

Προχωρώντας τώρα στον ορισμό των *αρχικών επιταχύνσεων* των ατόμων, αυτές θεωρούμε ότι είναι μηδενικές κατά την έναρξη της προσομοίωσης. Η κλήση της συνάρτησης *InitAccels* και ο ορισμός της μεταβλητής *ra* θα μας βοηθήσουν στην επίτευξη αυτού του σκοπού. Η δημιουργία της μηδενικής μεταβλητής *ra* θα γίνει στη MATLAB με τη βοήθεια της εντολής *zeros (I,J)*, η οποία δημιουργεί έναν τανυστή διαστάσεων $I \times J$, αποτελούμενο από μηδενικά. Εδώ $I = NDIM = 2$ (ο αριθμός των διαστάσεων) και $J = nMol$ (ο αριθμός των σωματιδίων).

Τέλος, στα πλαίσια της συνάρτησης *SetupJob*, θα καλέσουμε τη συνάρτηση *AccumProps*, η οποία μπορεί να επιτελέσει τρεις διαφορετικές λειτουργίες ανάλογα με το αν η τιμή της μεταβλητής *icode* είναι ίση με 0, 1 ή 2. Οι τρεις περιπτώσεις και τα επακόλουθα αυτής διατυπώνονται με χρήση της ευρέως διαδεδομένης προγραμματιστικής δομής *if ... elseif*, με τις περιπτώσεις ισότητας της μεταβλητής *icode* με μία συγκεκριμένη τιμή, έστω V , να διατυπώνονται ως “*icode == V*“, χρησιμοποιώντας δηλαδή δύο (2) συνεχόμενα σύμβολα ισότητας (=), αντί για ένα, το οποίο αντιπροσωπεύει την *εκχώρηση* τιμής σε μεταβλητή. Σκοπός της εισαγωγής της συνάρτησης *AccumProps* είναι η αρχική θεώρηση για τις τιμές των μεγεθών που θέλουμε να μετρήσουμε. Παρακάτω αναφέρονται τα μεγέθη που επιθυμούμε να μετρήσουμε, μαζί με τις μεταβλητές που χρησιμοποιούμε μέσα στον κώδικα προκειμένου να τα αναπαραστήσουμε:

- **Ολική ενέργεια** (*totEnergy*).
- **Κινητική ενέργεια** (*kinEnergy*).
- **Δυναμική ενέργεια** (*potEnergy*).
- **Θερμοκρασία του δοκιμίου** (*Temperature*).
- **Ενέργεια που απορροφήθηκε από τα φωτόνια** (*AbsEnergy*).

Στη δεδομένη χρονική στιγμή, επιλέγουμε να καλέσουμε το τμήμα της συνάρτησης *AccumProps* που αντιστοιχεί στην τιμή *icode == 0*. Αυτό είναι η συνάρτηση *PropZero*, η οποία χρησιμοποιείται για την αρχικοποίηση της στιγμιαίας τιμής αλλά και του αθροίσματος όλων των τιμών που ανανεώνονται σε κάθε χρονικό βήμα, για κάθε ένα από τα πέντε μεγέθη που πρόκειται να μετρηθούν. Για το τυχαίο μέγεθος v , δημιουργείται μία δομή MATLAB τύπου “*struct*” (από το *Structure = δομή*), στην οποία εμπερικλείεται η μεταβλητή *val*, που δηλώνει τη στιγμιαία τιμή του εκάστοτε μεγέθους, όπως επίσης και

η μεταβλητή *sum*, η οποία αφορά το άθροισμα όλων των μεγεθών. Για την αρχικοποίηση, ορίζουμε τις παρακάτω τιμές:

$$\left. \begin{aligned} v.sum &= [0; 0] \\ v.val &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (5.9)$$

Τέλος, για να κλείσει η συνάρτηση *SetupJob*, θα πρέπει όλα τα βασικά μεγέθη που αφορούν τα άτομα (μονοατομικά μόρια, *mol*) του υλικού, να εισαχθούν μέσα σε μία δομή τύπου *struct* για το ίδιο το σύστημα ατόμων. Δημιουργείται δηλαδή μία δομή με ονομασία *mol* και συνιστώσες *mol.X*, όπου το *X* μπορεί να λαμβάνει μία από τις ακόλουθες τιμές:

- *nMol*: αριθμός ατόμων.
- *r*: θέσεις ατόμων στο επίπεδο.
- *rv*: ταχύτητες ατόμων.
- *ra*: επιταχύνσεις ατόμων.
- *ac*: αρχικές (μηδενικές) επιταχύνσεις μορίων.
- *type*: τύπος μορίων (αν πρόκειται δηλαδή για *Newtonian* ή για *Boundary* άτομα).
- *part*: συνιστώσα που αφορά όλα τα σωματίδια του υλικού.
- *partNewton*: συνιστώσα που αφορά τα *Newtonian* σωματίδια του υλικού.
- *partBoundary*: συνιστώσα που αφορά τα *Boundary* σωματίδια του υλικού, αυτά δηλαδή στα οποία εφαρμόζονται συνοριακές συνθήκες.

5.3.4. Έλεγχος σύγκλισης ταχυτήτων στο σύστημα της προσομοίωσης

Σύμφωνα με τα λεγόμενά μας στο Κεφάλαιο 4, προκειμένου να έχει νόημα η ακτινοβόληση του δοκιμίου με ακτίνες Laser, θα πρέπει το σύστημα στο οποίο θα εφαρμοστεί η ακτινοβόληση να βρίσκεται σε *θερμοδυναμική ισορροπία*. Επί του παρόντος, θα χρησιμοποιηθεί η Σχέση (4.75) προκειμένου να διερευνήσουμε αν το κριτήριο σύγκλισης ταχυτήτων για το οποίο γίνεται λόγος ικανοποιείται. Για το λόγο αυτό, θα ορίσουμε τη συνάρτηση *AConverge*, με μεταβλητή εξόδου την τιμή *AConv* που αντιπροσωπεύει το αριθμητικό αποτέλεσμα από την εφαρμογή της συνάρτησης σύγκλισης ταχυτήτων. Η συνάρτηση αυτή έχει διατυπωθεί κατά τέτοιον τρόπο ώστε να ικανοποιεί πλήρως την (4.75), και χρησιμοποιείται η συνθήκη $if \text{abs}(AConv - 5/3) \leq 0.25$, ώστε, εάν αυτή ικανοποιηθεί, να μπορούμε να προχωρήσουμε στην έναρξη της προσομοίωσης (πάντα σύμφωνα με τα γραφόμενα στο Κεφάλαιο 4). Η βιβλιογραφία [130][E1] ορίζει βέβαια ότι μία κοινώς αποδεκτή τιμή δεξιά από το ανισοτικό σύμβολο θα μπορούσε να είναι η 0.2. Επιλέξαμε παρ'όλα αυτά την τιμή 0.25, μετά από τη διεξαγωγή διαφόρων

δοκιμών, στις οποίες, έχοντας επιλέξει και καθορίσει τις ταχύτητες, παρατηρήσαμε ότι η τιμή της συνάρτησης σύγκλισης είναι ελάχιστα μεγαλύτερη από 1.8667, δίνοντας έτσι στο πρόγραμμα να καταλάβει ότι δεν επιτυγχάνεται ισορροπία και ότι θα πρέπει να εφαρμοστεί η εναλλακτική συνθήκη. Επειδή όμως οι τιμές έως και 1.91 (περίπου) δεν αποκλίνουν σημαντικά από αυτές που τίθενται στην αρχική συνθήκη που πρέπει να ικανοποιηθεί, μπορούμε τελικά να επιλέξουμε την τιμή 0.25, χωρίς ιδιαίτερη μεταβολή στην ακρίβεια, η οποία βεβαίως είναι αρνητική (όσο πιο στενό είναι το πεδίο ικανοποίησης της συνθήκης, τόσο μεγαλύτερη είναι και η ακρίβεια που εντέλει επιτυγχάνουμε).

Για λόγους πληρότητας, αναφέρουμε εδώ και την περίπτωση κατά την οποία δε λαμβάνει χώρα σύγκλιση ταχυτήτων από το πρώτο βήμα. Σε αυτή την περίπτωση, η υποπερίπτωση που ξεκινάει με τον όρο *else* εντός της συνθήκης *if* που έχουμε αναφέρει στην προηγούμενη παράγραφο, θα ενσωματώνει τις συναρτήσεις *LeapfrogStep* για τα τμήματα (*parts*) 1 και 2 (όπως θα δούμε στο επόμενο εδάφιο), καθώς επίσης και τη βοηθητική (για το σκοπό μας) συνάρτηση *ComputeForces*, με τη βοήθεια της οποίας θα μπορέσουμε να υπολογίσουμε αρχικά τις δυνάμεις και, κατά συνέπεια, και τις επιταχύνσεις των ατόμων (με γνωστή τη μάζα τους).

5.3.5. Εκτέλεση σημαντικών διεργασιών εντός ενός συγκεκριμένου χρονοβήματος

Έπειτα από τη φάση των αρχικοποιήσεων των επιθυμητών μεταβλητών, γίνεται κλήση μιας συνάρτησης που περιλαμβάνει τον υπολογισμό μιας σειράς από παραμέτρους και τιμές κατά τη διάρκεια ενός συγκεκριμένου χρονικού βήματος, με συνέπεια η συγκεκριμένη συνάρτηση να ονομάζεται *SingleStep*. Η συνάρτηση αυτή εκτελείται επαναληπτικά σε κάθε επόμενο χρονικό βήμα στο οποίο αναβαθμίζεται ο κώδικας, και τερματίζεται όταν η επαναληπτική διαδικασία έχει φτάσει σε ένα οριακό χρονικό βήμα (*stepLimit*) που έχει καθοριστεί από το χρήστη. Έχουμε καθορίσει να τερματίζεται η διαδικασία σε μία λογική τιμή χρονοβημάτων που απαιτούνται για να συντελεστεί πλήρης αφαίρεση υλικού περιμετρικά της ακτίνας Laser. Ορίσαμε λοιπόν $stepLimit = 1000$, χωρίς όμως να σημαίνει ότι η διαδικασία θα τερματίζεται απαραίτητα στα 1000 βήματα. Σε περίπτωση που έχει λάβει χώρα πλήρης αφαίρεση υλικού, έχουμε ζητήσει από τη MATLAB να τερματίζει την εκτέλεση του κώδικα και να εμφανίζει αντίστοιχα ένα μήνυμα σφάλματος (*error message*) που θα καταδεικνύει τον τερματισμό του κώδικα προσομοίωσης MD (αντίστοιχη γραμμή κώδικα: *error 'Molecular Dynamics Simulation program terminated'*). Η συνθήκη κάτω από την οποία θα συμβεί κάτι τέτοιο θα περιγραφεί στη συνέχεια της ανάλυσής μας.

Εντός της συνάρτησης *SingleStep*, καλούνται άλλες συναρτήσεις, υπό μορφή υπορουτινών (*subroutines*), οι οποίες αφορούν σημαντικούς παράγοντες για την προσομοίωση όπως είναι η

ενσωμάτωση των εξισώσεων κίνησης, οι δυνάμεις που αναπτύσσονται, η αναπαράσταση της ακτινοβολίας Laser και της επίδρασης αυτής στο υλικό, αλλά και η μέτρηση όλων των μεγεθών που μας είναι απαραίτητα καθ'όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης. Σε γενικές γραμμές, είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι όλα τα βήματα που ακολουθήθηκαν, στα πλαίσια της κατάστρωσης και ανάπτυξης του κώδικα, βασίζονται πάνω στην εκτενή ανάλυση του *Rapaport* [113] όσον αφορά τη διεξαγωγή υπολογιστικών προσομοιώσεων Μοριακής Δυναμικής (MD).

Καταρχήν, ορίζουμε τις μεταβλητές *stepCount* και *timeNow*, οι οποίες αφορούν αντίστοιχα το τρέχον βήμα και την τρέχουσα χρονική στιγμή αναφορικά με τη φάση στην οποία βρίσκεται το πείραμα. Έχοντας κατά νου τη διάρκεια του κάθε χρονικού βήματος, έστω *dt*, ανατρέχουμε στο παρακάτω σύστημα σχέσεων (5.10) προκειμένου να εξαγάγουμε τις επιθυμητές μεταβλητές:

$$\begin{aligned} stepCount &= stepCount + 1 \\ timeNow &= stepCount * dt \end{aligned} \tag{5.10}$$

Στην παρούσα θεώρηση, θα παραδεχτούμε ότι ο νεκρός χρόνος μεταξύ δύο διαδοχικών παλμών Laser είναι αμελητέος, λαμβάνοντας υπόψη ότι η παρεμβολή κάποιου χρονικού διαστήματος ανάμεσα στους παλμούς επηρεάζει ελάχιστα τα αποτελέσματα της διαδικασίας. Ενδέχεται αυτή η θεώρηση να οδηγήσει σε μικρής έκτασης ανακρίβειες όσον αφορά την εξαγωγή των τελικών αποτελεσμάτων, αλλά πρόκειται για μια ικανοποιητική προσέγγιση που υπαγορεύεται ταυτόχρονα και από λόγους απλοποίησης της διαδικασίας. Με βάση τα παραπάνω, το χρονικό βήμα ολοκλήρωσης *dt* λαμβάνεται ίσο με 10 ps ή 10^{-3} , σε μονάδες Μοριακής Δυναμικής (MD).

Ξεκινώντας το πρώτο χρονοβήμα της προσομοίωσής μας, είναι σημαντικό να μοντελοποιήσουμε την εφαρμοζόμενη ακτινοβολία Laser, καθώς επίσης και την επίδραση που έχει αυτή όταν έρχεται σε επαφή με το υλικό και διεισδύει μέσα σε αυτό. Με βάση τα όσα έχουν αναλυθεί στο Κεφάλαιο 4, και πιο συγκεκριμένα στην Υποενότητα 4.5., θα χρησιμοποιηθεί μία σειρά από εξισώσεις που έχουν ως σκοπό να αναπαραστήσουν τρία βασικά στοιχεία και φαινόμενα:

- την ακτινοβολία Laser αυτή καθαυτή,
- την αλληλεπίδρασή της με την ύλη (δηλαδή με τα άτομα του δοκιμίου),
- την αφαίρεση ατόμων από την κύρια επιφάνεια ως αποτέλεσμα της ανωτέρω αλληλεπίδρασης.

Αρχικά, είναι σημαντικό να μπορέσουμε να προσομοιώσουμε το φαινόμενο της απορρόφησης φωτονίων Laser από το υλικό. Πιο συγκεκριμένα, είναι σημαντικό να προσδιοριστεί ο αριθμός των φωτονίων που απορροφούνται από το υλικό σε κάθε χρονικό βήμα του κώδικα, καθώς επίσης και το ποσό της ενέργειας που αυτά τα φωτόνια έχουν απορροφήσει. Έχοντας ως κατευθυντήρια γραμμή τα όσα

έχουν αναφερθεί στην Υποενότητα 4.5., είναι σημαντικό να καταστρώσουμε εδώ μία συνάρτηση που θα μπορεί να υπολογίζει απαραίτητα στοιχεία σχετικά με την απορρόφηση φωτονίων Laser. Αυτή θα ονομαστεί *PhotonAbsorption*, και θα κληθεί εντός της *SingleStep* αφότου έχουν πραγματοποιηθεί οι απαραίτητοι υπολογισμοί θέσεων, ταχυτήτων, δυνάμεων επιταχύνσεων για τα άτομα της επιφάνειας προσομοίωσης. Η μεταβλητή εξόδου της συνάρτησης *PhotonAbsorption* θα ονομαστεί *NAP*, από την έκφραση **N**umber of **A**bsorbed **P**hotons (= αριθμός φωτονίων που έχουν απορροφηθεί).

Ο συντελεστής ανάκλασης (δείκτης ανακλαστικότητας, *reflectivity index*) του μολυβδαινίου δεν είναι γνωστός για το μήκος κύματος του υπό εξέταση Laser (355 nm), τουλάχιστον σύμφωνα με την έως τώρα διαθέσιμη βιβλιογραφία. Όμως, στο τεχνικό κείμενο [162] υπάρχουν κάποια σχετικά στοιχεία με τη βοήθεια των οποίων θα μπορούσε να εξαχθεί μία *προσεγγιστική* τιμή για την ανακλαστικότητα του Mo σε μήκος κύματος 755 nm:

- Για $\lambda = 500nm \Rightarrow R = 0.46$
- Για $\lambda = 10000nm \Rightarrow R = 0.93$

Για λόγους απλότητας, και χωρίς βλάβη της γενικότητας, θα μπορούσαμε να θεωρήσουμε ότι η εξίσωση του συντελεστή ανάκλασης, συναρτήσει του μήκους κύματος, είναι γραμμική και λαμβάνει τη γενική μορφή $y = ax + b$. Αυτό σημαίνει ότι θα πρέπει να επιλυθεί το παρακάτω σύστημα (Σ):

$$(\Sigma): \begin{cases} 0.46 = 500x + b \\ 0.93 = 10000x + b \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = -4.842105 \cdot 10^{-5} \\ b = 0.4457895 \end{cases} \quad (5.19)$$

Άρα, για $\lambda = x = 355$ nm, θα ισχύει ότι:

$$R = y = 355 \cdot (-4.842105 \cdot 10^{-5}) + 0.4457895 \Rightarrow R = 0.4286 \quad (5.20)$$

που είναι μια γενικώς αποδεκτή τιμή για το συντελεστή ανάκλασης τυπικά χρησιμοποιούμενων μετάλλων για φωτοαποδόμηση με Laser.

Ο συντελεστής απορρόφησης, ο οποίος στη MATLAB εισάγεται ως *asigma*, ισούται με $1 - R = 0.5714$. Από τη στιγμή που η τιμή *R* έχει οριστεί, είναι πιο εύκολο να ορίσουμε στον κώδικα ότι *asigma* = $1 - R$. Θεωρούμε επίσης ότι η ένταση του Laser λαμβάνει τη μέγιστη τιμή της ακριβώς τη στιγμή κατά την οποία αρχίζει να εκπέμπεται ο εκάστοτε παλμός, με αποτέλεσμα να εκχωρήσουμε στη μεταβλητή *timeMLP* (*MLP* = *Maximum Laser Power*) την τιμή 0. Επίσης, θεωρούμε ότι ο χρόνος κατά τον οποίο επιτυγχάνεται το μέγιστο πλάτος του παλμού (*Full Width at Half Maximum, FWHM*) είναι ίσος με τη διάρκεια του παλμού, δηλαδή τα *10ns*, τα οποία εκφράζονται, σε αδιαστατοποιημένες μονάδες MD, με την τιμή *timeFWHM* = 1, καθώς έχουμε ήδη αναφέρει, στο προηγούμενο Κεφάλαιο, ότι, κατά την αδιαστατοποίηση του χρόνου, θεμελιώδης μονάδα Μοριακής Δυναμικής θα είναι τα 10 ns (10^{-8} s).

Επιπλέον τιμές που θα πρέπει να εκχωρηθούν εντός του κώδικα είναι: η ακτίνα της δέσμης Laser (r_b), η οποία εδώ λαμβάνεται ίση με $1.5 \mu\text{m}$ ή 15000 \AA , η παράμετρος ακριβείας a_c , που στη MATLAB εκχωρείται ως $alpha_c = 4$ και ο παράγοντας εξασθένησης Beer-Lambert (που συμβολίζεται με β), ο οποίος είναι ίσος με $beta = 0.01$. Οι λόγοι για τους οποίους επιλέχθηκαν οι τιμές αυτές, για τις δύο προαναφερθείσες παραμέτρους, περιγράφονται συνοπτικά στο προηγούμενο Κεφάλαιο 4.

Το κύριο μέγεθος το οποίο χρησιμοποιήσαμε προκειμένου να αρχίσουμε να περιγράφουμε τη δέσμη Laser που πρόκειται να προσπέσει στο στόχο, είναι η *πυκνότητα ενέργειας* ή *ροή ακτινοβολίας* του Laser, που είναι ένα μέγεθος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε κάθε γενικευμένη περίπτωση, γιατί εκφράζει την ενέργεια της προσπίπτουσας ενέργειας Laser ανά την ορισθείσα μονάδα επιφάνειας. Μία λογική και συχνά παρατηρούμενη τιμή σε αναλύσεις φωτοαποδόμησης, η οποία αποτελεί και ένα από τα αριθμητικά αποτελέσματα που θα εξαχθούν στο Κεφάλαιο 6 ως απόρροια της πειραματικής διαδικασίας, είναι τα 10 J/cm^2 , με την αντίστοιχη μεταβλητή να ορίζεται στον κώδικά μας ως *LaserFluence1*. Η μεταβλητή *LaserFluence* προκύπτει από τη μετατροπή των συνηθισμένων μονάδων που χρησιμοποιούνται σε μελέτες (σε παράγωγα μεγέθη του SI, καθ'ότι τα cm^2 δε θεωρούνται θεμελιώδης μονάδα μέτρησης επιφάνειας, κάτι που όμως ισχύει για τα m^2), σε μονάδες MD. Τα cm^2 που βρίσκονται στον παρονομαστή της έκφρασης «ενέργεια / μονάδα επιφάνειας» μετατρέπονται σε \AA^2 μέσω διαίρεσης με την ποσότητα $(10^8)^2 = 10^{16}$, ενώ επίσης τα J που βρίσκονται στον αριθμητή μετατρέπονται σε eV διαιρώντας με την ποσότητα $1.6 \cdot 10^{-19}$, επειδή $1\text{eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$. Ακόμα, η ισχύς ανά μονάδα επιφάνειας προκύπτει διαιρώντας τη μεταβλητή *LaserFluence* με τη χρονική διάρκεια παλμού (*timeFWHM*), οπότε και εξάγεται η μεταβλητή *LaserPower*, που ουσιαστικά αντιπροσωπεύει την ποσότητα P_L που αναφέρεται στο Κεφάλαιο 4.

Ο παράγοντας z του νόμου Beer-Lambert αντιστοιχεί στο βάθος διείσδυσης της δέσμης Laser μέσα στο υλικό. Στο σύστημα x - y - z που χρησιμοποιείται στα πλαίσια της προσομοίωσής μας, θα θεωρήσουμε, για κάθε ξεχωριστό στοιχείο του ταχυστή θέσης των σωματιδίων *mol.r*, ότι η απόλυτη τιμή της ποσότητας z (τρίτη τιμή, έστω c , σε ένα τρισδιάστατο σύστημα συντεταγμένων της μορφής [a, b, c]) αντιστοιχεί στο βάθος του κάθε ατόμου εντός του ενιαίου υλικού (σε σχέση με την επιφάνειά του). Εδώ γίνεται αναφορά στην *απόλυτη τιμή* επειδή οι αρχικές z -συντεταγμένες των ατόμων, με βάση τον τρόπο με τον οποίο ορίστηκαν οι θέσεις του στον κώδικα, λαμβάνουν αρνητικές τιμές. Οι γραμμές κώδικα *rdepth = mol.r(3,:)* και $z = abs(rdepth)$ εξυπηρετούν τους παραπάνω σκοπούς.

Στη συνέχεια, εισάγουμε στον κώδικα τα μεγέθη που είναι απαραίτητα για την έκφραση και εξαγωγή του πάχους του νέφους πλάσματος (*plasma cloud thickness*), $\Lambda(t)$. Μία σχέση που είναι εύκολο να υλοποιηθεί, καθώς οι απαιτούμενες τιμές για την εξαγωγή του αριθμητικού αποτελέσματος είναι γνωστές

από τα δεδομένα του προβλήματός μας, βασίζεται στην έρευνα που έχουν διεξαγάγει οι *Bulgakov* και *Bulgakova* και είναι η εξής:

$$\Lambda(t) = \left(\frac{t - t_0}{t_{FWHM}} \right)^2 \quad (5.21)$$

όπου t η τρέχουσα χρονική στιγμή, t_0 η στιγμή κατά την οποία η ισχύς της δέσμης Laser λαμβάνει τη μέγιστη τιμή της, και t_{FWHM} η στιγμή που αντιστοιχεί στο μέγιστο πλάτος στο ημι-μέγιστο (*Full Width at Half Maximum, FWHM*) της δέσμης.

Στην ολική εξίσωση της ακτινοβολίας, η οποία δίνεται από τη σχέση (4.104), η ποσότητα $P_L dt \exp(-\beta z)$ θα εκφραστεί με τη βοήθεια της μεταβλητής $bsigma = LaserPower * dt * \exp(-beta * z)$, όπως αυτή διατυπώνεται στη MATLAB. Όσο για την ποσότητα

$$\left(\Phi \left(a_c \frac{x+r_a}{2r_b} \right) - \Phi \left(a_c \frac{x-r_a}{2r_b} \right) \right) \left(\Phi \left(a_c \frac{y+r_a}{2r_b} \right) - \Phi \left(a_c \frac{y-r_a}{2r_b} \right) \right),$$

αυτή θα εκφραστεί με τη βοήθεια της μεταβλητής $dsigma$. Η παραπάνω ποσότητα, αντιπροσωπεύει ουσιαστικά ένα σύνολο από γραμμικούς και παραγοντικούς συνδυασμούς της ποσότητας Φ , που μπορεί αξιόπιστα να παραστήσει τη *συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας* για την *κανονική κατανομή*. Η αντίστοιχη συνάρτηση στη MATLAB ονομάζεται *normpdf*, και λαμβάνοντας υπόψη το πώς λειτουργεί μέσα στο λογισμικό, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την ακόλουθη σχέση για να εκφράσουμε τη μεταβλητή $dsigma$ σε μορφή MATLAB:

$$\left. \begin{aligned} dsigmaX &= normpdf((alphac * ((mol.r(1,:) + ralpha) / (2*rb))), 0, (2*alphac / rb)) - ... \\ &normpdf((alphac * ((mol.r(1,:) - ralpha) / (2*rb))), 0, (2*alphac / rb)); \\ dsigmaY &= normpdf((alphac * ((mol.r(2,:) + ralpha) / (2*rb))), 0, (2*alphac / rb)) - ... \\ &normpdf((alphac * ((mol.r(2,:) - ralpha) / (2*rb))), 0, (2*alphac / rb)); \\ dsigma &= dsigmaX .* dsigmaY; \end{aligned} \right\} (5.22)$$

(σημείωση: τα αποσιωπητικά χρησιμοποιούνται όταν θέλουμε να συνεχίσουμε μία έκφραση ή αριθμητική παράσταση σε νέα γραμμή του κώδικα).

Οι συνιστώσες $dsigmaX$ και $dsigmaY$ αντιπροσωπεύουν αντίστοιχα τις ξεχωριστές πιθανότητες για να βρίσκεται ένα φωτόνιο στη συντεταγμένη X και τη συντεταγμένη Y , πάνω στο επίπεδο XY .

Το γινόμενο των ποσοτήτων $asigma$, $bsigma$ και $dsigma$ θα ικανοποιεί την εξίσωση της ολικής απορροφούμενης ακτινοβολίας από το στόχο, όπως διατυπώθηκε στο Κεφάλαιο 4. Ο αριθμός των φωτονίων που απορροφάται από το υλικό θα είναι ουσιαστικά το προαναφερθέν γινόμενο διαιρεμένο με

την ενέργεια ενός φωτονίου, που δίνεται από τη σχέση $E_{photon} = \frac{hc_0}{\lambda}$, η οποία είναι γνωστή από την

Κβαντομηχανική. Θα ισχύει ότι $h = 4.135667 \cdot 10^{-15} \text{ eV}/\text{s}$ (σταθερά Planck), $c_0 = 3 \cdot 10^8 \text{ m}/\text{s} = 3 \cdot 10^{17} \text{ nm}/\text{s}$

(ταχύτητα φωτός στο κενό), $\lambda = 355nm$ (μήκος κύματος της δέσμης που εκπέμπεται από τη χρησιμοποιούμενη συσκευή Nd:YAG Laser). Από τα παραπάνω, θα γράψουμε τις ακόλουθες γραμμές στον κώδικά μας για να κλείσουμε τη συνάρτηση PhotonAbsorption:

$$\left. \begin{aligned} hPlanck &= 4.135667E-15; \\ c0 &= 3E+17; \\ lamda &= 355; \\ EPhoton &= hPlanck * c0 / lamda; \\ NAP &= asigma .* bsigma .* dsigma / EPhoton; \end{aligned} \right\} \quad (5.23)$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι η αναπαράσταση του πολλαπλασιασμού γίνεται, σε μερικές περιπτώσεις, χρησιμοποιώντας το σύμβολο $.*$, καθώς θέλουμε να πολλαπλασιαστούν μεταξύ τους κάθε ένα από τα στοιχεία κάθε *ταυστή* εντός του γινομένου ξεχωριστά. Το σύμβολο $*$ αναφέρεται μόνο σε πολλαπλασιασμό αριθμών μεταξύ τους, αριθμών με έναν πίνακα ή μιας σειράς από i πίνακες, έστω n_1, n_2, \dots, n_i , για τις οποίες οι εσωτερικές διαστάσεις καθενός από τα ζεύγη $(n_{i-1}, n_i), \{i \in \Xi \mid i \geq 2\}$ είναι ίδιες.

Η συνάρτηση *EnergyAbs*, με μεταβλητή εισόδου *NAP* και εξόδου *AbsEnergyI*, μπορεί να μας δώσει την απορροφούμενη ενέργεια από τα φωτόνια της δέσμης Laser. Θα ισούται με το γινόμενο των ποσοτήτων *NAP* και *EPhoton*, όπως έχουν ήδη εκφραστεί. Διαπιστώνουμε επομένως ότι το γινόμενο $asigma .* bsigma .* dsigma$ ουσιαστικά αντικατοπτρίζει τον αριθμό των απορροφούμενων φωτονίων από το υλικό.

Κατά την ακτινοβολήση των σωματιδίων από τη δέσμη Laser, η απορροφούμενη ενέργεια φωτονίων από τα άτομα μετατρέπεται σε θερμότητα, η οποία ανεβάζει τη θερμοκρασία του συστήματος, προκαλώντας αλλαγές φάσης. Αρχικά τα άτομα που έχουν ξεπεράσει το σημείο τήξης αρχίζουν και τήκονται, μεταπίπτοντας στην υγρή φάση. Η ταχύτητά τους αυξάνεται, αλλά οι δυνάμεις που αποκτούν δεν είναι αρκετές ώστε να υπερνικήσουν τους δεσμούς συνοχής που τα συνδέουν με τον κυρίως όγκο του στόχου. Αυτό όμως αλλάζει όταν έχουν φτάσει σε μία θερμοκρασία τουλάχιστον ίση με το σημείο βρασμού του εκάστοτε υλικού, οπότε και είναι πλέον σε θέση να υπερνικήσουν αυτές τις δυνάμεις συνοχής, ως σωματίδια που έχουν περιέλθει σε αέρια φάση. Όπως θα δούμε και στο Κεφάλαιο 7, το γεγονός ότι ένα άτομο περιέρχεται στην αέρια φάση δε σημαίνει απαραίτητα ότι την ίδια ακριβώς στιγμή απομακρύνεται από τον όγκο του στόχου, γιατί η αλλαγή της φάσης δε συνεπάγεται, στο 100% των περιπτώσεων, ότι το άτομο αποκτά μία τέτοια τιμή ενέργειας που θα είναι μεγαλύτερη από αυτή που το κρατά συνδεδεμένο με τον κυρίως όγκο του δοκιμίου. Για αυτό το λόγο, κρίνουμε ότι είναι καλύτερο να χρησιμοποιηθεί το *κριτήριο ενέργειας συνοχής* που εξετάσαμε στο Κεφάλαιο 4, σύμφωνα με το οποίο

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

άτομα που αποκτούν ενέργεια μεγαλύτερη των 6.82 eV έχουν τη δυνατότητα να απομακρυνθούν από τον κρύσταλλο.

Έπειτα από την απορρόφηση φωτονίων από τα άτομα που ακτινοβολήθηκαν, η κινητική ενέργεια των ατόμων αυτών αυξήθηκε, με την παραδοχή της σταθερής δυναμικής ενέργειας για πολύ μικρά χρονικά διαστήματα. Η νέα κινητική ενέργεια του κάθε ατόμου συγκρίνεται με την ενέργεια συνοχής των 6.82 eV, και γίνεται έλεγχος εάν η ποσότητα $mol.Comp = mol.KinEnergyNew - 6.82$, είναι μεγαλύτερη ή ίση του 0 ή αν ισχύει το αδύνατο. Σε περίπτωση που η τιμή της ποσότητας $mol.Comp$ είναι μη αρνητική, το άτομο που τη χαρακτηρίζει απομακρύνεται από τον κρύσταλλο. Για αυτό το λόγο, απαιτείται η εύρεση των αντίστοιχων ατόμων (με τη βοήθεια της συνάρτησης *find*) και η ενσωμάτωσή τους σε μία καινούργια μεταβλητή (έστω *doRemoveA*). Αυτή η μεταβλητή θα αποτελείται από τρεις σειρές ανά άτομο, μία για κάθε συνιστώσα x , y και z . Με βάση τη διαδικασία που θα περιγραφεί με τη βοήθεια των σειρών κώδικα (5.25), θα καταλήξουμε στην εύρεση τόσο των «αριθμών ταυτότητας» (identification numbers) για κάθε άτομο που πρόκειται να αφαιρεθεί, όσο και για τον αριθμό αυτών των ατόμων:

```
doRemoveA = find (mol.Comp >= 0);  
doRemove = ceil (mrdivide(doRemoveA,3));  
% Find ID numbers of particles to be ablated  
doRemove1 = unique (doRemove);  
% Find number of particles to be ablated  
doRemove2 = numel (doRemove1);
```

(5.24)

Επίσης, ορίζοντας τη μεταβλητή $xAb1 = 0$ στις αρχικές γραμμές του κώδικα, την προσθέτουμε σε κάθε βήμα στην τιμή *doRemove2*, ώστε εντέλει να εξαχθεί ο αριθμός των ατόμων που έχει αφαιρεθεί μετά την παρέλευση όλων των χρονοβημάτων έως το τρέχον σε κάθε περίπτωση (π.χ. για *StepCount = 10*, η τιμή $xAb1$ περιλαμβάνει όλα τα σωματίδια που έχουν φωτοαποδομηθεί, αρχίζοντας από το 1^ο βήμα και καταλήγοντας στο 10^ο). Έχουμε ταυτόχρονα ορίσει μία συνθήκη σύμφωνα με την οποία ο κώδικας θα σταματά να εκτελείται όταν και τα 3375 (15³) άτομα του όγκου προσομοίωσης έχουν αποδομηθεί. Σε αυτή την περίπτωση, θα εμφανίζεται ένα μήνυμα σφάλματος (*error*) που θα ενημερώνει το χρήστη για αυτή την εξέλιξη.

Η διαδικασία της αφαίρεσης ατόμων από τον όγκο προσομοίωσης θα πρέπει να αναπαρασταθεί με μία σειρά από κατάλληλες εντολές, οι οποίες θα αφαιρούν από την προσομοίωση, και από τη δομή (structure) *mol*, εκείνα τα στοιχεία των τανυστών που περιέχονται στη δομή, τα οποία αντιστοιχούν σε άτομα που πρόκειται να αφαιρεθούν. Για όλους τους τανυστές που αποτελούνται από τρεις σειρές, οι οποίες αναπαριστούν τις συνιστώσες στις x , y και z συντεταγμένες, αντικαθίστανται τα αριθμητικά στοιχεία με έναν κενό πίνακα ([]), με αποτέλεσμα τελικά να απομακρύνονται και να προκύπτουν νέοι τανυστές με λιγότερα στοιχεία. Αν, για παράδειγμα, σε ένα χρονοβήμα απομακρύνονται 100 άτομα από τα 3375 με τα

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

οποία έχει ξεκινήσει η προσομοίωση, τότε η εφαρμογή των εντολών για τις οποίες έχει γίνει λόγος θα οδηγήσει σε νέους τανυστές με 3275 άτομα. Για κάθε μεταβλητή i εντός της δομής mol που μας ενδιαφέρει, θα πληκτρολογηθεί η εντολή εκχώρησης $mol.i (:, doRemove1) = []$, προκειμένου να επιτευχθεί ο επιθυμητός σκοπός.

Κατά τη διάρκεια της εξέλιξης του κώδικα, κατά βάση σε μεταγενέστερα χρονοβήματα, ενδέχεται να εμφανιστούν τιμές που δεν αντικατοπτρίζουν υπαρκτούς (είτε πραγματικούς είτε φανταστικούς / μιγαδικούς) αριθμούς στα αποτελέσματα, κάτι που κατά πάσα πιθανότητα μπορεί να οφείλεται σε διαίρεση ποσοτήτων με μία μηδενική τιμή. Οι τιμές αυτών των ποσοτήτων αντιπροσωπεύονται στον κώδικα ως *NaN* (Not A Number = όχι αριθμός). Μία από τις ποσότητες που, μετά από πολλές δοκιμές τρεξίματος του κώδικα, είναι σίγουρο ότι θα αποκτήσει τιμή NaN, είναι η θερμοκρασία (Temperature), για την οποία τα τελικά αποτελέσματα θα εξαχθούν μέσω μίας συνάρτησης που θα εξεταστεί στη συνέχεια. Ορίζουμε ότι, εάν ισχύει ότι η τιμή Temperature είναι ίση με NaN (δηλαδή $isnan(Temperature) == 1$, με τον αριθμό 1 να αντιστοιχεί στο λογικό NAI μιας συνθήκης και το 0, αντίστοιχα, στο OXI), αυτό θα αναγράφεται στην οθόνη. Στη συνέχεια, θα δίνεται η επιλογή στο χρήστη είτε να συνεχίσει είτε να διακόψει την εκτέλεση του κώδικα. Η πρώτη από τις δύο περιπτώσεις συνήθως δεν έχει μεγάλη σημασία, αλλά παρ'όλα αυτά ενδεχομένως να χρησιμοποιηθεί από διάφορους ερευνητές, σε περίπτωση που θέλουν να παρατηρήσουν την εμφάνιση και την εξέλιξη νέων πιθανών φαινομένων, στα μεταγενέστερα χρονοβήματα από την πρώτη εμφάνιση της τιμής NaN. Συνήθως, από τις δύο επιλογές Y(es) / N(o), επιλέγεται η δεύτερη, οδηγώντας με αυτό τον τρόπο στη διακοπή του κώδικα. Επιλέγουμε, τέλος, όταν απλά πατά ο χρήστης το πλήκτρο *Enter* (*Return*) στο πληκτρολόγιό του, χωρίς προηγουμένως να έχει πατήσει κάποιο άλλο κουμπί που να δείχνει ανοικτά την επιλογή του (πάνω στην επιφάνεια του χώρου εργασίας, Command Window), να εκλαμβάνει ο κώδικας ότι η απάντηση στην ερώτηση του κώδικα σχετικά με τη συνέχιση της προσομοίωσης είναι *καταφατική*. Αντίθετα, η εκχώρηση κάποιας τιμής (αλγεβρικής ή αλφαριθμητικής) διαφορετικής από τις ήδη προαναφερθείσες, στην περιοχή όπου ο χρήστης πληκτρολογεί την επιλογή του, θα λογίζεται από τον αναπτυχθέντα κώδικα ως *αρνητική απάντηση*, με αποτέλεσμα να τερματίζεται απρόοπτα η προσομοίωση. Πάντως, με δεδομένο ότι σε κάθε επανάληψη θα αφαιρούνται στοιχεία από τους πίνακες που αντιστοιχούν και στις τρεις συνιστώσες x , y και z , μπορούμε να θεωρήσουμε ότι ο νέος αριθμός σωματιδίων θα ισούται με το ένα τρίτο των στοιχείων του πίνακα $mol.r$ (ή οποιουδήποτε άλλου αντιστοιχεί στη δομή mol και αρχικά περιελάμβανε όλα τα άτομα του όγκου προσομοίωσης).

Αναφορικά τώρα με τις ταχύτητες των ατόμων που δεν έχουν απομακρυνθεί από τον κρύσταλλο, αυτές θα υπολογιστούν με βάση τις τιμές της κινητικής ενέργειας που έχουν διαμορφωθεί, και λύνοντας

την κλασσική εξίσωση της κινητικής ενέργειας $K = \frac{1}{2}mv^2$ ως προς την ταχύτητα v . Στην προσπάθειά μας να εξαγάγουμε τις νέες ταχύτητες των ατόμων υπό μορφή x , y και z συνιστωσών, καταστρώνουμε αρχικά έναν τανυστή, σε μονάδες κινητικής ενέργειας, που αποτελείται από όλα τα ξεχωριστά στοιχεία της μεταβλητής $mol.rv$, υψωμένα στο τετράγωνο και πολλαπλασιασμένα επί 0.5. Αυτά θα προστεθούν στον τανυστή της απορροφούμενης ενέργειας, και το άθροισμα θα αντικατασταθεί στη σχέση $K = \frac{1}{2}mv^2$ προκειμένου να εξαχθούν οι νέες ταχύτητες λόγω της ακτινοβόλησης. Χωρίς βλάβη της γενικότητας, από τη στιγμή που ένα άτομο που χαρακτηρίζεται από αρχικά αρνητική ταχύτητα (ή έχει τουλάχιστον κάποια συνιστώσα της ταχύτητάς του αρνητική) δεν εμφανίζει αλλαγή στη φορά του παρά μόνο όταν συναντήσει μία ανακλώμενη συνοριακή συνθήκη του όγκου προσομοίωσης, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι συνιστώσες που στο $n-1$ ήταν αρνητικές, θα είναι και στο n . Για αυτό το λόγο, από τον τανυστή $mol.rv$ του προηγούμενου βήματος, θα απομονωθούν οι αρνητικές τιμές, και θα μαζευτούν στη μεταβλητή $VelNeg$, η οποία θα χρησιμοποιηθεί στο επόμενο βήμα προκειμένου εντέλει να καθοριστεί ποιες ταχύτητες θα είναι αρνητικές.

Όσον αφορά τις νέες θερμοκρασίες των ατόμων, θα εφαρμοστεί η ακόλουθη σχέση με γνωστές τις νέες κινητικές ενέργειες K , και θα επιλυθεί ως προς T :

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}k_B T \quad (5.25)$$

με τις ποσότητες m και k_B να έχουν αδιαστατοποιηθεί με τον ίδιο τους τον εαυτό, άρα να λογίζονται ίσες με 1.

Στη συνέχεια, εφαρμόζεται για πρώτη φορά η μέθοδος βατραχοδρασκεισμών *Verlet* (*Leapfrog Verlet*) για την επαναληπτική επίλυση του αλγορίθμου Μοριακής Δυναμικής, με τη βοήθεια της συνάρτησης *LeapfrogStep*, στην οποία ενσωματώνεται η υπόψη μέθοδος. Προκειμένου να εφαρμοστεί η μέθοδος, βασική προϋπόθεση είναι ο επανακαθορισμός των ταχυτήτων των ατόμων λόγω της εφαρμογής της ακτινοβολίας Laser. Η νέα ταχύτητα που αποκτούν τα άτομα του συστήματος θα υπολογιστεί βάση της νέας κινητικής ενέργειας που αυτά αποκτούν. Με δεδομένο ότι το χρονικό διάστημα που μεσολαβεί από την έναρξη έως την ολοκλήρωση ενός χρονοβήματος, μπορεί να θεωρηθεί αμελητέο (άλλωστε τα 10 ps είναι μία χρονική διάρκεια που είναι πρακτικά αδύνατο να γίνει αντιληπτή από το γυμνό μάτι), μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η δυναμική ενέργεια κάθε ατόμου παραμένει αμετάβλητη, ενώ η κινητική αυξάνεται κατά την ποσότητα της ενέργειας φωτονίων που απορροφάται από κάθε άτομο ξεχωριστά.

Για τη συγκεκριμένη συνάρτηση, η μεταβλητή εξόδου είναι η δομή (structure) που αφορά τα άτομα (mol), ενώ οι μεταβλητές εισόδου είναι οι mol , dt και $part$, με την τελευταία να αναπαριστά το ένα από τα

δύο τμήματα της συνάρτησης, τα οποία εφαρμόζονται σε δύο διαφορετικές χρονικές στιγμές, στα πλαίσια της πλήρους εφαρμογής της μεθόδου. Ο λόγος για τον οποίο δεν εφαρμόζονται και τα δύο τμήματα της συνάρτησης σαν ένα ενιαίο σύνολο (δηλαδή όχι ξεχωριστά το ένα από το άλλο), είναι το γεγονός ότι ανάμεσα σε αυτά απαιτείται ο υπολογισμός των δυνάμεων και των επιταχύνσεων, μέσω της κλήσης ξεχωριστής συνάρτησης, η οποία ονομάζεται *ComputeForces*.

Πιο συγκεκριμένα, στο πρώτο τμήμα της συνάρτησης *LeapfrogStep*, εκχωρούμε την τιμή I στη μεταβλητή *part*, ορίζοντας $part = I$. Σε αυτό το τμήμα, χρησιμοποιούμε τις παλιές τιμές των επιταχύνσεων προκειμένου να υπολογίσουμε τις ταχύτητες. Μία εξίσωση που περιγράφει τα παραπάνω με εύκολο αλλά και αποτελεσματικό τρόπο είναι η ακόλουθη:

$$\mathbf{x}\left(t + \frac{dt}{2}\right) = \mathbf{x}(t) + \frac{dt}{2} \mathbf{a}(t) \Rightarrow \mathbf{v}\left(t + \frac{dt}{2}\right) = \mathbf{v}(t) + \frac{dt}{2} \mathbf{a}(t) \quad (5.26)$$

Ταυτόχρονα με την (5.11), το πρώτο τμήμα της συνάρτησης περιλαμβάνει και τον υπολογισμό των καινούργιων συντεταγμένων των ατόμων αφότου έχει παρέλθει ένα ολόκληρο χρονικό βήμα:

$$x(t + dt) = x(t) + dt \cdot \mathbf{v}\left(t + \frac{dt}{2}\right) = x(t) + dt \cdot \mathbf{v}\left(t + \frac{dt}{2}\right) \quad (5.27)$$

Η εισαγωγή των δύο παραπάνω σχέσεων στον κώδικα MATLAB γίνεται υπό την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{aligned} mol.rv &= mol.rv + 0.5 * deltaT * mol.ra \\ mol.r &= mol.r + deltaT * mol.rv \end{aligned} \quad (5.28)$$

Η εφαρμογή του δεύτερου τμήματος ($part == 2$) της συνάρτησης *LeapfrogStep* αφορά τον υπολογισμό των νέων ταχυτήτων των σωματιδίων, κατόπιν πρόσθεσης και του υπόλοιπου μισού χρονικού βήματος στο οποίο γίνονται οι διεργασίες της μητρικής συνάρτησης *SingleStep*. Για την εφαρμογή αυτή απαιτούνται οι νέες δυνάμεις και επιταχύνσεις των σωματιδίων, συναρτήσει των θέσεών τους στο επίπεδο. Προκειμένου αυτά τα μεγέθη να υπολογιστούν, θα πρέπει να κληθεί η συνάρτηση *ComputeForces*, μέσω της οποίας υπολογίζονται οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα. Η δύναμη αλληλεπίδρασης μεταξύ ατόμων οποιουδήποτε υλικού μπορεί να υπολογιστεί με τη βοήθεια της εξής σχέσης, η οποία αποτελεί μια απλοποιημένη μορφή εξισώσεων όπως η (4.72):

$$F_{ij}(r_{ij}) = 2aD \left(e^{-2a(r_{ij}-r_c)} - e^{-a(r_{ij}-r_c)} \right) \quad (5.29)$$

όπου r_{ij} είναι η απόσταση μεταξύ γειτονικών σωματιδίων και οι παράμετροι D , a και r_c λαμβάνουν τις ακόλουθες τιμές για αλληλεπίδραση μεταξύ ατόμων μολυβδαινίου (Mo), όπως αναφέρεται χαρακτηριστικά στη βιβλιογραφία [153][161]:

- $D = 0.8032 \text{ eV}$,

- $a = 1.5079 \text{ \AA}^{-1}$,
- $r_0 = 2.976 \text{ \AA}$.

Με τη βοήθεια των παραπάνω δεδομένων, η (5.29) μπορεί να μετασχηματιστεί στην (5.30) ως εξής:

$$F_{ij}(r_{ij}) = 2aD \left(e^{-2a(r_{ij}-r_c)} - e^{-a(r_{ij}-r_c)} \right) = 2.42229056 \left(e^{-3.1158(r_{ij}-2.976)} - e^{-a(r_{ij}-2.976)} \right) \quad (5.30)$$

με τη δύναμη αλληλεπίδρασης να δίνεται σε $eV/\text{Angstrom}$ για απόσταση μεταξύ ατόμων εκπεφρασμένη σε \AA . Σε μορφή MATLAB, αυτή η εξίσωση θα εκφραστεί ως εξής:

$$fcVal = 2.4223 * (\exp(-3.1158 * (r - 2.976)) - \exp(-1.5079 * (r - 2.976))) \quad (5.31)$$

Για τον υπολογισμό των αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα άτομα Mo , θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος όλων των ζευγών, στην οποία θα λαμβάνεται υπόψη η απόσταση αποκοπής r_c . Πιο συγκεκριμένα, εάν τα άτομα αυτά απέχουν περισσότερο από αυτή την απόσταση, οι δυνάμεις αλληλεπίδρασής τους, ως αμελητέες, θα λαμβάνονται μηδενικές. Αν, αντί για μηδενικές τιμές, ορίσουμε υπαρκτές πεπερασμένες τιμές σε αυτές τις μηδαμινές δυνάμεις, θα εισαγάγουμε αχρείαστη αυξημένη πολυπλοκότητα στους υπολογισμούς μας, χωρίς να επιτύχουμε υπολογίσιμες διαφορές στα αποτελέσματα. Για αυτό το λόγο, εισαγάγαμε στον κώδικα τη συνθήκη *if* ($rr \leq rCutoff$), ώστε να υπολογιστούν οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης για όσα ζεύγη ατόμων χαρακτηρίζονται από απόσταση μικρότερη ή ίση με την απόσταση αποκοπής. Σε περίπτωση που η παραπάνω συνθήκη δεν ικανοποιείται, ουσιαστικά είναι σαν η κλήση της συνάρτησης *ComputeForces* εντός της μητρικής συνάρτησης *SingleStep* να παρακάμπτεται. Έπειτα από τον υπολογισμό των δυνάμεων, και ευρισκόμενοι πάντα εντός της προαναφερθείσας συνθήκης IF, ακολουθεί η εξαγωγή των επιταχύνσεων κάθε i -οστού ατόμου, χρησιμοποιώντας τη σχέση

$$F_i = ma_i \Rightarrow a_i = \frac{F_i}{m} \text{ που ουσιαστικά αναπαριστά το δεύτερο νόμο του Νεύτωνα. Για τον υπολογισμό των}$$

επιταχύνσεων των *boundary* ατόμων, αρκεί απλά η εξίσωσή τους με τις *παλιές* επιταχύνσεις τους (*raold.partboundary*), οι οποίες είναι μηδενικές καθ'όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης, όπως έχει ήδη αναφερθεί. Αυτή η εξίσωση τοποθετείται εκτός της συνθήκης IF γιατί αφορά όλες τις πιθανές περιπτώσεις, χωρίς να λαμβάνεται υπόψη το ζήτημα της απόστασης αποκοπής.

Έπειτα από την κλήση της *ComputeForces*, μπορούμε πλέον να προχωρήσουμε στον υπολογισμό των νέων ταχυτήτων για τα άτομα Mo εντός του συστήματος, καλώντας το δεύτερο τμήμα της συνάρτησης *LeapfrogStep*. Αφότου έχει ήδη γίνει χρήση των καινούργιων συντεταγμένων που έχουν προκύψει από το πρώτο βήμα, προκειμένου να εξαχθούν οι νέες δυνάμεις και επιταχύνσεις, υπολογίζονται και οι ταχύτητες προσθέτοντας και το υπόλοιπο μισό χρονικό βήμα. Θα γίνει χρήση της ακόλουθης σχέσης:

$$\dot{x}(t+dt) = \dot{x}\left(t + \frac{dt}{2}\right) + \frac{dt}{2} \ddot{x}(t+dt) \Rightarrow v(t+dt) = v\left(t + \frac{dt}{2}\right) + \frac{dt}{2} a(t+dt) \quad (5.32)$$

η οποία θα εισαχθεί στον κώδικα MATLAB υπό την ακόλουθη μορφή:

$$mol.rv = mol.rv + 0.5.*dt.*mol.ra \quad (5.33)$$

εφόσον προφανώς οριστεί $part == 2$ για το τμήμα της συνάρτησης που θα κληθεί.

Η εφαρμογή των δύο τμημάτων της συνάρτησης *LeapfrogStep*, ταυτόχρονα με την κλήση της *ComputeForces*, εξασφαλίζουν τον υπολογισμό των νέων δυνάμεων αλληλεπίδρασης και επιταχύνσεων σε κάθε χρονικό βήμα, με βάση τις τιμές που προέκυψαν από προηγούμενες επαναλήψεις. Με αυτό τον τρόπο μπορούμε να έχουμε μία πλήρη και αξιόπιστη εικόνα των θέσεων των σωματιδίων στον όγκο προσομοίωσης, αλλά και της ταχύτητας του κέντρου μάζας (*Center Mass Velocity*, v_{cm}) από βήμα σε βήμα, με τα δύο αυτά μεγέθη να αποτυπώνονται πάνω στην κεντρική οθόνη του λογισμικού MATLAB καθώς εξελίσσεται ο κώδικας, και τις θέσεις των ατόμων να απεικονίζονται γραφικά σε μία ξεχωριστή οθόνη που περιλαμβάνει ένα διαξονικό σύστημα συντεταγμένων. Η οθόνη αυτή θα σχηματιστεί στα πλαίσια της διατύπωσης και κλήσης της συνάρτησης *graphOut*, όπως θα δούμε στη συνέχεια της ανάλυσής μας. Αυτό που μπορούμε να αναφέρουμε επί του παρόντος είναι το ότι η συνάρτηση *graphOut* αποσκοπεί στην αποτύπωση των ατόμων του δοκιμίου με βάση τις συντεταγμένες που έχουν οριστεί για αυτά, και οι οποίες αλλάζουν έπειτα από κάθε χρονική επανάληψη του κώδικα. Με αυτό τον τρόπο, παρατηρείται η διαδικασία αφαίρεσης υλικού λόγω της δέσμης Laser που εφαρμόζεται πάνω στο δοκίμιο.

Έπειτα από την πραγματοποίηση όλων των απαραίτητων υπολογισμών για ένα συγκεκριμένο βήμα, και ενώ ακόμα δεν έχουμε εγκαταλείψει τη συνάρτηση *SingleStep*, καλούμε τη συνάρτηση *EvalProps* προκειμένου να υπολογίσουμε το άθροισμα των ταχυτήτων και των τετραγώνων τους (*vSum* και *vvSum*, αντίστοιχα), την τιμή της συνολικής ενέργειας, αυτή της κινητικής ενέργειας ενός συστήματος, για το χρονικό βήμα που εξετάζεται, αλλά και αυτή της δυναμικής, με τη σημείωση ότι η ολική ενέργεια, κατά τα γνωστά από βασικές αρχές φυσικής, είναι ουσιαστικά το άθροισμα της κινητικής και της δυναμικής ενέργειας του συστήματος. Αν *uSum* η συνολική δυναμική ενέργεια που προκύπτει από την εφαρμογή της συνάρτησης δυναμικού Morse (Morse Potential Function – MPF) για κάθε χρονική επανάληψη, τότε θα εφαρμοστούν οι ακόλουθες σχέσεις για τον υπολογισμό των ενεργειών που μας ενδιαφέρουν:

$$\left. \begin{aligned} kinEnergy.val &= 0.5*vvSum / nMol; \\ potEnergy.val &= uSum / nMol; \\ totEnergy.val &= kinEnergy.val + potEnergy.val; \end{aligned} \right\} \quad (5.34)$$

Στα πλαίσια της *EvalProps* μπορούμε να υπολογίσουμε και τη μέση θερμοκρασία του συστήματος ανά χρονική επανάληψη, επιλύοντας την (5.8) ως προς T:

- Σε αριθμητική μορφή (τύπων):
$$T = \frac{v^2}{2\left(1 - \frac{1}{N}\right)} \quad (5.35)$$

- Σε μορφή MATLAB: $Temperature.val = vvSum / 2 / (1 - 1 / nMol)$ (5.36)

(το ελληνικό ερωτηματικό / semicolon εννοείται, καθώς δε θέλουμε το αποτέλεσμα να εμφανίζεται στην οθόνη του Command Window).

Η κλήση της συνάρτησης SingleStep ολοκληρώνεται καλώντας τις ακόλουθες τρεις συναρτήσεις – υπορουτίνες, που απαιτούνται για να συντελεστεί μία πλήρης διαδικασία αναφορικά με την περαίωση ενός χρονικού βήματος κατεργασίας:

- Η συνάρτηση *AccumProps* για *icode = 1* (ή αλλιώς *PropAccum*) αθροίζει τις τιμές που υπολογίστηκαν από την τρέχουσα επανάληψη, ενώ όταν *icode = 2* (καλώντας δηλαδή τη συνάρτηση *PropAvg*) υπολογίζουμε τις τελικές εκτιμώμενες μέσες τιμές, οι οποίες, σε κάθε χρονική επανάληψη, αντικαθιστούν τις προηγούμενες.
- Η συνάρτηση *PrintSummary* χρησιμοποιεί τη συνάρτηση – υπορουτίνα *PropEst*, προκειμένου να εξαγάγει και να τυπώσει, στο Command Window αλλά και στα διαγράμματα που εξάγει η MATLAB (Plots), τα αποτελέσματα από όλα τα μεγέθη που θέλαμε να υπολογίσουμε, στη μορφή που μας ενδιαφέρει. Εμφανίζονται πέντε μορφές της *PrintSummary* στον κώδικα, με τους αριθμούς 1 έως 5 στο τέλος αυτών (δηλαδή *PrintSummary1* έως *PrintSummary5*). Η πρώτη από αυτές τις συναρτήσεις χρησιμοποιείται για την αποτύπωση, στο Command Window, των τιμών για την ταχύτητα του κέντρου μάζας, την ολική ενέργεια του συστήματος, τη θερμοκρασία του συστήματος και την απορροφούμενη ενέργεια από τα φωτόνια ανά επανάληψη. Οι τέσσερις τελευταίες χρησιμοποιούνται για την αποτύπωση των υπόψη μεγεθών σε ένα δισδιάστατο διάγραμμα (Plot).
- Η συνάρτηση *PropZero*, που ουσιαστικά αντιπροσωπεύει την υποκλάση της *AccumProps* για *icode = 0*, μηδενίζει τις μεταβλητές που αντιστοιχούν στα αποτελέσματα του τρέχοντος χρονοβήματος (αφότου αυτά έχουν εξαχθεί), προκειμένου να ξεκινήσει το επόμενο χρονικό βήμα, μαζί με τους υπολογισμούς που το συνοδεύουν.

Η επανάληψη της συνάρτησης SingleStep έχει προγραμματιστεί, εντός του κώδικα, να λάβει χώρα 1000 φορές, έως ότου δηλαδή σταματήσει να εκπέμπεται ο ένας παλμός διάρκειας 10 ns. Για αυτό το λόγο, η προσομοίωση θα λήξει είτε όταν έχουν παρέλθει αυτά τα βήματα, είτε όταν έχουν απομακρυνθεί όλα τα σωματίδια που θέλουμε να αποδομήσουμε. Επίσης, η εμφάνιση τυχόν μηνυμάτων «σφάλματος» (*error messages*) συντελεί στη διακοπή της προσομοίωσης. Μπορεί αυτή να είναι είτε επιθυμητή, καθώς έχει εξυπηρετήσει τους σκοπούς της εκάστοτε προσομοίωσής μας, είτε ανεπιθύμητη, με αποτέλεσμα να

μας οδηγήσει στην ανάγκη να κάνουμε επανέλεγχο ορισμένων στοιχείων του κώδικά μας, προκειμένου να μπορεί να τρέξει (run) ομαλά στη MATLAB, μέσω του Compiler που περιλαμβάνει.

Τα επιθυμητά γραφικά αποτελέσματα, όπως αυτά που σχετίζονται με τη χρονική εξέλιξη της θερμοκρασίας αλλά και της απομάκρυνσης σωματιδίων, εξάγονται σε γραφική μορφή (Plot) με τη βοήθεια της συνάρτησης *graphOut*, ενώ έχουμε ρυθμίσει να ανανεώνεται το διάγραμμα εκείνο που παριστάνει τη διάταξη των ατόμων στο χώρο, από βήμα σε βήμα, με τη βοήθεια της εντολής *refreshdata* που διαθέτει το υπολογιστικό πακέτο MATLAB. Ο κώδικας παρουσιάζει ορισμένα περιθώρια βελτίωσης, με σκοπό να δώσει τα αποτελέσματα με μεγαλύτερη πιστότητα και λεπτομέρεια, αλλά για την παρούσα ανάλυσή μας κρίνεται άκρως ικανοποιητικός και πλήρης.

6. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΗΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ ΤΩΝ ΠΕΙΡΑΜΑΤΩΝ ΦΩΤΟΑΠΟΔΟΜΗΣΗΣ

6.1. Εισαγωγικά στοιχεία – Γνωριμία με την πειραματική διάταξη

Ένας από τους σκοπούς της παρούσας μελέτης μας, όπως αναφέραμε και στα πλαίσια προηγούμενων Κεφαλαίων, είναι η σύγκριση των ποσοτικών αποτελεσμάτων που προκύπτουν μέσω της ανάπτυξης του υπολογιστικού κώδικα MD στη MATLAB, αναφορικά πάντα με το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης, με αυτά που αντιστοιχούν στην πειραματική αναπαράσταση του φαινομένου χρησιμοποιώντας πραγματικά υλικά-στόχους και τον απαραίτητο εξοπλισμό για τη διεξαγωγή των απαραίτητων διαδικασιών. Για το λόγο αυτό, η συνολική ανάλυσή μας περιελάμβανε και την εκπόνηση ενός πειράματος μέσω του οποίου υπάρχει η δυνατότητα τόσο έλευσης σε εγγύτερη επαφή με το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης όσο και κατανόησης των επιμέρους σταδίων που την απαρτίζουν.

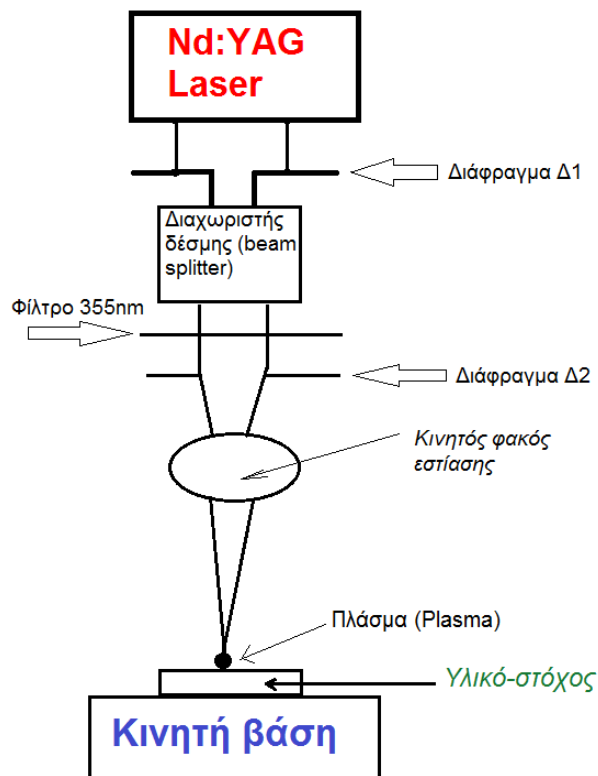
Το πείραμα για το οποίο γίνεται λόγος στο παρόν αλλά και στο επόμενο Κεφάλαιο διεξήχθη στις εγκαταστάσεις του *Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών (ΕΙΕ)* στην Αθήνα, και πιο συγκεκριμένα στο *Εργαστήριο Τεχνικών και Εφαρμογών Laser*, υπό την επίβλεψη των κ.κ. Μιχάλη Κομπίτσα και Παναγιώτας Κοράλλη. Το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης και της αποβολής υλικού από έναν στόχο θα μελετηθεί μέσω της εφαρμογής της διαδικασίας *εγχάραξης* (scribing), με την υπό πρόσπτωση δέσμη Laser να έχει μήκος κύματος 355 nm και τους χρησιμοποιούμενους για τα πειράματα στόχους να αποτελούνται από *μολυβδαίνιο (Mo)* και *χαλκό (Cu)*.

Η πειραματική διάταξη για την εγχάραξη είναι σχετικά απλή και αποτελείται αποκλειστικά και μόνο από τα στοιχεία που είναι απαραίτητα για την πρόσπτωση του Laser στο στόχο και την αλληλεπίδραση μεταξύ αυτών των δύο συνιστωσών. Η βιβλιογραφία [E3] αναφέρει ότι θα μπορούσε το παραπάνω σύστημα να αναπτυχθεί περαιτέρω προσθέτοντας συσκευές εστίασης και ανίχνευσης, οι οποίες θα επέτρεπαν στο Μηχανικό να έχει μία αξιόπιστη οπτική εικόνα για το μέγεθος του σχηματιζόμενου πλάσματος.

Τα απαιτούμενα στοιχεία που απαρτίζουν τη διάταξη, καθώς επίσης και η σχετική τοποθέτησή τους, παρουσιάζονται στο παρακάτω Σχήμα 6.1. Όπως αυτό το Σχήμα δείχνει ξεκάθαρα, η διάταξη

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

περιλαμβάνει το *Nd:YAG* Laser, καθώς επίσης και μία σειρά οπτικών εξαρτημάτων, όπως είναι δύο διαφράγματα, ο διαχωριστής δέσμης, τα φίλτρα 355 nm και οι φακοί εστίασης. Με τη βοήθεια αυτών των εξαρτημάτων, διαμορφώνεται η δέσμη Laser κατά τέτοιον τρόπο ώστε να επιφέρει στο στόχο και στη φωτοαποδόμηση το βέλτιστο αποτέλεσμα κατά την πρόσπτωσή της πάνω σε αυτόν. Αναλυτικότερη περιγραφή κάθε στοιχείου της διάταξης παρουσιάζεται στο επόμενο Εδάφιο.



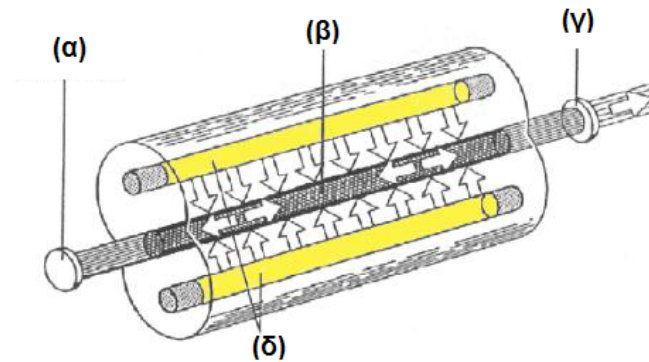
Σχήμα 6.1. Σχηματική αναπαράσταση της πειραματικής διάταξης εγχάραξης (Scribing) που θα χρησιμοποιηθεί στα πλαίσια του πειράματος φωτοαποδόμησης.

6.2. Περιγραφή του *Nd:YAG* Laser

Η διαδικασία της εγχάραξης λεπτών υμενίων έλαβε χώρα με χρήση ενός *Nd:YAG* (Neodymium / Yttrium-Aluminum Garnet) Laser της εταιρείας Quantel. Πρόκειται για μία συσκευή Laser στερεάς κατάστασης, με παλμική λειτουργία και διάρκεια παλμού 10 ns. Μέσα σε μία κρυσταλλική ράβδο υτρίου – αλουμινίου τύπου γρανίτη (YAG, χημικός τύπος: $Y_3Al_5O_{12}$), είναι ενσωματωμένα τρισθενή κατιόντα νεοδυμίου, Nd^{+3} , τα οποία αποτελούν το ενεργό μέσο του ταλαντωτή. Η αναλογία του Nd προς το YAG, είναι, σε αυτή την περίπτωση, 1:100.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Η λειτουργία μιας τυπικής μορφής αυτού του Laser βασίζεται σε έναν ηλεκτρικό ταλαντωτή (*electrical oscillator*), όπου ένας κρύσταλλος διεγείρεται από ένα φως που παράγεται από ειδικές λυχνίες, γνωστές με την ονομασία *flash lamps*. Το Σχήμα 6.2. παρουσιάζει λεπτομερώς το Laser, στο εσωτερικό του:



Σχήμα 6.2. Αναπαράσταση του εσωτερικού ενός Nd:YAG Laser. Διακρίνονται τα ακόλουθα στοιχεία: (α) Οπίσθιος καθρέφτης ολικής ανάκλασης. (β) Ράβδος Laser, αποτελούμενη από ενεργό υλικό. (γ) Πρόσθιος καθρέφτης για την έξοδο της δέσμης. (δ) Λάμπες διέγερσης του ενεργού υλικού (*Flash Lamps*).

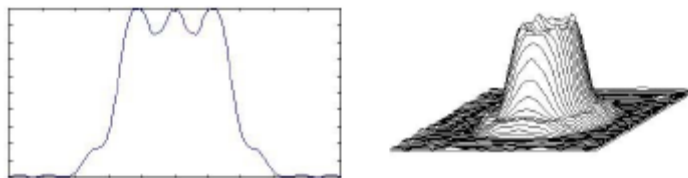
Στη συνέχεια, τα φωτόνια που παράγονται ακολουθούν μία εξαναγκασμένη πορεία μέσα από το ενεργό μέσο του κρυστάλλου, κάτι που οδηγεί σε αναστροφή πληθυσμών. Μέχρι τη στιγμή που αυτή η αναστροφή θα μεγιστοποιηθεί, τίθεται σε λειτουργία ένας ηλεκτροπτικός διακόπτης, που περιλαμβάνει έναν πολωτή και έναν αναλυτή και είναι τοποθετημένος στο *αντηχείο* της διάταξης. Τη στιγμή της μεγιστοποίησης της αναστροφής πληθυσμών, ένας ηλεκτρικός παλμός που παίζει το ρόλο διακόπτη (*Q-switch*) αναστρέφει την πόλωση του αναλυτή, επιτρέποντας στο Nd:YAG Laser να δράσει και να παραγάγει έναν παλμό διάρκειας 10 ns με ιδιαίτερα μεγάλη ένταση.

Η θεμελιώδης ακτινοβολία Laser χαρακτηρίζεται από μήκος κύματος 1064 nm. Αυτή η τιμή μπορεί να ελαττωθεί μέσω *υποπολλαπλασιασμού*, τον οποίο αναλαμβάνει μια σειρά από κρυστάλλους με μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες. Με αυτό τον τρόπο, το μήκος κύματος μπορεί είτε να υποδιπλασιαστεί, λαμβάνοντας την τιμή 532 nm, είτε, όπως στην περίπτωση που εξετάζουμε επί του παρόντος, να υποτριπλασιαστεί, μέχρι τα 355 nm. Για να επιτευχθεί το επιθυμητό μήκος κύματος της ακτινοβολίας, ρυθμίζεται χειροκίνητα η θέση των κατόπτρων μέσα στη συσκευή. Επιπλέον, η μεταβολή της γωνιακής θέσης των κρυστάλλων μπορεί να οδηγήσει στη μεταβολή της ενέργειας του Laser, εφόσον το μήκος κύματος διατηρεί μια σταθερή τιμή.

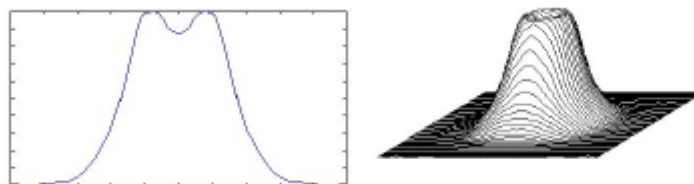
6.3. Περιγραφή των οπτικών εξαρτημάτων και της διέλευσης της δέσμης από αυτά

Ο βασικός σκοπός που πρέπει να υλοποιηθεί ώστε η πρόσπτωση της δέσμης Laser στο στόχο να επιφέρει τα βέλτιστα αποτελέσματα, είναι η *διαμόρφωση* του προφίλ της δέσμης, κατά τέτοιον τρόπο ώστε αυτό να γίνει *ομοιόμορφο*. Αρχικά κάτι τέτοιο δε συμβαίνει, με την ανομοιομορφία που παρουσιάζεται να οφείλεται στην ύπαρξη σημείων και περιοχών με μεγαλύτερη ενέργεια από τα υπόλοιπα (*hot spots*). Η πρόσπτωση μιας δέσμης με αυτά τα χαρακτηριστικά πάνω σε ένα υλικό δημιουργεί *κρατήρες* σε αυτό, καθιστώντας τη φωτοαποδόμηση ανομοιόμορφη, ακριβώς όπως συμβαίνει με την ίδια τη δέσμη.

Η πειραματική διάταξη που εξετάζουμε επί του παρόντος περιλαμβάνει μία σειρά από διαφράγματα, φακούς και φίλτρα, των οποίων ο σκοπός είναι η μορφοποίηση του προφίλ που εμφανίζεται στο Σχήμα 6.3., κατά τέτοιον τρόπο ώστε να λάβει τελικά τη μορφή που απεικονίζεται στο Σχήμα 6.4.: [160]



Σχήμα 6.3. Το προφίλ της δέσμης όταν αυτή εξέρχεται από το Nd:YAG Laser και πριν περάσει από τα εξαρτήματα μορφοποίησης της δέσμης.



Σχήμα 6.4. Το ομογενοποιημένο προφίλ της δέσμης που παρουσιάστηκε στο Σχήμα 6.3., όπου η επιφάνεια του στόχου είναι πλήρως ομοιόμορφη και δεν εμφανίζονται κρατήρες.

Η διάταξη του Σχήματος 5.1. περιλαμβάνει δύο διαφράγματα, έστω $\Delta 1$ και $\Delta 2$, ένα διαχωριστή δέσμης (beam splitter), ένα φίλτρο (filter) για το μήκος κύματος των 355 nm και έναν κινητό φακό εστίασης της δέσμης. Αρχικά, η δέσμη διέρχεται από το διάφραγμα $\Delta 1$, ακολουθώντας την κατεύθυνση που παρουσιάζεται στα πλαίσια του Σχήματος 6.5.. Το διάφραγμα αυτό χρησιμοποιείται για την αποκοπή των περιφερειακών περιοχών της δέσμης, οι οποίες παρουσιάζουν χαμηλότερη ενέργεια από τις κεντρικές. Με αυτό τον τρόπο απομονώνονται οι περιοχές που χαρακτηρίζονται από μέγιστη ενέργεια. Επιπλέον,

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

διαμορφώνεται η διάμετρος της δέσμης μέχρι να λάβει την επιθυμητή κάθε φορά τιμή. Στις περισσότερες περιπτώσεις η διάμετρος επιθυμούμε να είναι 6 mm.



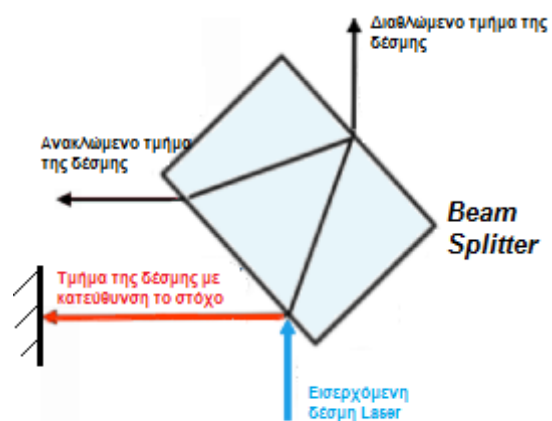
Σχήμα 6.5. Αναπαράσταση του διαφράγματος Δ1 της πειραματικής διάταξης, καθώς και της κατεύθυνση της δέσμης Laser πριν διέλθει μέσα από αυτό.

Αφού η δέσμη περάσει μέσα από το διάφραγμα Δ1, εισέρχεται στο διαχωριστή δέσμης (beam splitter). Η λειτουργία αυτού του εξαρτήματος είναι η ανάκλαση και διάθλαση μέρους της δέσμης που εισέρχεται σε αυτό. Το τελικό αποτέλεσμα που επιτυγχάνεται είναι η αισθητή μείωση της ενέργειας της δέσμης έως τα επίπεδα που επιθυμούμε, χωρίς όμως να μεταβάλλεται η μορφή της ίδιας της δέσμης. Μία τέτοια λειτουργία είναι ζωτικής σημασίας για το υπό διεξαγωγή πείραμα, καθώς η ανάγκη για επίτευξη σταθερής ενέργειας δέσμης μας οδηγεί στη διενέργεια της εγχάραξης κάτω από πολύ υψηλές τιμές ενέργειας Laser για τα δεδομένα του scribing. Πιο συγκεκριμένα, στο παρόν πείραμα χρησιμοποιήσαμε μόνο το 10% της ενέργειας αυτής για να πραγματοποιήσουμε την εγχάραξη.

Το Σχήμα 6.6. παρουσιάζει τόσο το διαχωριστή δέσμης όσο και ένα απλό σχεδιάγραμμα περιγραφής της αρχής λειτουργίας του:



(α)

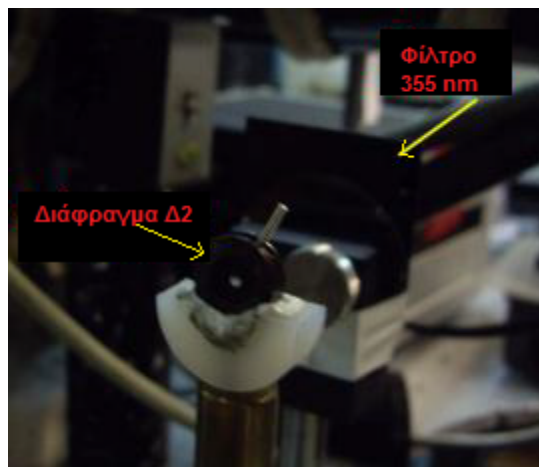


(β)

Σχήμα 6.6. (α) Σχηματική αναπαράσταση του διαχωριστή δέσμης (*Beam Splitter*). (β) Επισκόπηση της αρχής λειτουργίας του.

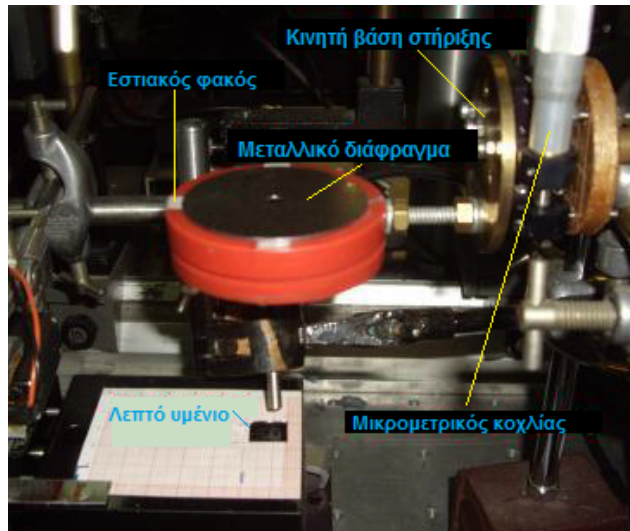
Το πάχος του διαχωριστή επιλέξαμε να είναι αρκετά μεγάλο, κάτι που θα μας βοηθήσει να χρησιμοποιήσουμε, στα πλαίσια της εγχάραξης, το τμήμα εκείνο που παρουσιάζει τη μικρότερη ενέργεια και το οποίο κατευθύνεται προς το στόχο (βλ. κόκκινο βέλος στο Σχήμα 6.6.). Τα τμήματα που παρουσιάζουν μεγαλύτερες ενέργειες χρησιμοποιούνται για σκοπούς που δε σχετίζονται με την εγχάραξη, όπως εναπόθεση λεπτών υμενίων μέσω παλμικής εναπόθεσης με Laser (PLD). Το μεγάλο πλεονέκτημα της ύπαρξης και λειτουργίας του διαχωριστή είναι η δυνατότητα επιτέλεσης διαφόρων λειτουργιών με την ίδια διάταξη, χωρίς δηλαδή να δημιουργείται η ανάγκη για αλλαγή αυτής.

Στη συνέχεια, η δέσμη διέρχεται μέσα από ένα φίλτρο 355 nm, με τη βοήθεια του οποίου αποκόπτουμε όλα τα μήκη κύματος της ακτινοβολίας Laser που βρίσκονται κοντά στα 355 nm. Στη συνέχεια, αυτά τα μήκη κύματος, τα οποία αποτελούν την καινούργια δέσμη, διέρχονται μέσα από ένα δεύτερο διάφραγμα Δ2, μέσω του οποίου η διάμετρος της δέσμης ελαττώνεται περαιτέρω, φτάνοντας στα 2 mm περίπου.



Σχήμα 6.7. Το διάφραγμα Δ2 και το φίλτρο 355 nm της πειραματικής διάταξης.

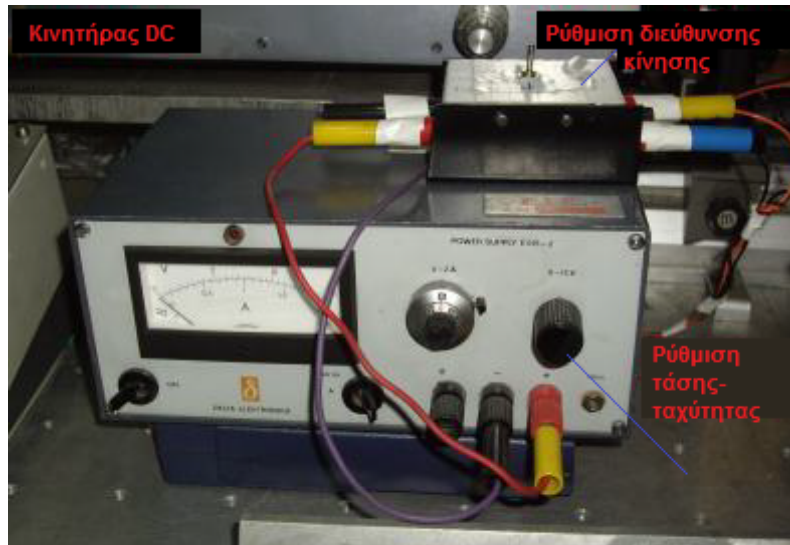
Το επόμενο βήμα που ακολουθείται από τη δέσμη είναι η διέλευσή της μέσα από το φακό εστίασης, ο οποίος έχει τοποθετηθεί πάνω σε μία κινητή βάση με μικρομετρικό κοχλία. Με αυτό τον τρόπο, δίνεται η δυνατότητα κίνησης του φακού κάθετα προς τον άξονα στον οποίο είναι τοποθετημένος ο στόχος. Κάθε φορά που το πάχος του στόχου ή η ενέργεια του Laser μεταβάλλεται, αλλάζει και η εστιακή απόσταση του φακού. Με την τοποθέτησή του στην κινητή βάση με το μικρομετρικό κοχλία, επιτυγχάνουμε την επανατοποθέτησή του στην κατάλληλη θέση, ανάλογα με την περίπτωση, με την ακρίβεια που απαιτείται ώστε η διάταξη να δουλεύει αποδοτικά.



Σχήμα 6.8. Φακός εστίασης, μικρομετρικός κοχλίας κίνησης της βάσης στήριξης του φακού και μεταλλικό διάφραγμα.

Πάνω στο φακό εστίασης τοποθετείται το μεταλλικό διάφραγμα, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 6.8. παραπάνω. Ο σκοπός του διαφράγματος είναι να αποτρέψει τυχόν ανακλάσεις από τη δέσμη Laser να εισέλθουν στο φακό, δημιουργώντας ανεπιθύμητες ανομοιομορφίες κατά την εγχάραξη.

Το υλικό-στόχος, πάνω στο οποίο τελικώς καταλήγει η δέσμη Laser, είναι τοποθετημένο πάνω σε μία κινητή βάση, η οποία στηρίζει την κίνησή της στη σύνδεση αυτής με έναν κινητήρα συνεχούς ρεύματος (Direct Current, DC), ο οποίος εμφανίζεται στο παρακάτω Σχήμα 6.9.. Ο κινητήρας αυτός περιστρέφει έναν τροχό, ο οποίος είναι συνδεδεμένος με έναν μικρομετρικό κοχλία που αναλαμβάνει την κίνηση της βάσης. Η σύνδεση μεταξύ τροχού και κοχλία γίνεται μέσω ενός *ιμάντα*. Ο διακόπτης που περιλαμβάνει ο κινητήρας αλλάζει την πολικότητα του ρεύματος, κάτι που έχει ως επακόλουθο τη ρύθμιση της διεύθυνσης κίνησης τόσο του *ιμάντα*, όσο και του στόχου (προς τα αριστερά ή προς τα δεξιά). Ο κινητήρας περιλαμβάνει επίσης έναν περιστροφικό ρυθμιστή της ταχύτητας της βάσης, ο οποίος αυξομειώνει την ταχύτητα μέσω της αντίστοιχης μεταβολής της τάσης του κινητήρα.



Σχήμα 6.8. Απεικόνιση του κινητήρα συνεχούς ρεύματος (DC) που χρησιμοποιείται στο πείραμα.

6.5. Περιγραφή των διεξαχθέντων πειραμάτων

Εντός του Εργαστηρίου Laser του Ινστιτούτου Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών (ΕΙΕ), αφιερώσαμε μία ημέρα στη μελέτη του φαινομένου της φωτοαποδόμησης υπό πραγματικές συνθήκες, καθώς επίσης και στη διερεύνηση της επίδρασης που μπορεί να έχει αυτό το φαινόμενο πάνω σε ένα υλικό. Έχοντας στη διάθεσή μας το λεπτό υμένιο από μολυβδαίνιο (Mo) και το λεπτό έλασμα από αλουμίνιο (Al), για τα οποία έχει ήδη γίνει αναφορά στην παραπάνω Υποενότητα, καθώς επίσης και την πειραματική διάταξη που έχουμε περιγράψει στα πλαίσια του τρέχοντος Κεφαλαίου, μπορούμε να επιτύχουμε αποτελεσματικά την αφαίρεση κάποιας ποσότητας υλικού από το υμένιο, μέσω της πρόσπτωσης ενός συγκεκριμένου αριθμού παλμών Laser πάνω σε αυτό. Η κατεργασία που εφαρμόστηκε προκειμένου να μελετηθεί το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης είναι αυτή της *εγχάραξης* (scribing), στην οποία επιδιώξαμε τη δημιουργία μικρών οπών σε βάθος κάποιων nm, χρησιμοποιώντας *λεπτά υμένια* (thin films) ως δοκίμια-στόχους στα οποία θα εφαρμοστεί η ακτινοβολία. Ο τρόπος με τον οποίο εκτυλίσσεται η φωτοαποδόμηση κατά την εγχάραξη των υμενίων χρήζει ιδιαίτερης προσοχής, καθώς και η ίδια η κατεργασία της εγχάραξης παίζει κυρίαρχο ρόλο στο πεδίο μελέτης των ηλιακών κυψελών και των φωτοβολταϊκών στοιχείων και διατάξεων, όπως αναφέρει χαρακτηριστικά η βιβλιογραφία [Ε3].

Ένα θετικό στοιχείο που αποδεικνύεται πολύ υποβοηθητικό στην υλοποίηση της διαδικασίας, την οποία ταυτόχρονα διευκολύνει, είναι το γεγονός ότι χρησιμοποιήσαμε λεπτά υμένια αντί για δοκίμια με συγκρίσιμες τις τρεις διαστάσεις (τα λεγόμενα *bulk* υλικά). Στη δεύτερη περίπτωση, η επιτυχής

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

φωτοαποδόμησης και η επαρκής αφαίρεση υλικού απαιτούν πολύ υψηλές τιμές ενέργειας παλμού της δέσμης Laser, οι οποίες μπορούν να φτάσουν μέχρι και σε διψήφια νούμερα σε μονάδες mJ. Κάτι τέτοιο θα πρέπει να προσεχθεί σε ιδιαίτερα μεγάλο βαθμό λόγω του γεγονότος ότι η πειραματική διάταξη που διατίθεται στο ΕΙΕ για την περίπτωση μας, δεν είναι ικανή να παραγάγει παλμούς Laser με ενέργεια μεγαλύτερη των 3 mJ. Η επίτευξη πολύ υψηλότερων τιμών απαιτεί την ενεργοποίηση και άλλων διατάξεων που περιλαμβάνει το Εργαστήριο, οι οποίες όμως δε χρησιμοποιούνται για τυπικούς πειραματικούς σκοπούς, παρά μόνο για σαφώς πιο εξειδικευμένες εφαρμογές. Ακόμα και στην περίπτωση κατά την οποία θα μπορούσε να συντελεστεί στον επιθυμητό βαθμό η φωτοαποδόμηση περιοχών ενός bulk υλικού με παλμούς 3 mJ, κάτι τέτοιο θα ήταν ιδιαίτερα χρονοβόρο και δε θα εξασφάλιζε την επιτυχία του φαινομένου υπό οποιεσδήποτε συνθήκες. Ένα επιπλέον στοιχείο που αφορά τα λεπτά υμένια και μας οδηγεί στη χρησιμοποίησή τους έναντι των *bulk* υλικών, είναι το γεγονός ότι, λόγω του ότι η μία διάσταση ενός thin film (αυτή του πάχους) είναι σημαντικά μικρότερη από τις υπόλοιπες δύο, υπάρχει η δυνατότητα φωτοαποδόμησης όλου του υλικού που περικλείεται μέσα στο spot πάνω στο οποίο προσπίπτει η δέσμη Laser, με επενέργεια ενός μόνο παλμού, εφόσον έχει επιλεγεί μία κατάλληλη και επαρκώς υψηλή τιμή πυκνότητας ενέργειας (ή ροής ακτινοβολίας) Laser, F . Τέλος, είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι οι πολύ υψηλές τιμές ενέργειας Laser ενδέχεται να προκαλέσουν αφαίρεση υλικού από το δοκίμιο σε βαθμό μεγαλύτερο από αυτό που επιθυμούμε, καθώς επίσης και να σχηματίσουν, σε μικροσκοπικό βέβαια βαθμό μέσα στο δοκίμιο, διατάξεων που οπτικά μοιάζουν με «αυτιά».

Αρχικά, το υλικό-στόχος τοποθετείται πάνω στην κινητή βάση. Στη συνέχεια, ενεργοποιείται το Nd:YAG Laser και εκπέμπεται η δέσμη *μπλε* φωτός μήκους κύματος 355 nm, με τη βοήθεια του φίλτρου για το συγκεκριμένο μήκος κύματος. Ο λόγος για τον οποίο πραγματοποιείται διέλευση του φωτός μέσα από το διάφραγμα Δ1 είναι η εξάλειψη της διαρροής ποσοτήτων φωτός εκτός της επιθυμητής κατεύθυνσης, ενώ αυτή η διαπίστωση υπαγορεύει επίσης τη χρήση και του δεύτερου διαφράγματος (Δ2). Ο σκοπός που πρέπει να υλοποιηθεί είναι να μην υπάρχουν γενικά απώλειες ενέργειας, ούτε καν από ανακλάσεις, έτσι ώστε να γίνει πλήρως εκμεταλλεύσιμη η μέγιστη δυνατή ποσότητα φωτός. Σημειώνεται ότι η διάμετρος της σχισμής του διαφράγματος Δ2, μέσα από το οποίο διέρχεται η μονοχρωματική δέσμη, είναι ίση με 3 mm.

Αφότου η επιθυμητή δέσμη έχει διέλθει από τα διαφράγματα, γίνεται χρήση ενός χαρτιού για την ευθυγράμμισή της και την πλήρη ανάκλασή της, έτσι ώστε να μπορέσει εντέλει να προσπέσει πάνω στο στόχο χωρίς την παραμικρή απώλεια ενέργειας. Ταυτόχρονα, ο φακός εστίασης που περιλαμβάνει η υπόψη διάταξη μετακινείται στην επιθυμητή θέση (spot), πάνω στην οποία θα επενεργήσει ο κάθε παλμός Laser. Βέβαια, όσο εκπέμπεται η δέσμη, θα χρειαστεί να χρησιμοποιηθεί ακόμα ένα χαρτί το

οποίο θα καλύπτει την κινητή βάση και το στόχο (χωρίς όμως να βρίσκεται σε επαφή με αυτά), για να μην έχουμε διαρκή πρόσπτωση παλμών που θα μπορούσε να προκαλέσει φθορά σε οποιοδήποτε από τα δύο προαναφερθέντα στοιχεία, ή να δημιουργήσει άλλα προβλήματα όσον αφορά τον επιθυμητό βαθμό φωτοαποδόμησης ή την εξαγωγή των τελικών αποτελεσμάτων και συμπερασμάτων. Όπως θα δούμε και στη συνέχεια, επιλέγεται να τοποθετηθεί ένα ακόμα χαρτί λίγο πάνω από τη βάση, το οποίο είτε θα απορροφά πλήρως το Laser είτε θα το ανακλά προς μία κατεύθυνση που δε θα παρεμβαίνει αρνητικά στη διαδικασία. Αυτό το χαρτί θα αφαιρείται προσωρινά όταν θέλουμε να προσπέσει ένας παλμός πάνω στο στόχο, ενώ στη συνέχεια θα επανατοποθετείται πάνω από αυτόν. Με αυτό τον τρόπο θα είναι εφικτή η παρατήρηση των αποτελεσμάτων που θα έχει το φαινόμενο αότου επενεργήσει ο παλμός. Προφανώς δεν είναι δυνατή η παρακολούθηση της *χρονικής εξέλιξης* του φαινομένου, επειδή λαμβάνει χώρα σε χρονική κλίμακα *nanoseconds* (10^{-9} s), με το χρονικό διάστημα αυτό να μη γίνεται αντιληπτό από τον άνθρωπο, ο οποίος γενικά αντιλαμβάνεται χρονικές διαφορές κατά τουλάχιστον έξι (6) τάξεις μεγέθους μεγαλύτερες, δηλαδή στο επίπεδο των *ms*.

Καταρχήν, όπως έχει ήδη αναφερθεί παραπάνω, επιλέγουμε τα 3 mJ ως την αρχική τιμή της ενέργειας του Laser που θα προσπέσει πάνω στο στόχο. Έπειτα, ρυθμίζουμε τη συχνότητα του κινητήρα / ρυθμιστή συχνότητας της διάταξης του Nd:YAG Laser στα 2 Hz , από 10 Hz που είναι η καθορισμένη ρύθμιση. Με τη μεταβολή της συχνότητας στα 2 Hz εξασφαλίζουμε ότι θα παράγονται 2 παλμοί ανά δευτερόλεπτο από τη συγκεκριμένη διάταξη. Με αυτό τον τρόπο αποκτάμε καλύτερο έλεγχο της διαδικασίας καθώς υπάρχει περισσότερος διαθέσιμος χρόνος προκειμένου να μετακινήσουμε το χαρτί που καλύπτει το στόχο, ώστε να προσπέσει πάνω του *ακριβώς* ένας παλμός.

Κατά τη διάρκεια του πειράματος, επελέγησαν συνολικά έξι (6) διαφορετικά σημεία πάνω σε κάθε ένα από τα υλικά (Mo και Al) στα οποία εφαρμόστηκε ο παλμός. Πιο συγκεκριμένα, τα πειράματα διεξήχθησαν χρησιμοποιώντας τρεις διαφορετικές τιμές της πυκνότητας ενέργειας του παλμού Laser, από αυτές που μπορεί να υποστηρίξει η διατιθέμενη διάταξη του Εργαστηρίου: 3 mJ , 2 mJ και 1 mJ . Για κάθε μία από τις τρεις ενέργειες εφαρμόσαμε έναν παλμό σε δύο διαφορετικές θέσεις (spots) κάθε δοκιμίου – έτσι προέκυψαν τα έξι σημεία που επελέγησαν για την πραγματοποίηση του πειράματος.

6.6. Περιγραφή της διαδικασίας παρατήρησης των φωτοαποδομηθέντων δοκιμίων

Έπειτα από την πραγματοποίηση της φωτοαποδόμησης των δοκιμίων Mo και Al και το κλείσιμο της πειραματικής διάταξης, τα δύο δοκίμια οδηγήθηκαν στο *μικροσκόπιο Raman* του Ινστιτούτου Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας του ΕΙΕ, προκειμένου να μελετηθούν τα αποτελέσματα της

φωτοαποδόμησης. Το μοντέλο του μικροσκοπίου που χρησιμοποιήθηκε είναι το *RENISHAW inVia Raman Microscope*, το οποίο απεικονίζεται παρακάτω, στο Σχήμα 6.9..



Σχήμα 6.9. Το μικροσκόπιο Raman μοντέλου *RENISHAW inVia*.

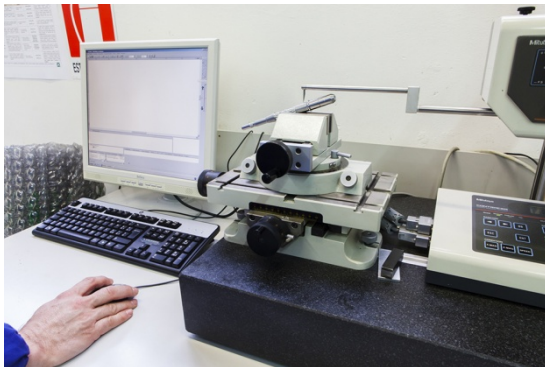
Όπως φαίνεται από το παραπάνω Σχήμα, το μικροσκόπιο λειτουργεί με τη βοήθεια μιας τυπικής διάταξης H/Y που περιλαμβάνει πληκτρολόγιο και ποντίκι. Στον υπολογιστή αυτό έχει εγκατασταθεί το λογισμικό *WiRE 3.0.*, το οποίο χρησιμοποιείται για την οπτική αναπαράσταση των δοκιμίων, την εστίασή τους στο σημείο που επιθυμούμε αλλά και την εξαγωγή των αποτελεσμάτων σε αρχεία εικόνας. Όσον αφορά την αναπαράσταση των αποτελεσμάτων της φωτοαποδόμησης πάνω στα δοκίμια, η συγκεκριμένη διάταξη επιλέχθηκε όχι λόγω της τεχνικής φασματοσκοπίας Raman που εφαρμόζει, αλλά λόγω της *αριθμητικής κλίμακας* που περιλαμβάνει και επιτρέπει την εστίαση σε οποιαδήποτε περιοχή του δοκιμίου με την επιθυμητή ακρίβεια. Η κλίμακα αποτυπώνεται επίσης και στην οθόνη του προγράμματος, ενώ εμφανίζεται και στα εξαγόμενα αρχεία εικόνας που απαιτούνται για την ανάλυση των πειραματικών αποτελεσμάτων.

Τέλος, αξίζει να αναφέρουμε ότι η χρήση ενός *προφιλόμετρου* ήταν απαραίτητη για τη μέτρηση και διερεύνηση του βάθους φωτοαποδόμησης που προέκυψε ως αποτέλεσμα της εφαρμογής των παλμών πάνω σε κάθε ένα από τα spots που ακτινοβολήθηκαν, τόσο στο υμένιο από μολυβδαίνιο (Mo) όσο και σε αυτό από αλουμίνιο (Al). Βεβαίως, όπως θα παρατηρήσουμε στη συνέχεια, στην περίπτωση του Al μία τέτοια μέτρηση κρίνεται περιττή, καθώς δε συντελείται φωτοαποδόμηση, παρά μόνο «κάψιμο» της ακτινοβολούμενης επιφάνειας.

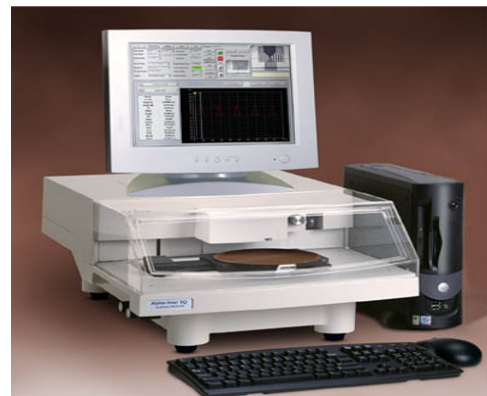
Μία τυπική διάταξη προφιλόμετρου εμφανίζεται στο Σχήμα 6.10.[α]. Επίσης, στα Σχήματα 6.10.[β] και [γ] εμφανίζεται, σε σφαιρικό και διαγραμματικό επίπεδο αντίστοιχα, το προφιλόμετρο *Alpha-Step IQ* της εταιρείας *KLA-Tencor*, η οποία εδρεύει στην Καλιφόρνια των ΗΠΑ. Το συγκεκριμένο προφιλόμετρο

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

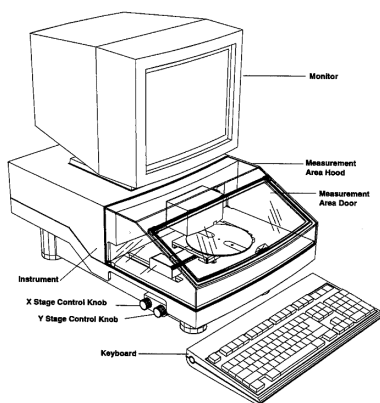
χρησιμοποιήθηκε κατά τη διάρκεια των πειραμάτων μας στο Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών (ΕΙΕ), καταρχήν για να μετρηθεί η τραχύτητα επιφάνειας σε κάθε ένα από τα ακτινοβοληθέντα δοκίμια, αλλά κυρίως για να μετρηθεί και να προσδιοριστεί το μέγεθος του *βάθους φωτοαποδόμησης* (ablation depth), που είναι το βάθος, εντός του κυρίως υλικού-στόχου, που αποκτά ο κρατήρας έπειτα από την αφαίρεση υλικού λόγω της αλληλεπίδρασης Laser και ύλης. Το Alpha-Step IQ εστιάζει στις επιφάνειες των δοκιμίων που έχουν ακτινοβοληθεί, γι' αυτό το λόγο και ο χαρακτηρισμός αυτού είναι *Surface Profiler*, δηλαδή *προφιλόμετρο επιφάνειας*.



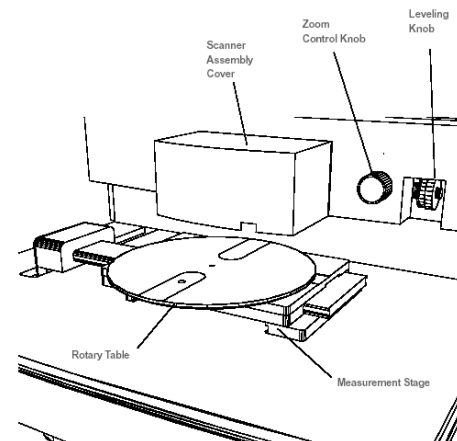
(α)



(β)



(γ)



(δ)

Σχήμα 6.10. [α] Τοπική διάταξη προφιλόμετρου, για τη μέτρηση του βάθους φωτοαποδόμησης στα ακτινοβολημένα λεπτά υμένια. [β] Το προφιλόμετρο επιφάνειας Alpha-Step IQ της εταιρείας KLA-Tencor. [γ] Η διαγραμματική αναπαράσταση του Alpha-Step IQ, με έμφαση στις λειτουργικές συνιστώσες του. [δ] Εγγύτερη εστίαση στην περιοχή διεξαγωγής των μετρήσεων.

Η επίσημη ιστοσελίδα της εταιρείας *KLA-Tencor*, και πιο συγκεκριμένα ο σύνδεσμος [<http://www.kla-tencor.com/surface-profiling/alpha-step-iq.html>], σε συνδυασμό με τη βιβλιογραφία [177], παρέχουν ορισμένες χρήσιμες πληροφορίες για το προφιλόμετρο που πρόκειται να χρησιμοποιηθεί. Συγκεκριμένα, το Alpha-Step IQ είναι ένα προφιλόμετρο επιφάνειας υψηλής ευαισθησίας, το οποίο, χάρη στη συνδυασμένη λειτουργία του με χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή, είναι σε θέση να μετρήσει την τραχύτητα, τις κυματώσεις και το βηματικό ύψος, για διάφορες εφαρμογές. Ο υπολογιστής με τον οποίο είναι συνδεδεμένο το προφιλόμετρο, και ο οποίος είναι συμβατός με το λειτουργικό σύστημα Windows XP, μπορεί να προσφέρει υψηλή αποδοτικότητα στον έλεγχο μετρήσεων, την αποθήκευση και ανάλυση δεδομένων, αλλά και τον απομακρυσμένο έλεγχο συσκευών μέσω δικτύων.

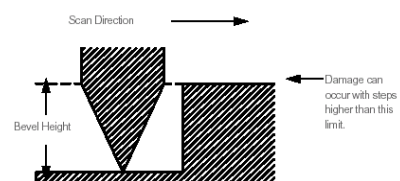
Τα βασικά χαρακτηριστικά του συγκεκριμένου προφιλόμετρου είναι η υψηλή ακρίβεια στις μετρήσεις, η πολλαπλή λειτουργικότητά του και τα οικονομικά χαρακτηριστικά του, κάνοντας το συγκεκριμένο προφιλόμετρο να έχει μία πολύ καλή σχέση κόστους-απόδοσης για χρήση σε εργαστηριακές και βιομηχανικές εφαρμογές. Το γεγονός ότι μπορεί να επιτύχει ανάλυση χαμηλότερη του ενός Angstrom (\AA), σε συνδυασμό με την υψηλή επαναληψιμότητά του, μπορεί να κάνει το συγκεκριμένο προφιλόμετρο πολύ αποτελεσματικό στις προσπάθειες ανάλυσης και παρατήρησης διεργασιών απεικόνισης του προφίλ επιφανειών. Ορισμένες επιπλέον σημαντικές και ξεχωριστές δυνατότητες που έχει είναι: ο ακριβής καθορισμός και η εμπεριστατωμένη ανάλυση ακόμα και των πιο μικρών ή στενών κορυφών στο προφίλ της επιφάνειας, η εύρεση της τραχύτητας ακόμα και σε μικροσκοπικό επίπεδο, ο προσδιορισμός πιθανών σφαλμάτων μορφής σε λεπτές επιφανειακές επικαλύψεις, η δυνατότητα παρατήρησης διαφόρων τοπογραφικών παραλλαγών μέσω του καθορισμού της επιθυμητής κατακόρυφης κλίμακας, καθώς επίσης και η ενεργοποίηση ταχύτερης ανάλυσης του προφίλ επιφανειών, μέσω σειρών από οδηγίες ανάλυσης που έχουν αποθηκευτεί στο λογισμικό από το οποίο συνοδεύεται η διάταξη.

Ορισμένα πιο λεπτομερή στοιχεία που παρατίθενται στη βιβλιογραφία [177] παρατίθενται εδώ, και αφορούν τα χαρακτηριστικά και τις προδιαγραφές του συγκεκριμένου προφιλόμετρου:

- Μέτρηση κατακόρυφων εσοχών ή προεξοχών πάνω στην επιφάνεια, σε έκταση μεταξύ 100\AA και 0.4 mm , με κατακόρυφη ανάλυση 0.012\AA και 0.24\AA αντίστοιχα.
- Μέτρηση της μικρο-τραχύτητας (micro-roughness) με ανάλυση που μπορεί να φτάσει και το 1\AA .
- Η οριζόντια ανάλυση περιορίζεται μόνο από την ακτίνα της ακίδας του προφιλόμετρου, και όχι από τον αριθμό των σημείων δεδομένων. Όμως, θα πρέπει η διαδοχική απόσταση μεταξύ των δύο να μην είναι μικρότερη του $0.01\text{ }\mu\text{m}$.
- Μέτρηση πολλών παραμέτρων τραχύτητας και κυματισμού, με τα δύο μεγέθη να μπορούν να διαχωριστούν το ένα από το άλλο χρησιμοποιώντας φίλτρα αποκοπής (cutoff filters), επιλεγόμενα από το χρήστη.

- Ικανότητα συγκέντρωσης και επιπεδοποίησης δεδομένων, επιτρέποντας ορθές μετρήσεις σε επικλινείς επιφάνειες.
- Ικανότητα επανάληψης μιας σάρωσης έως και δέκα φορές, με ταυτόχρονη δυνατότητα υπολογισμού του μέσου όρου. Κάτι τέτοιο μπορεί να ελαχιστοποιήσει τις επιδράσεις του περιβαλλοντικού θορύβου στις μετρήσεις.
- Ικανότητα υποστήριξης δοκιμών μέγιστου πλάτους 150 mm και μέγιστου πάχους 21 mm.

Παρατηρούμε τώρα τα Σχήματα 6.10.[γ] και [δ]. Έχουν ληφθεί από το επίσημο εγχειρίδιο (Manual) λειτουργίας και χρήσης του Alpha-Step IQ [177] και δίνουν έμφαση στη δομή αλλά και τη λειτουργία του προφιλόμετρου, όταν αυτό δέχεται ένα δοκίμιο για μελέτη της επιφάνειάς του. Αρχίζοντας από το Σχήμα [γ] παρατηρούμε τη σύνδεση της κυρίως περιοχής μετρήσεων με τον H/Y, με το Σχήμα να δείχνει το πληκτρολόγιο από το οποίο γίνεται εισαγωγή δεδομένων και άλλων σημαντικών παραμέτρων, αλλά και την οθόνη στην οποία αποτυπώνονται τα επιθυμητά αποτελέσματα. Η περιοχή μετρήσεων προστατεύεται από εξωγενείς παράγοντες (π.χ. αέριο περιβάλλοντος, αιωρούμενα σωματίδια, μεταβολές σε πίεση και θερμοκρασία) τόσο με τη βοήθεια ενός ειδικού καλύμματος (hood), αλλά και μίας θύρας που, όταν ανοιχθεί, μπορεί να υποδεχτεί το προς έλεγχο δοκίμιο. Αυτό είναι τοποθετημένο πάνω σε ένα περιστροφικό τραπέζι, το οποίο στηρίζεται σε μία πλατφόρμα μέτρησης (βλ. Σχήμα 6.10.[δ]). Το Σχήμα [γ] παρουσιάζει δύο μοχλούς (knobs) που διευκολύνουν την κίνηση του δοκιμίου κατά τους άξονες x και z αντίστοιχα, ενώ ένας άλλος μοχλός, ο οποίος εμφανίζεται στο Σχήμα [δ], δίνει τη δυνατότητα εστίασης (Zoom) σε μικρότερη ή μεγαλύτερη κλίμακα διαστάσεων, τη στιγμή που ο διπλανός μοχλός χρησιμοποιείται για την επιπεδοποίηση του δοκιμίου, εάν και εφόσον χρειαστεί. Ο σαρωτής / ανιχνευτής του προφιλόμετρου, που είναι ένα πολύ σημαντικό στοιχείο του από τη στιγμή εξασφαλίζει την αξιόπιστη αλλά και πλήρη απεικόνιση του επιθυμητού προφίλ της επιφάνειας, είναι κλεισμένος μέσα σε ένα κάλυμμα σχήματος ορθογωνίου παραλληλεπιπέδου, προκειμένου να μπορεί να λειτουργήσει

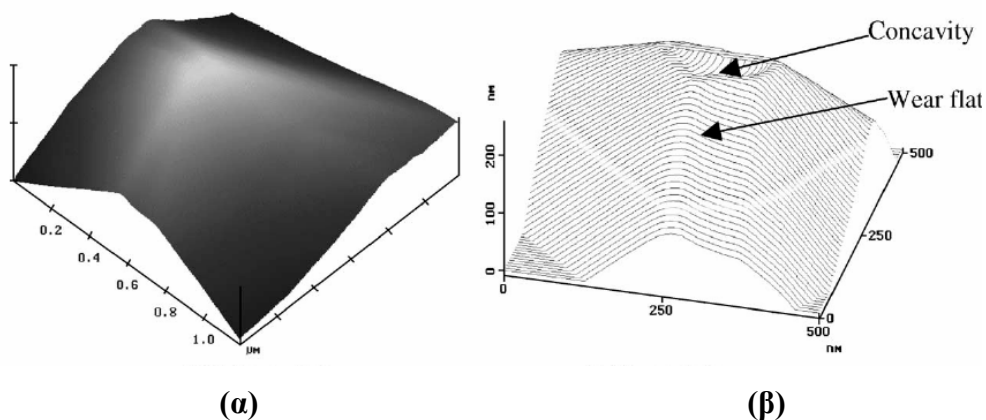


απρόσκοπτα. Ο σαρωτής περιλαμβάνει μία ακίδα (stylus) , η οποία έρχεται σε επαφή με το δοκίμιο προκειμένου για την ανίχνευση των επιφανειακών στοιχείων του. Ο κανονισμός λειτουργίας του προφιλόμετρου αναφέρει ότι πιθανές προεξοχές κατακόρυφου ύψους μεγαλύτερου των 880 μm (μία τιμή που μπορεί να διαφέρει ανάλογα με τον τύπο της ακίδας) ενδέχεται να καταστρέψουν την ακίδα. Κάτι τέτοιο μπορεί να συμβεί ακόμα και για αντικείμενα που έχουν μεν

μικρότερες προεξοχές αλλά ταυτόχρονα χαρακτηρίζονται από απότομες γωνίες ή ακανόνιστους σχηματισμούς που θα μπορούσαν να έρθουν σε προστριβή με την άκρη της ακίδας.

Είναι πάντως σημαντικό να αναφερθεί εδώ ότι, αντί για το προφιλόμετρο, θα μπορούσε να γίνει χρήση της τεχνικής *μικροσκοπίας ατομικής δύναμης* (Atomic Force Microscopy – AFM) και του κατάλληλου μικροσκοπίου για αυτή, προκειμένου να γίνει εφικτή η παρατήρηση του δοκιμίου σε μικρο- και νανοκλίμακα, εκμεταλλευόμενοι τη δύναμη αλληλεπίδρασης που αναπτύσσεται μεταξύ της ακίδας του AFM και του υπό παρατήρηση δείγματος. Από τη στιγμή που η παρούσα ανάλυσή μας δε θα περιλάβει τελικά τη χρήση του AFM, η εμβάθυνση στη δομή και λειτουργία του εκτείνεται πέρα από τα όρια της μελέτης. Είναι όμως σημαντικό να αναφερθεί εδώ ότι η βιβλιογραφία αναφέρει αρκετές περιπτώσεις προσομοιώσεων Μοριακής Δυναμικής στις οποίες εμπλέκεται, μέσω άμεσης χρήσης του, το AFM. Αυτές οι περιπτώσεις σχετίζονται κατά βάση με την κατεργασία τεμαχίων από διάφορα κοπτικά εργαλεία. Δύο χαρακτηριστικά παραδείγματα εμφανίζονται παρακάτω:

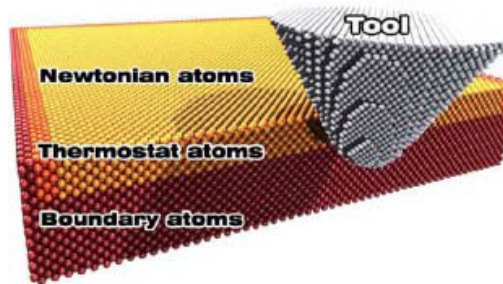
- Στην πηγή [163], γίνεται αναφορά στον προσδιορισμό του μηχανισμού που είναι κατά βάση υπεύθυνος για τη φθορά κοπτικού εργαλείου από διαμάντι, ενόσω αυτό επιδρά πάνω σε επιφάνεια στην οποία εφαρμόζεται κοπή σε νανοκλίμακα. Η αντίστοιχη μελέτη έγινε από τους *Cheng et al.*, οι οποίοι χρησιμοποιούν το μικροσκόπιο AFM για να παρατηρήσουν το πώς κατανέμεται η φθορά του κοπτικού εργαλείου σε κάθε σημείο της επιφάνειάς του. Σε συνδυασμό με την εφαρμογή MD, καταλήγουν εντέλει στο συμπέρασμα ότι η θερμοχημική φθορά παίζει κυρίαρχο ρόλο στη φθορά του εργαλείου. Το Σχήμα 6.11. δείχνει τα οπτικά αποτελέσματα που προέκυψαν από την εστίαση πάνω στην επιφάνεια του κοπτικού εργαλείου, με τη βοήθεια του AFM.



Σχήμα 6.11. Απεικόνιση της μορφολογίας ενός κοπτικού εργαλείου από διαμάντι σε μικροσκόπιο AFM, πριν και μετά την κατεργασία του τεμαχίου από το εργαλείο αυτό, καθώς επίσης και της φθοράς που αυτό υφίσταται λόγω της επαφής του με το τεμάχιο. [α]: Πριν την κατεργασία, [β] Μετά από αυτή.

Σημείωση: Οι όροι «Concavity» και «Wear Flat» αναφέρονται αντίστοιχα στη δημιουργηθείσα κοιλότητα και το επίπεδο φθοράς επί του εργαλείου.

- Η πηγή [164] ασχολείται με τη χρήση της μικροσκοπίας AFM ως νανο-λιθογραφική τεχνική, με τη βοήθεια της οποίας μελετώνται τα αποτελέσματα από την απευθείας κατεργασία επιφανειών υλικών, αλλά και την παραγωγή νανο-εξαρτημάτων για συστήματα MEMS (μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων), με το αντίστοιχο μοντέλο που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση να εμφανίζεται στο παρακάτω Σχήμα 6.12..



Σχήμα 6.12. Μοντέλο Μοριακής Δυναμικής για τη νανο-λιθογραφία που βασίζεται σε AFM.

Αξίζει όμως, για να είμαστε πλήρεις στην ανάλυσή μας, να αναφέρουμε το λόγο για τον οποίο δεν προτιμήθηκε το AFM έναντι του προφιλόμετρου. Σκοπός μας, κατά την αξιολόγηση των πειραματικών αποτελεσμάτων έπειτα από την περαίωση της διαδικασίας, ήταν η μελέτη της τραχύτητας της επιφάνειας αλλά και του βάθους φωτοαποδόμησης μετά από την επενέργεια ενός παλμού Laser πάνω σε κάθε μικρό τμήμα (Spot) του υμενίου. Προκειμένου να έχουμε μία πλήρη και αξιόπιστη εικόνα για το προφίλ της επιφάνειας, κυρίως κατά το μήκος της, θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε μία συσκευή που θα μπορέσει να εστιάσει πάνω σε όλο το μήκος του καναλιού που θα εξεταστεί, χωρίς να χάνονται απαραίτητα τμήματα πληροφοριών που ενδεχομένως να δυσχεράνουν την εξαγωγή των επιθυμητών συμπερασμάτων. Το μήκος του υπό εξέταση καναλιού είναι πολύ μεγαλύτερο από την ανάλυση (Resolution) ενός τυπικού μικροσκοπίου AFM, με αποτέλεσμα να μην μπορεί ολόκληρη η επιφάνεια να παρατηρηθεί και, ως εκ τούτου, να μη συνιστάται η επιλογή του AFM για την εξυπηρέτηση των επιθυμητών σκοπών.

6.7. Οπτικά αποτελέσματα από το ακτινοβοληθέν δοκίμιο από μολυβδαίνιο (Mo)

Σκοπός της παρούσας Υποενότητας είναι η παρατήρηση, σε μορφή δισδιάστατων εικόνων, βασικών στοιχείων για τη δομή και τη μορφολογία των χωρίων του δοκιμίου από μολυβδαίνιο (Mo) που υπεβλήθη σε ακτινοβολία με Laser, με τη βοήθεια της πειραματικής διάταξης του Nd:YAG Laser, όπως αυτές οι εικόνες ελήφθησαν με το μικροσκόπιο Raman που διαθέτει το ΕΙΕ. Η ακτινοβολία αυτή έγινε στα πλαίσια της πραγματοποίησης της κατεργασίας *εγχάραξης* (scribing) των δοκιμίων, αποσκοπώντας στην αφαίρεση υλικού από την εκάστοτε επιφάνεια.

Ο βαθμός μεγέθυνσης που εφαρμόστηκε στο μικροσκόπιο αυτό είναι τέτοιος ώστε να έχει ο χρήστης μία άμεση, κοντινή αλλά ταυτόχρονα και πλήρη εικόνα της περιοχής που έχει υποστεί φωτοαποδόμηση, καθώς επίσης και των χωρίων που βρίσκονται γύρω της και επηρεάζονται μορφολογικά από αυτή, παίζοντας ουσιαστικά το ρόλο *θερμικά επηρεασμένων ζωνών* (Heat-Affected Zones, HAZ). Πιο συγκεκριμένα, θα πρέπει η κάθε εικόνα που λαμβάνεται από το μικροσκόπιο να μπορεί να ενσωματώνει ολόκληρη την περιοχή που έχει αποδομηθεί, και σε ικανή μεγέθυνση ώστε η υπόψη περιοχή που απεικονίζεται στο τελικό αρχείο, το οποίο επιλέγουμε να αποθηκεύσουμε σε μία οποιαδήποτε μορφή εικόνας αναγνώσιμης από H/Y (π.χ. BMP ή JPG), να είναι εύκολα παρατηρήσιμη με γυμνό μάτι.

Στο σύνολό τους, ελήφθησαν συνολικά 12 απεικονίσεις από το μικροσκόπιο, δηλαδή δύο φωτογραφίες για κάθε μία από τις τρεις εφαρμοζόμενες τιμές ενέργειας Laser 1mJ, 2mJ και 3mJ, και κάθε μία από τις δύο εναλλακτικά χρησιμοποιούμενες τιμές μεγέθους διαφράγματος 1.5 μm και 3 μm, με τη δεύτερη από τις δύο περιπτώσεις να πραγματοποιείται πρώτη κατά τη διάρκεια διεξαγωγής των πειραμάτων, πριν στη συνέχεια επιλέξουμε να ελαττώσουμε το διάφραγμα από τα 3 μm στο 1.5.. Από τις δύο φωτογραφίες που ελήφθησαν για κάθε ξεχωριστή τιμή ενέργειας και μεγέθους διαφράγματος, η μία απεικονίζει και τα δύο spots που ακτινοβολήθηκαν κατά περίπτωση, και τα οποία ελήφθησαν πάνω σε τυχαίες και αρχικά μη-ακτινοβολημένες περιοχές του υμενίου. Από τη στιγμή που η μορφολογία του υμενίου είναι εν γένει ομογενής και τα χαρακτηριστικά του παλμού Laser που εφαρμόζεται είναι τα ίδια κατά περίπτωση, αναμένεται ότι η μορφή που θα έχουν τα δύο spots κάθε ζεύγους θα είναι η ίδια, ή στη χειρότερη περίπτωση, παραπλήσια. Για αυτό το λόγο, προκειμένου να έχουμε μία καλύτερη εικόνα των συνεπειών που επιφέρει η εφαρμογή ενός παλμού Laser πάνω στο υμένιο, κρίνεται απαραίτητη η εγγύτερη εστίαση μόνο σε ένα από τα δύο spots κάθε ζεύγους.

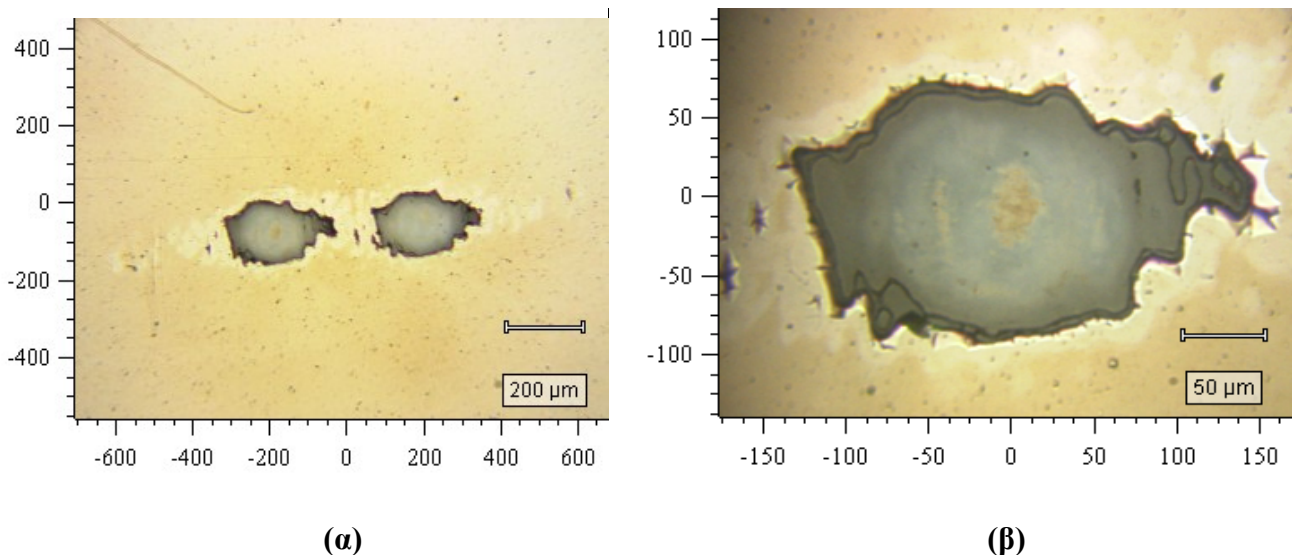
Αξίζει εδώ να σημειωθεί ότι η χρησιμοποιούμενη πειραματική διάταξη δεν υποστηρίζει την ανάπτυξη εντάσεων ακτινοβολίας μεγαλύτερης των 3 mJ, καθώς έχει κατασκευαστεί για την εξυπηρέτηση εργαστηριακών σκοπών. Για επαγγελματικές εφαρμογές, υπάρχει η δυνατότητα ενεργοποίησης επιπλέον διατάξεων που βρίσκονται στο Εργαστήριο του ΕΙΕ, δίνοντας τη δυνατότητα ακτινοβολίας δοκιμίων με

τιμές ενέργειας ανώτερες των 3 mJ, αλλά κάτι τέτοιο αποτελεί μία ιδιαίτερα χρονοβόρα διαδικασία και καταναλώνει μεγάλες ποσότητες ρεύματος και ενέργειας, επηρεάζοντας ενδεχομένως αρνητικά τη λειτουργία όλων των πειραματικών συσκευών για μελλοντικές εφαρμογές.

6.7.1. Spot δοκιμίου Mo ακτινοβολημένο με παλμό nanosecond Laser ενέργειας 3 mJ, διερχόμενο μέσα από διάφραγμα μεγέθους 3 μm

Οι παραπάνω διαπιστώσεις μπορούν να γίνουν ευκολότερα κατανοητές ξεκινώντας από την παρατήρηση των Σχημάτων 6.13.[α] και [β], τα οποία αφορούν την ακτινοβολήση δύο spots του υμενίου με έναν παλμό Laser έντασης 3 mJ και με μέγεθος διαφράγματος 3 μm. Το Σχήμα [α] απεικονίζει και τα δύο spots που ακτινοβολήθηκαν, ενώ στο [β] δίνεται περισσότερη έμφαση στη μορφολογία του ενός από τα δύο.

Πρέπει εδώ να σημειωθεί ότι η διάρκεια όλων των παλμών Laser που εφαρμόστηκαν, κατά τη διάρκεια διεξαγωγής των πειραμάτων, είναι σταθερή και ίση με 10 ns. Επίσης, θα πρέπει να παρατηρηθεί και η κλίμακα μεγέθυνσης του μικροσκοπίου σε κάθε περίπτωση, η οποία, όπως εμφανίζεται παρακάτω, είναι της τάξης των μερικών μm για την απόσταση που αναγράφεται κάτω δεξιά σε κάθε ένα από τα Σχήματα.



Σχήμα 6.13. Απεικονίσεις των ακτινοβοληθεισών περιοχών (spots) πάνω στο λεπτό υμένιο από Mo με nanosecond παλμούς Laser ενέργειας 3 mJ, για μέγεθος διαφράγματος 3 μm. [α] Και τα δύο spots που αποδομήθηκαν, [β] Το ένα από τα δύο προαναφερθέντα spots, σε μεγαλύτερη μεγέθυνση.

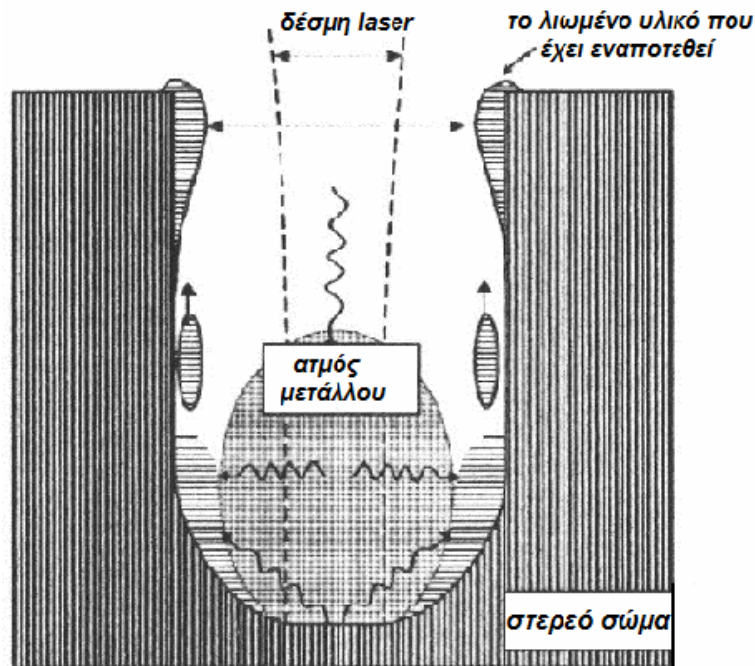
ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Σε κάθε ένα από τα παραπάνω Σχήματα, η περιοχή που λαμβάνει γκρι χρώμα είναι αυτή στην οποία έχει λάβει χώρα η φωτοαποδόμηση, ενώ η άσπρη (αποχρωματισμένη) που βρίσκεται γύρω-γύρω αντιστοιχεί στη θερμικά επηρεασμένη ζώνη, της οποίας η θερμοκρασία εξαρτάται από την προσπίπτουσα δέσμη Laser αλλά δεν προκαλεί την αποδόμησή της. Βλέπουμε επίσης ότι η περιοχή που βρίσκεται εγγύτερα στο σημείο εφαρμογής της ακτίνας Laser έχει πιο ανοιχτό γκρι χρώμα σε σχέση με το σκούρο γκρι της εξώτερης περιοχής φωτοαποδόμησης.

Η εμφάνιση του γκρίζου χρώματος στην περιοχή που έχει ακτινοβοληθεί είναι ενδεικτική δύο διαπιστώσεων: Πρώτον, ότι το υλικό στο οποίο εφαρμόστηκε η πειραματική διαδικασία είναι το μολυβδαίνιο (το χρώμα της εικόνας που λαμβάνεται από το μικροσκόπιο θα είναι σημαντικά διαφορετικό όταν πρόκειται για κάποιο άλλο υλικό) και, δεύτερον, ότι ο βαθμός στον οποίο έχει λάβει χώρα η φωτοαποδόμηση είναι πολύ υψηλός, έως και πλήρης (100%), με αποτέλεσμα να σχηματίζεται *οπή* στο ακτινοβοληθέν δοκίμιο. Ο σχηματισμός οπής έχει άμεση σχέση με την απορροφητικότητα που παρουσιάζει το Mo, η οποία είναι ίση με 57.14% (συντελεστής ανάκλασης $R = 42.86\%$), όπως έχουμε αναφέρει χαρακτηριστικά και στο Κεφάλαιο 5, το οποίο ασχολείται με την ανάπτυξη του υπολογιστικού κώδικα. Αυτό δηλαδή σημαίνει ότι το 57.14% της προσπίπτουσας ακτινοβολίας θα απορροφάται εντέλει από το υλικό, που σημαίνει ότι, για κάθε μία από τις τρεις περιπτώσεις των 3, 2 και 1 mJ ως προς την ενέργεια της εξερχόμενης από το Nd:YAG Laser δέσμης, η απορροφούμενη ενέργεια από το υμένιο θα λαμβάνει αντίστοιχα τιμές μεταξύ 1.7142, 1.1428 και 0.5714 mJ. Οι τιμές αυτές οδηγούν σε έντονες θερμοκρασιακές αυξήσεις μέσα στο δοκίμιο, προκαλώντας ταχεία τήξη και συνακόλουθη εξάτμιση πολλών ατόμων της ακτινοβοληθείσας περιοχής, οδηγώντας εντέλει στη φωτοαποδόμηση και τη δημιουργία οπών.

Παρατηρούμε ότι η αρχική μας διαπίστωση σχετικά με το πόσο πανομοιότυπα είναι τα δύο γειτονικά spots επιβεβαιώνεται. Βλέπουμε στη συνέχεια ότι, παρά το γεγονός ότι η ακτίνα Laser που προσπίπτει πάνω σε κάθε ένα από τα spots έχει κυκλική διατομή, η επιφάνεια που τελικώς αποδομείται δεν μπορεί να παρομοιαστεί εντελώς με έναν ιδανικό κύκλο. Καταρχήν, οι γωνίες που σχηματίζονται σε όλη την περιφέρεια οδηγούν στη δημιουργία ενός γενικά ακανόνιστου σχήματος, που έχει βεβαίως μία σημαντική ομοιότητα με έναν κύκλο. Επίσης, είναι άξιο παρατήρησης το γεγονός ότι κάθε ένα από τα spots προσεβλήθη με εντονότερη ακτινοβολία από όση τελικά χρειάζεται για την πλήρη φωτοαποδόμηση, κάτι που φαίνεται ξεκάθαρα από το σχηματισμό «αυτιού», ή *απόληξης*, στο δεξί τμήμα της αποδομημένης περιοχής του Σχήματος 6.13.[β]. Οι σχηματιζόμενες απολήξεις μπορούν κατά βάση να δικαιολογηθούν με χρήση της ακόλουθης διαπίστωσης: Καθώς η δέσμη του Laser προσπίπτει πάνω στο στερεό υλικό, η ομάδα αερίων σωματιδίων του ατμοποιημένου Mo (ατμός μετάλλων) ανεβαίνει προς τα πάνω και επικάθεται στις άκρες, με αποτέλεσμα στη συνέχεια να συμπυκνωθεί (περιερχόμενο δηλαδή σε

κατάσταση τήγματος) και να λάβει πλέον τη μορφή στερεοποιημένου τήγματος, όπως μπορεί να μας δείξει χαρακτηριστικά το ακόλουθο Σχήμα 6.14.:



Σχήμα 6.14. Σχηματική αναπαράσταση της επικάθισης των ατμών του μετάλλου στις ακραίες θέσεις της φωτοαποδομημένης περιοχής.

Η εμφάνιση αυτών των απολήξεων οφείλεται επίσης σε ακόμα τρεις σημαντικούς παράγοντες:

- Η προσπίπτουσα δέσμη Laser δεν έχει σταθερή τιμή έντασης, αλλά ακολουθεί την κατανομή Gauss, με τη μέγιστη τιμή αυτής να εφαρμόζεται πάνω στην περιοχή που είναι πλήρως κάθετη στη δέσμη.
- Ιδανικά, θα έπρεπε η διατομή της προσπίπτουσας δέσμης να είναι κυκλική, αλλά κάτι τέτοιο δε συμβαίνει. Εμφανίζεται δηλαδή παραμόρφωση της δέσμης, ένα φαινόμενο που οφείλεται στο γεγονός ότι η εστίαση πάνω στη δέσμη, πριν αυτή κατευθυνθεί στο δοκίμιο, δεν είναι αρκετά ακριβής ώστε να οδηγεί σε ένα πλήρως κυκλικό σχήμα σε αυτή.
- Ενδεχομένως η ευθυγράμμιση της οπτικής διάταξης Laser να μην έχει γίνει σε πλήρη βαθμό, λόγω πιθανών ανθρώπινων λαθών στο χειρισμό (π.χ. στο κράτημα των ανακλαστικών χαρτιών με το χέρι, το οποίο δεν είναι εύκολο να παραμείνει πλήρως σταθερό καθ'όλη τη διάρκεια διεξαγωγής της πειραματικής διαδικασίας).

Ένδειξη της πλεονάζουσας ακτινοβολίας μπορεί να θεωρηθεί και το «κάψιμο» (καφέ απόχρωση) στο κέντρο του spot, κάτι που μπορεί να δικαιολογηθεί και από το γεγονός ότι η ένταση του Laser ακολουθεί κατανομή Gauss και, ως εκ τούτου, το κέντρο της περιοχής όπου εφαρμόζεται η ακτινοβολία προσβάλλεται από τη μέγιστη ένταση Laser.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Με τη βοήθεια υποδεκάμετρου μπορούμε να μετρήσουμε προσεγγιστικά τις κύριες διαστάσεις της φωτοαποδομημένης επιφάνειας και να υπολογίσουμε, με τη μέγιστη δυνατή ακρίβεια (με υπαρκτό το περιθώριο σφάλματος προφανώς), το εμβαδό του spot που έχει δημιουργηθεί. Έχοντας στο νου μας ότι η επιφάνεια μπορεί να προσομοιάσει πολύ καλά σε ένα σχηματισμό μεταξύ ορθογωνίου και κύκλου, μπορούμε να αντιστοιχίσουμε την οριζόντια «ακτίνα» στο ήμισυ της οριζόντιας διάστασης, έστω α , και την κατακόρυφη στο ήμισυ της κατακόρυφης διάστασης, έστω β . Ως συνέπεια, ο ακόλουθος τύπος θα μπορεί να μας δώσει μία *εκτίμηση* για το υπό υπολογισμό εμβαδό της επιφάνειας:

$$A = \pi \frac{\alpha}{2} \frac{\beta}{2} = \frac{\pi \alpha \beta}{4} \quad (6.2)$$

Όπως αναφέραμε και παραπάνω, ενδεχομένως η τιμή που τελικά να προκύπτει να έχει κάποια απόσταση από την πραγματικότητα, μπορεί όμως να μας βοηθήσει σε μεγάλο βαθμό να υπολογίσουμε το σημαντικό για το φαινόμενό μας μέγεθος της *ροής ακτινοβολίας Laser* (Laser Fluence), το οποίο εκφράζεται ως ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας, κατά προτίμηση σε J / cm^2 . Αναφέρουμε εδώ ότι θα μετρήσουμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, τις τιμές των οριζόντιων και κατακόρυφων μηκών που διέρχονται από το κέντρο της επιφάνειας (το οποίο, κατά προσέγγιση, είναι η μέση της «καφέ» κουκκίδας που σχηματίστηκε λόγω πύρωσης ή «καψίματος»), τις οποίες και θα εξισώσουμε με τις τιμές α και β αντίστοιχα. Για τη μέτρηση της οριζόντιας διάστασης, τοποθετούμε την αριθμημένη πλευρά του υποδεκάμετρου πάνω στην ένδειξη «0» στον κατακόρυφο άξονα και παράλληλα με τον οριζόντιο. Αντίστοιχα, προκειμένου να μετρήσουμε την κατακόρυφη διάσταση, η αριθμημένη πλευρά του υποδεκάμετρου τοποθετείται επί της ένδειξης «0» του οριζόντιου άξονα και σε πλήρη παραλληλία με τον κατακόρυφο. Είναι πολύ σημαντικό, για τη διευκόλυνση των μετρήσεών μας, το γεγονός ότι η εστίαση έγινε ακριβώς στο κέντρο της φωτοαποδομημένης επιφάνειας, κατά τέτοιον τρόπο ώστε οι συντεταγμένες του σημείου αυτού, στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων (x,y), να απεικονίζονται ως (0,0) στην παρούσα περίπτωση.

Από το PC στο οποίο έγινε η μέτρηση των διαστάσεων της φωτοαποδομημένης επιφάνειας, και έχοντας την αντίστοιχη εικόνα σε μεγέθυνση (maximize) στο λογισμικό *Microsoft Office Picture Manager*, παρατηρούμε ότι τα 50 μm της κλίμακας αντιστοιχούν σε μήκος 2.25 cm στο χρησιμοποιούμενο υποδεκάμετρο, σε πλήρη ευθεία. Η διαίρεση της πρώτης ποσότητας με τη δεύτερη μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι μήκος 1 cm στο υποδεκάμετρο αντιστοιχεί σε μήκος 22.22 μm επί της επιφάνειας, εφόσον κανένα από τα χαρακτηριστικά της εικόνας στην οθόνη του PC δε μεταβληθεί κατά τη διάρκεια της ανάλυσης.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Με βάση τις παραπάνω προτάσεις, μετράμε τις διαστάσεις a και β , τις οποίες και βρίσκουμε αντίστοιχα ίσες με $\alpha = 22.22 \cdot 12.2 = 271.084 \mu\text{m}$ και $\beta = 22.22 \cdot 6.9 = 153.318 \mu\text{m}$. Άρα το εμβαδό της φωτοαποδομημένης επιφάνειας θα είναι κατά προσέγγιση ίσο με:

$$A = \frac{\pi \cdot 271.084 \cdot 153.318}{4} = 32642.763 \mu\text{m}^2 = 3.26428 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2 \quad (6.3)$$

κάνοντας με αυτό τον τρόπο την τιμή της ροής ακτινοβολίας (fluence) ίση με:

$$F = \frac{E_{\text{LASER}}}{A} = \frac{3 \cdot 10^{-3} [\text{J}]}{3.26428 \cdot 10^{-4} [\text{cm}^2]} = 9.190388 \text{ J/cm}^2 \quad (6.4)$$

Αρκετές βιβλιογραφικές πηγές, όπως η [E1], ορίζουν την τιμή των 0.1 J/cm^2 ως μία τυπική και συχνά χρησιμοποιούμενη για το *κατώφλι φωτοαποδόμησης* (threshold fluence), δηλαδή την ελάχιστη τιμή για την οποία παρατηρείται φωτοαποδόμηση και, ως εκ τούτου, αφαιρείται υλικό, όσο επενεργεί πάνω σε ένα δοκίμιο ακτινοβολία Laser. Είναι εμφανές ότι μία τέτοια τιμή του threshold fluence προκαλεί έντονη φωτοαποδόμηση και απομάκρυνση υλικού μετά το πέρας του ενός παλμού.

Ένα άλλο ενδιαφέρον μέγεθος που αξίζει εδώ να υπολογίσουμε, αφορά την έκταση της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ), ώστε να διαπιστώσουμε πόσο είναι το εμβαδό της περιοχής που έχει εμφανώς επηρεαστεί από την ακτινοβολία Laser και τη θέρμανση που αυτή επιφέρει. Εκ πρώτης όψεως, ο υπολογισμός ενδεχομένως να μη φαίνεται εύκολος, αλλά στην πραγματικότητα δε χαρακτηρίζεται από σημαντική δυσκολία. Στα πλαίσια μίας γενικά αποδεκτής προσέγγισης, απλά απαιτείται ο υπολογισμός της οριζόντιας και της κατακόρυφης απόστασης μεταξύ των δύο άκρων της HAZ, και η αφαίρεση, από αυτή την ποσότητα, του εμβαδού της φωτοαποδομημένης περιοχής. Με τη βοήθεια του υποδεκάμετρου, και λαμβάνοντας υπόψη την αντιστοίχιση cm του υποδεκάμετρου σε μm της εικόνας, η οριζόντια διάσταση υπολογίζεται ίση με $a' = 22.22 \cdot 15.4 = 342.188 \mu\text{m}$ και η κατακόρυφη με

$\beta' = 22.22 \cdot 8.7 = 193.314 \mu\text{m}$. Με βάση τον τύπο $A' = \frac{\pi a' \beta'}{4}$, ο οποίος δίνει με ιδιαίτερα καλή ακρίβεια

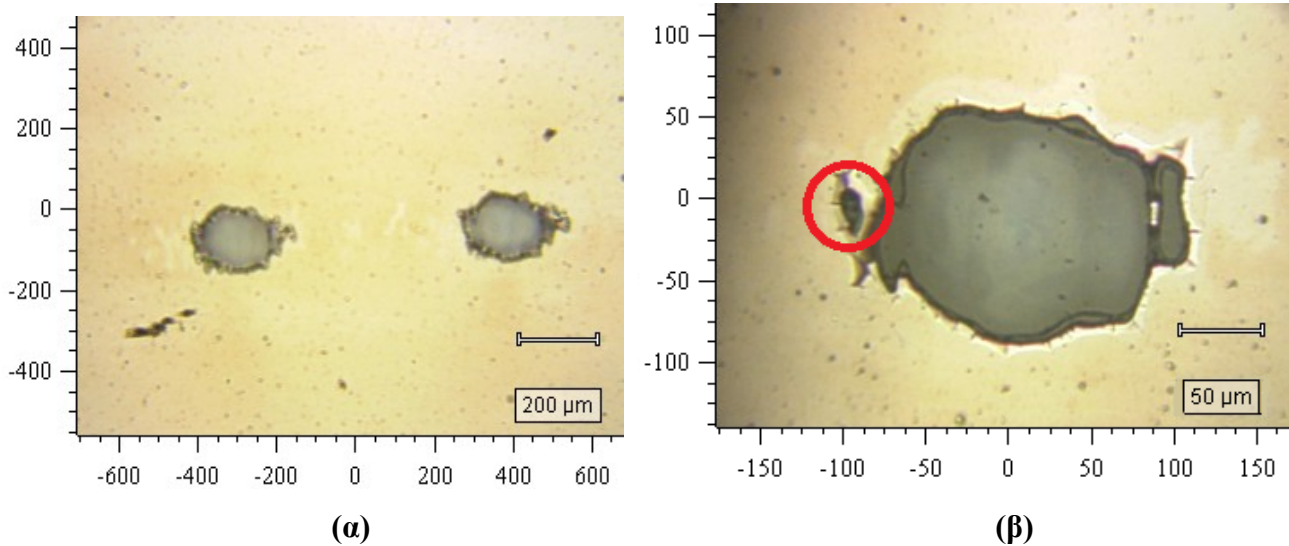
το εμβαδό για οποιαδήποτε επιφάνεια προσομοιάζει τόσο σε ορθογώνιο όσο και σε κύκλο, η έκταση της HAZ μαζί με τη φωτοαποδομημένη περιοχή υπολογίζεται ίση με

$A' = \frac{\pi \cdot 342.188 \cdot 193.314}{4} = 51953.8773 \mu\text{m}^2 = 5.19539 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$. Άρα, η έκταση της HAZ είναι ίση με

$A' - A = (5.19539 - 3.26428) \cdot 10^{-4} = 1.92931 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$.

6.7.2. *Spot δοκιμίου Mo ακτινοβολημένο με παλμό nanosecond Laser ενέργειας 2 mJ, διερχόμενο μέσα από διάφραγμα μεγέθους 3 μm*

Τα ακόλουθα Σχήματα 6.15[α] και [β] μπορούν να μας δώσουν μία καθαρή εικόνα για τις διαφοροποιήσεις που εμφανίζονται στη φωτοαποδομημένη επιφάνεια, όσον αφορά τη γεωμετρική έκταση του φαινομένου και το βαθμό στον οποίο αυτή η αποδόμηση συντελείται, αν διατηρήσουμε το μέγεθος του διαφράγματος D σταθερό και ελαττώσουμε την ένταση του Laser από τα 3 στα 2 mJ:



Σχήμα 6.15. Απεικονίσεις των ακτινοβοληθεισών περιοχών (spots) πάνω στο λεπτό υμένιο από Mo με nanosecond παλμούς Laser ενέργειας 2 mJ, για μέγεθος διαφράγματος 3 μm. [α] Και τα δύο spots που αποδομήθηκαν, [β] Το ένα από τα δύο προαναφερθέντα spots, σε μεγαλύτερη μεγέθυνση.

Η πρώτη εμφανής διαπίστωση, συγκρίνοντας τα Σχήματα 6.13. και 6.15. αφορά την έκταση της περιοχής φωτοαποδόμησης, η οποία είναι ελαφρώς μικρότερη στη δεύτερη περίπτωση από ό,τι στην πρώτη, κάτι που επιβεβαιώνεται οπτικά συγκρίνοντας τις [β] περιοχές των σχημάτων. Η φωτοαποδομημένη επιφάνεια έχει επίσης ένα εντελώς διαφορετικό σχήμα, το οποίο προσομοιάζει περισσότερο σε κύκλο από ό,τι σε ορθογώνιο.

Παρατηρούμε επίσης, ευκολότερα από το Σχήμα [β] σε σχέση με το [α], ότι τα «αυτιά», ή οι απολήξεις, που εμφανίζονται στη δεξιά πλευρά της γκρι επιφάνειας έχουν διαφορετικό σχηματισμό (μεταξύ έλλειψης και ορθογωνίου) σε σχέση με αυτά του Σχήματος 6.13., ενώ στην αριστερή πλευρά εμφανίζεται ένας πολύ μικρός σχηματισμός χρώματος γκρι, ο οποίος αντιστοιχεί σε ένα φωτοαποδομημένο τμήμα (το οποίο περικλείεται σε κόκκινο κύκλο στο Σχήμα 6.15.[β]), που όμως δεν έχει ενωθεί με την κυρίως (μεγαλύτερη) επιφάνεια. Η ύπαρξη αυτού του τμήματος ενδέχεται να οφείλεται σε παράγοντες όπως η κατεύθυνση της δέσμης προς το δοκίμιο, η οποία μπορεί, λόγω ανθρώπινου λάθους, να μην είναι πλήρως κάθετη στο επίπεδο αυτού. Τέλος, η μειωμένη ένταση του

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Laser οδηγεί και σε μικρότερης έκτασης θερμικά επηρεασμένη ζώνη (η οποία εμφανίζεται με λευκό χρώμα γύρω από τις γκρι περιοχές στα δύο Σχήματα 6.15.[α] και [β] – ειδικά στο δεύτερο).

Παρατηρώντας επίσης από το πιο ομοιογενές χρώμα της επιφάνειας, το οποίο είναι σκούρο γκρι σχεδόν σε όλη την έκτασή της (ωστόσο το γκρι αυτό είναι πιο ανοιχτό στη «γειτονιά» του σημείου (0,0) όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.15.[β], δηλαδή γύρω από την περιοχή όπου η ένταση του Laser είναι μέγιστη), ότι η αποδόμηση έχει συντελεστεί κατά έναν τρόπο περισσότερο ομαλό και ομοιόμορφο σε σχέση με την πρώτη περίπτωση, κάτι που ενδέχεται να οφείλεται και στη μικρότερη τιμή της έντασης του Laser, αλλά και σε πιθανώς υψηλότερο βαθμό ομοιομορφίας της επιφάνειας γύρω από την ακτινοβολημένη περιοχή (όσο «ομογενές» κι αν είναι σε γενικές γραμμές το δοκίμιο, είναι πολύ πιθανό ότι θα περιλαμβάνει κατά τύπους προσμίξεις από άλλα υλικά πέραν του Mo, σε μεταβλητή περιεκτικότητα ανά περιοχή). Με λίγα λόγια, καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η ελάττωση της έντασης του Laser οδηγεί σε βελτίωση της ποιότητας της φωτοαποδόμησης, οδηγώντας έτσι σε μία πιο ομοιόμορφα αποδομημένη επιφάνεια έπειτα από την αφαίρεση του υλικού.

Έχοντας καθορίσει την εστίαση (zoom) του αρχείου εικόνας που αντιστοιχεί στο Σχήμα 6.15.[β] ώστε να ικανοποιεί πλήρως τις ανάγκες μας ως προς τη μέτρηση των διαστάσεων της φωτοαποδομημένης επιφάνειας, μπορούμε πλέον να προσδιορίσουμε αυτές τις διαστάσεις. Και εδώ ο τύπος (6.2) θα είναι προσιτός για τον υπολογισμό του εμβαδού, καθώς, παρά το γεγονός ότι το σχήμα της επιφάνειας είναι πάρα πολύ κοντά στον ιδανικό κύκλο, εντούτοις εμφανίζει κάποιες μικρές, αλλά υπολογίσιμες διαφοροποιήσεις στις δύο του διαστάσεις (οριζόντια και κατακόρυφη), με αποτέλεσμα η σχέση $A = \pi r^2$ (όπου r η ακτίνα) να οδηγεί σε πιο ανακριβή αποτελέσματα.

Επειδή η εστίαση από το μικροσκόπιο *Raman* δεν έχει γίνει ακριβώς κατά τέτοιο τρόπο ώστε η κατακόρυφη συντεταγμένη του κέντρου της φωτοαποδομημένης επιφάνειας να είναι 0, η θέση αυτής της συντεταγμένης θα διερευνηθεί κατά προσέγγιση, και από αυτή θα τοποθετηθεί το υποδεκάμετρο παράλληλα στον οριζόντιο άξονα για τη μέτρηση της οριζόντιας διάστασης a . Η κατακόρυφη διάσταση β μπορεί να μετρηθεί λαμβάνοντας υπόψη την οριζόντια θέση θ ως αφετηρία. Τα 50 μm της κλίμακας αντιστοιχούν, στην επιλεγθείσα εστίαση, σε 2.35 cm του υποδεκάμετρου, με αποτέλεσμα το 1 cm να απεικονίζει μήκος 21.277 μm πάνω στην απεικόνιση του μικροσκοπίου. Με βάση τα παραπάνω μετρώνται οι, απαραίτητες για τον υπολογισμό του εμβαδού, διαστάσεις a και β :

- $a = 21.277 \cdot 8.75 = 186.1738 \mu\text{m}$
- $\beta = 21.277 \cdot 6.75 = 143.287 \mu\text{m}$

Άρα το εμβαδό της φωτοαποδομημένης επιφάνειας θα είναι ίσο με:

$$A = \frac{\pi \cdot 186.1738 \cdot 143.287}{4} = 20951.5055 \mu\text{m}^2 = 2.09515 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2 \quad (6.5)$$

και, κατά συνέπεια, η ροή ακτινοβολίας Laser θα λάβει την τιμή:

$$F = \frac{E_{LASER}}{A} = \frac{2 \cdot 10^{-3} [J]}{2.09515 \cdot 10^{-4} [cm^2]} = 9.54586 J/cm^2 \quad (6.6)$$

που είναι μία τιμή ελαφρώς μικρότερη από ό,τι στην περίπτωση της ακτινοβόλησης του δοκιμίου με Laser ενέργειας 3 J, με τον αντίστοιχο λόγο ροών ακτινοβολίας να είναι ίσος με $\frac{9.190388}{9.54586} = 0.96276$ (μείωση 3.37%).

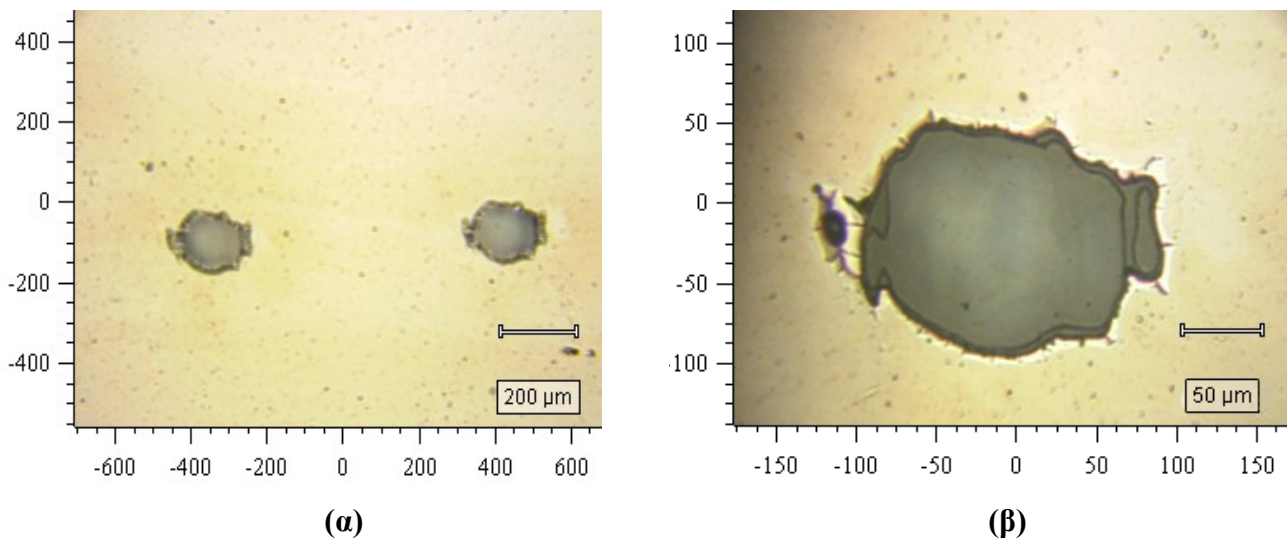
Η εύρεση της έκτασης της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ) θα γίνει με βάση τη μέθοδο που εφαρμόσαμε στο Εδάφιο 6.7.1.. Με βάση αυτή τη θεώρηση, και διατηρώντας την εστίαση του Σχήματος 6.13.[β] σταθερή, θα υπολογίσουμε καταρχήν τις αποστάσεις μεταξύ των δύο οριζόντιων και κατακόρυφων άκρων της HAZ, που περικλείουν μέσα τους και την αμιγώς φωτοαποδομημένη περιοχή. Αυτές θα παίξουν το ρόλο της οριζόντιας διάστασης a' και της κατακόρυφης β' , με τον υπολογισμό τους να παρατίθεται παρακάτω:

- $a = 12.8 \cdot 21.277 = 272.3456 \mu m$
- $\beta = 7.8 \cdot 21.277 = 165.9606 \mu m$

Το εμβαδό της υπόψη έκτασης θα υπολογιστεί μέσω της Σχέσης $A' = \frac{\pi a' \beta'}{4} = \frac{\pi \cdot 272.3456 \cdot 165.9606}{4} = 35498.9282 \mu m^2 = 3.54989 \cdot 10^{-4} cm^2$, πράγμα που σημαίνει ότι η έκταση της HAZ θα είναι ίση με $A' - A = (3.54989 - 2.09515) \cdot 10^{-4} = 1.45474 \cdot 10^{-4} cm^2$. Ο υπόψη υπολογισμός ενδέχεται να μην είναι και πλήρως ακριβής, γιατί δεν ελήφθησαν υπόψη ορισμένες άλλες αποχρωματισμένες περιοχές στο Σχήμα 6.15.[β], σε θέσεις που βρίσκονται πάντως αρκετά μακριά από την κυρίως επιφάνεια. Το τελικό αποτέλεσμα όσον αφορά την εύρεση της τιμής της HAZ δεν αναμένεται πάντως να διαφέρει πάρα πολύ, γιατί οι αποχρωματισμένες επιφάνειες που βρίσκονται στα άκρα της Εικόνας έχουν σαφώς μικρότερο εμβαδό από αυτό που έχει ήδη υπολογιστεί. Άλλωστε, οι ευρεθείσες τιμές που αφορούν τη HAZ θα χρησιμοποιηθούν στη συνέχεια για την ποιοτική σύγκριση της έκτασής της ανά ακτινοβοληθέν spot του υμενίου, για διαφορετικές τιμές ενέργειας Laser και μεγέθους διαφράγματος. Μπορούμε πάντως να δούμε οπτικά, μέσα από το Σχήμα 6.15.[β] και συγκρίνοντάς το με το 6.12.[β], ότι ελαττώνοντας την ενέργεια του Laser μειώνεται και η έκταση της HAZ, σε έναν αρκετά σημαντικό βαθμό, επειδή, λαμβάνοντας υπόψη και τη Gaussian κατανομή του προφίλ της ενέργειας, ο βαθμός προσβολής και θερμοκρασιακής ανύψωσης στις υπόψη περιοχές είναι αρκετά μικρότερος. Σημειώνεται πάντως ότι η μείωση της ενέργειας από τα 3 στα 2 mJ επιφέρει ελάττωση στην έκταση της HAZ κατά $\frac{1.92931 - 1.45474}{1.92931} = 24.6\%$.

6.7.3. Spot δοκιμίου Mo ακτινοβολημένο με παλμό nanosecond Laser ενέργειας 1 mJ, διερχόμενο μέσα από διάφραγμα μεγέθους 3 μm

Ελαττώνοντας περαιτέρω την ενέργεια που εμπεριέχει η ακτίνα Laser που προσπίπτει πάνω στο δοκίμιο, με αποτέλεσμα η τιμή αυτής της ενέργειας να λαμβάνει το 1 mJ, τα χαρακτηριστικά και τα αποτελέσματα της διαδικασίας ακτινοβολήσης και φωτοαποδόμησης ενδέχεται να παρουσιάζουν μία σημαντική διαφοροποίηση, η οποία θα διερευνηθεί εξετάζοντας τα Σχήματα 6.16.[α] και [β]:



Σχήμα 6.16. Απεικονίσεις των ακτινοβοληθεισών περιοχών (spots) πάνω στο λεπτό υμένιο από Mo με nanosecond παλμούς Laser ενέργειας 1 mJ, για μέγεθος διαφράγματος 3 μm . [α] Και τα δύο spots που αποδομήθηκαν, [β] Το ένα από τα δύο προαναφερθέντα spots, σε μεγαλύτερη μεγέθυνση.

Εκ πρώτης όψεως, συγκρίνοντας τα Σχήματα 6.15.[α] και 6.16.[α] μεταξύ τους, μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η μορφή που λαμβάνουν οι φωτοαποδομημένες επιφάνειες (οι οποίες απεικονίζονται ως σχετικά μεγάλες «κηλίδες» γκρι χρώματος, όπως και στις προηγούμενες δύο περιπτώσεις) δε διαφέρει σημαντικά από τη μία περίπτωση στην άλλη. Πιθανώς παρατηρήσιμο είναι το γεγονός ότι η περιφέρεια της κάθε επιφάνειας του Σχήματος 6.16.[α] είναι πιο ομοιογενής και ομαλή από ό,τι στο Σχήμα 6.15.[α], προσομοιάζοντας περισσότερο σε κύκλο. Μία τέτοια διαπίστωση μπορεί να οδηγήσει σε ένα πρώτο συμπέρασμα ότι η ομοιογένεια που προσδίδεται στην επιφάνεια λόγω της φωτοαποδόμησης με παλμό 1 mJ είναι περαιτέρω αυξημένη από ό,τι για τα 2 και 3 mJ. Αυτή η πρόταση, όπως βλέπουμε από το Σχήμα 6.16.[β], επιβεβαιώνεται σε σημαντικό βαθμό, ειδικά αν παρατηρήσουμε την κατανομή και διακύμανση του χρώματος εντός της αποδομημένης επιφάνειας, το οποίο είναι εν γένει σκούρο γκρι, με εξαίρεση κάποιες περιοχές στη «γειτονιά» του σημείου (0,0) όπου το γκρι είναι πιο ανοιχτό, χαρακτηριστικό

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

εντονότερης αποδόμησης λόγω αυξημένης ροής ενέργειας Laser στην υπόψη περιοχή (ικανοποιώντας την κατανομή Gauss). Συμπεραίνουμε δηλαδή ότι η ποιότητα της αποδομημένης επιφάνειας έχει βελτιωθεί περαιτέρω ελαττώνοντας την ένταση της δέσμης στο 1 mJ.

Η διάταξη «αυτιού» που χαρακτηρίζει και αυτή την περίπτωση φωτοαποδόμησης, και η οποία εμφανίζεται στο δεξί τμήμα της αντίστοιχης επιφάνειας, είναι κολλημένη στην κυρίως κυκλική διάταξη, σε αντίθεση με την περίπτωση των 2 mJ, όπου το – σχεδόν ίδιου σχήματος – αντί σχηματίζει ένα μικρό κενό με την υπόλοιπη διάταξη, κάτι που εγείρει ζήτημα μικρο-ατελειών στη διαδικασία φωτοαποδόμησης, με τις ατέλειες αυτές να μην εμφανίζονται στην περίπτωση ακτινοβόλησης της επιφάνειας με Laser 1 mJ (κάτι που όμως οφείλεται περισσότερο σε παράγοντες όπως το βαθμό καθετότητας της ακτίνας Laser με το επίπεδο της επιφάνειας του υμενίου και λιγότερο στην τιμή έντασης του Laser). Είναι επίσης εύκολο να παρατηρηθεί, από το Σχήμα 6.16.[β], ότι μία μικρή επιφάνεια με γκρι χρώμα (κάτι που δηλώνει πλήρη αφαίρεση υλικού μέσω φωτοαποδόμησης), στην αριστερή πλευρά της εικόνας από το μικροσκόπιο, έχει διαχωριστεί από την κυρίως φωτοαποδομημένη επιφάνεια, κάνοντάς μας να υποθέσουμε ότι κάτι τέτοιο παρουσιάστηκε λόγω πιθανής εκτροπής μέρους της δέσμης Laser προς εκείνη την περιοχή, προκαλώντας την αφαίρεση υλικού στην υπόψη περιοχή. Από το ίδιο σχήμα, βλέπουμε ότι η θερμικά επηρεασμένη ζώνη (λευκά – αποχρωματισμένα τμήματα) είναι ιδιαίτερα περιορισμένη, πράγμα που υποδηλώνει ότι μόνο η ακτινοβολημένη περιοχή έχει επηρεαστεί από το Laser, χωρίς να ισχύει το ίδιο για τις γειτονικές θέσεις πάνω στο δοκίμιο.

Κάνοντας την επιθυμητή εστίαση (zoom) στην εικόνα που περιλαμβάνει το ένα spot, φτάνουμε σε μία μεγέθυνση για την οποία η κλίμακα των 50 μm αντιστοιχεί σε μήκος 2.15 cm στο υποδεκάμετρο, κάτι που συνεπάγεται ότι το 1 cm του υποδεκάμετρου μπορεί να εξισωθεί με 23.256 nm. Το κέντρο της κυρίως επιφάνειας φωτοαποδόμησης εκτιμάται ότι δεν είναι το (0,0) στις καρτεσιανές συντεταγμένες (x,y), αλλά χαρακτηρίζεται από συντεταγμένες x και y, αμφότερες λίγο μικρότερες από το 0. Υποθέτοντας ότι η ενσωμάτωση του «αυτιού» και της αριστερής διαχωρισμένης επιφάνειας στην κυρίως φωτοαποδομημένη περιοχή, οδηγούν σε μία επιφάνεια καθορισμένου σχήματος, σχεδόν ορθογωνίου, με οριζόντια και κατακόρυφη διάσταση α και β αντίστοιχα, μπορούμε να μετρήσουμε αυτές τις διαστάσεις και να υπολογίσουμε, με τη βοήθεια της Σχέσης (6.2), τη φωτοαποδομημένη επιφάνεια και, κατ'επέκταση, τη ροή ακτινοβολίας Laser, F. Έχουμε λοιπόν ότι:

- $a = 23.256 \cdot 7.7 = 179.0712 \mu m$
- $\beta = 23.256 \cdot 5.8 = 134.8848 \mu m$

Άρα το εμβαδό της φωτοαποδομημένης επιφάνειας θα είναι ίσο με:

$$A = \frac{\pi \cdot 179.0712 \cdot 134.8848}{4} = 18970.4939 \mu m^2 = 1.89705 \cdot 10^{-4} cm^2 \quad (6.7)$$

και, κατά συνέπεια, η ροή ακτινοβολίας Laser θα λάβει την τιμή:

$$F = \frac{E_{LASER}}{A} = \frac{1 \cdot 10^{-3} [J]}{1.89705 \cdot 10^{-4} [cm^2]} = 5.27134 J/cm^2 \quad (6.8)$$

Αυτό σημαίνει ότι η ελάττωση της έντασης της δέσμης Laser επιφέρει σημαντική ελάττωση της ροής ακτινοβολίας, λαμβάνοντας υπόψη ότι η φωτοαποδομημένη επιφάνεια, σε σχέση με την περίπτωση 6.7.2., δε μειώνεται σε σημαντικό βαθμό.

Όσον αφορά την εύρεση της έκτασης της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ), θα ακολουθήσουμε την ίδια στρατηγική με αυτή που εφαρμόσαμε στα δύο προηγούμενα Εδάφια. Διατηρώντας την εστίαση (zoom) στο Picture Manager σταθερή (23.256 μm της εικόνας για κάθε cm του υποδεκάμετρου), για την εικόνα που αναπαριστά το ένα από τα δύο ακτινοβοληθέντα spots σε μεγέθυνση, μετράμε την οριζόντια διάσταση α' και την κατακόρυφη β' , ως την οριζόντια και την κατακόρυφη απόσταση μεταξύ των απέναντι άκρων της HAZ, λαμβάνοντας υπόψη, ως άξονες συμμετρίας, αυτούς που είναι παράλληλους στους καρτεσιανούς άξονες x και y και διέρχονται από το κέντρο της φωτοαποδομημένης επιφάνειας (την οποία και περικλείει η έκταση εμβαδού $A' = \frac{\pi \alpha' \beta'}{4}$). Οι διαστάσεις α' και β' μπορούν να ευρεθούν

ακολούθως:

- $\alpha' = 23.256 \cdot 11 = 255.816 \mu m$
- $\beta' = 23.256 \cdot 6.7 = 155.8152 \mu m$

Άρα, το εμβαδό A' θα ισούται με $A' = \frac{\pi \cdot 255.816 \cdot 155.8152}{4} = 31305.9874 \mu m^2 = 3.1306 \cdot 10^{-4} cm^2$, με αποτέλεσμα να είναι εντέλει η έκταση της HAZ ίση με $A' - A = (3.1306 - 1.89705) \cdot 10^{-4} = 1.23355 \cdot 10^{-4} cm^2$. Λόγω της μείωσης της ενέργειας του παλμού Laser

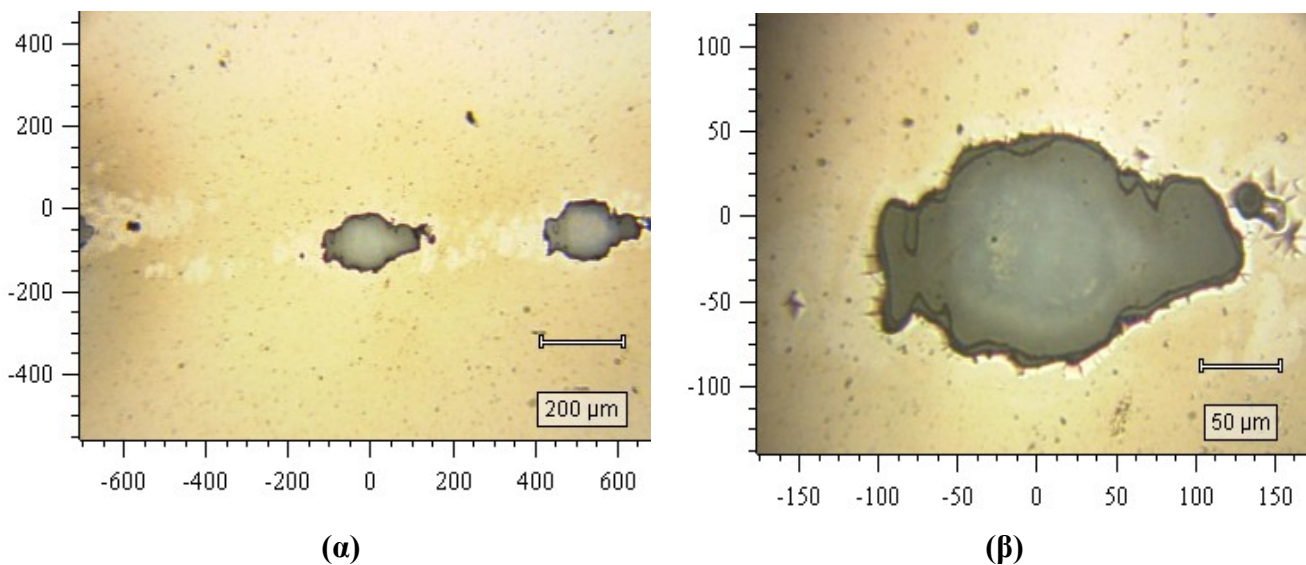
στο 1 mJ, είναι δικαιολογημένη η περαιτέρω μείωση της HAZ, με τη ζώνη αυτή να εκτείνεται αρκετά έξω από τη φωτοαποδομημένη περιοχή στον άξονα X, αλλά να περιορίζεται μόνο σε θέσεις επί του άξονα Y που γειτνιάζουν άμεσα με την περιοχή αυτή. Η αυτούσια μορφή και η παραμόρφωση της Gaussian δέσμης Laser παίζουν πολύ σημαντικό ρόλο στον τρόπο με τον οποίο διαμορφώνεται γεωμετρικά η HAZ, καθώς επίσης και στην τιμή της ποσότητας $A' - A$ που αντικατοπτρίζει το εμβαδό της. Για πληροφοριακούς σκοπούς, μπορούμε να δούμε ότι η ελάττωση της ενέργειας του Laser από τα 2

στο 1 mJ επιφέρει μείωση της έκτασης της HAZ κατά $\frac{1.45474 - 1.23355}{1.45474} = 15.2\%$.

6.7.4. Spot δοκιμίου Mo ακτινοβολημένο με παλμό nanosecond Laser ενέργειας 3 mJ, διερχόμενο μέσα από διάφραγμα μεγέθους 1.5 μm

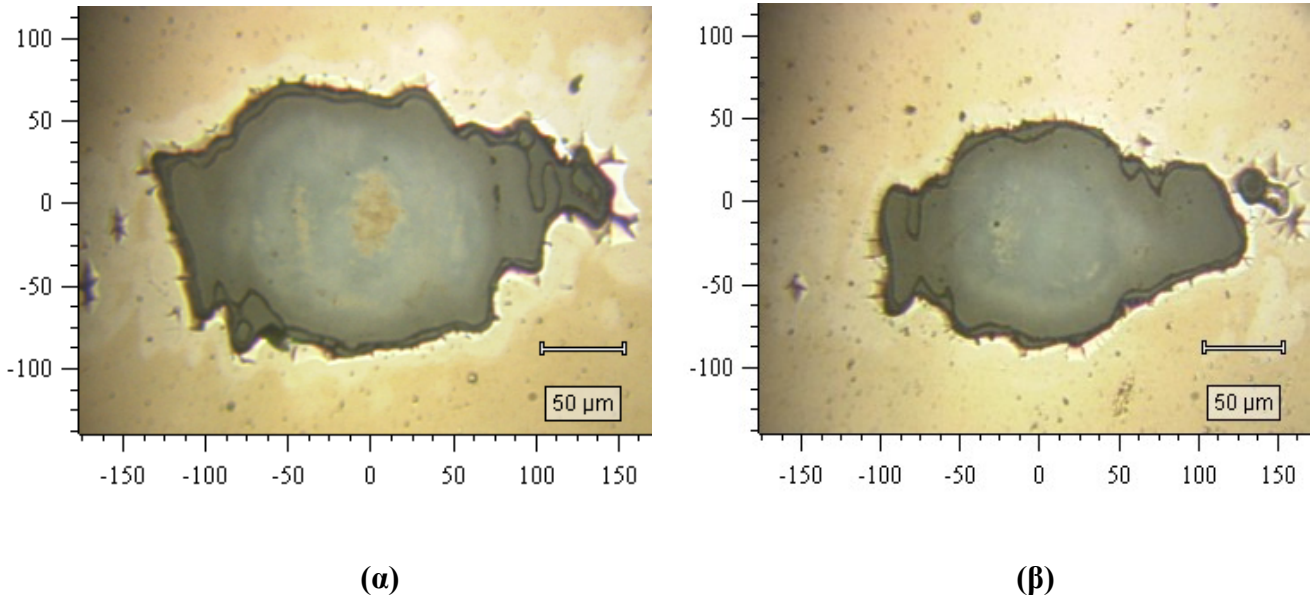
Προκειμένου να διαπιστώσουμε το βαθμό και τον τρόπο με τον οποίο η μεταβολή του διαφράγματος επηρεάζει διάφορα χαρακτηριστικά της συντελούμενης φωτοαποδόμησης, επιλέγουμε, αφότου διεξαχθεί η ακτινοβολή των δοκιμίων έχοντας ορίσει το μέγεθος διαφράγματος στα 3 μm , να ελαττώσουμε αυτό το μέγεθος στο μισό, δηλαδή στην τιμή $D = 1.5 \mu\text{m}$. Εντοπίζουμε έξι «σημειακές περιοχές» (spots) πάνω στο υμένιο από Mo που δεν έχουν ακόμα ακτινοβοληθεί, και χτυπάμε με το Laser δύο spots για κάθε διαφορετική τιμή έντασης της δέσμης μεταξύ 3, 2 και 1 mJ, όπως έχουμε ήδη δει και στα Εδάφια 6.7.1. έως 6.7.3. αντίστοιχα.

Για την περίπτωση της έντασης των 3 mJ, τα Σχήματα 6.17.[α] και [β] θα μας δώσουν μία εικόνα για τη μορφή των φωτοαποδομημένων επιφανειών, όπως αυτές έχουν παρατηρηθεί σε μικροκλίμακα με τη βοήθεια του μικροσκοπίου Raman που διαθέτει το ΕΙΕ για την υπόψη περίπτωση.



Σχήμα 6.17. Απεικονίσεις των ακτινοβοληθεισών περιοχών (spots) πάνω στο λεπτό υμένιο από Mo με nanosecond παλμούς Laser ενέργειας 3 mJ, για μέγεθος διαφράγματος 1.5 μm . [α] Και τα δύο spots που αποδομήθηκαν, [β] Το ένα από τα δύο προαναφερθέντα spots, σε μεγαλύτερη μεγέθυνση.

Παραθέτουμε επίσης, σε σύγκριση, τις φωτογραφίες που δείχνουν, σε κοντινή κλίμακα, τη μορφή που έχουν οι ακτινοβοληθείσες (και, κατ'επέκταση, φωτοαποδομημένες) επιφάνειες όταν πάνω σε αυτές προσέπεσε δέσμη Laser έντασης 3 mJ, για τις δύο διαφορετικές τιμές (3 μm και 1.5 μm) του μεγέθους διαφράγματος (Σχήματα 6.18.[α] και [β]):



Σχήμα 6.18. Σύγκριση στη δομή και τη μορφολογία των επιφανειών που έχουν υποστεί φωτοαποδόμηση (αφαίρεση υλικού) λόγω της εφαρμογής Gauss δέσμης Laser έντασης 3 mJ, για διαφορετικές τιμές μεγέθους διαφράγματος: [α] 3 μm, [β] 1.5 μm.

Αρχικά, διαπιστώνουμε ότι η μείωση του μεγέθους διαφράγματος ελαττώνει και την έκταση της φωτοαποδομημένης περιοχής, κάτι που μπορούμε εύκολα να παρατηρήσουμε επειδή η κλίμακα εστίασης των δύο εικόνων [α] και [β] είναι η ίδια. Βλέπουμε επίσης ότι και η θερμικά επηρεασμένη ζώνη (λευκές / αποχρωματισμένες περιοχές γύρω από τη γκρίζα, που υποδηλώνει φωτοαποδόμηση) έχει περιοριστεί σε σαφή βαθμό. Τα παραπάνω μπορούν να εξηγηθούν από το γεγονός ότι η μείωση του μεγέθους διαφράγματος οδηγεί σε μεγαλύτερη συγκέντρωση της ακτινοβολίας Laser γύρω από την κεντρική της θέση (με τη μέγιστη ένταση). Σε μαθηματικό επίπεδο, θα μπορούσαμε να πούμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, ότι αυτό το φαινόμενο έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία μιας νέας κατανομής Gauss όσον αφορά τη δέσμη Laser, για την οποία η μέση τιμή διατηρείται ίδια και η τυπική απόκλιση ελαττώνεται. Τα παραπάνω μπορούν να δικαιολογήσουν την οπτική παρατήρηση σύμφωνα με την οποία αυξάνεται η ομοιομορφία της επιφάνειας όταν ελαττώνεται το μέγεθος του διαφράγματος. Κάτι τέτοιο όντως συμβαίνει, καθ'ότι η επιφάνεια του Σχήματος [β] είναι περισσότερο στρογγυλεμένη από την [α], ενώ και το μέγεθος των δημιουργούμενων «αυτιών» (π.χ. στην αριστερή πλευρά) είναι και αυτό μικρότερο. Τέλος, αξίζει να αναφέρουμε ότι η αποδόμηση στην περίπτωση [β] έχει εκτελεστεί περισσότερο ομαλά, κάτι που έχει ως αποτέλεσμα να μην εμφανίζεται η καφέ κηλίδα που υποδηλώνει «κάψιμο» στο κέντρο της φωτοαποδομημένης περιοχής, αντίθετα με την περίπτωση [α], ενώ η μικρή γκρίζα κηλίδα στο δεξί τμήμα της εικόνας [β] δείχνει ότι ενδεχομένως μέρος της δέσμης να εξετράπη από την επιθυμητή πορεία

(πιθανώς λόγω ατελειών στην ευθυγράμμιση), αφαιρώντας υλικό από το μικρό τμήμα της επιφάνειας και προσδίδοντάς του, ως συνέπεια, μορφή γκρίζας κηλίδας. Πάντως, όπως μπορούμε να δούμε με μεγαλύτερη λεπτομέρεια λίγο πιο αριστερά από το κέντρο της φωτοαποδομημένης περιοχής στο Σχήμα [β], εμφανίζονται κάποιες μικρής έκτασης καφέ περιοχές, στις οποίες έχει προσπέσει λίγο μεγαλύτερη ποσότητα ακτινοβολίας Laser, πιθανώς λόγω ατελούς ευθυγράμμισης (alignment).

Είναι επίσης σημαντικό να μην αγνοήσουμε το γεγονός ότι η μείωση των διαστάσεων της φωτοαποδομημένης επιφάνειας, καθώς ελαττώνεται το διάφραγμα στο μισό, είναι σχετικά ομοιόμορφη, δηλαδή ο λόγος $\alpha:\beta$, όπου α η οριζόντια διάσταση και β η κατακόρυφη, διατηρείται σχεδόν σταθερός. Για να επιβεβαιώσουμε τα λεγόμενά μας, θα μετρήσουμε αρχικά την οριζόντια και κατακόρυφη διάσταση με τη βοήθεια υποδεκάμετρου, το οποίο θα έχουμε τοποθετήσει πάνω στους άξονες συμμετρίας της φωτοαποδομημένης περιοχής, διατηρώντας πλήρη παραλληλία με τους καρτεσιανούς αριθμημένους άξονες της Εικόνας 6.18.[β].

Αρχικά εστιάζουμε τη συγκεκριμένη εικόνα στο βαθμό Zoom που επιθυμούμε, μέσα από το λογισμικό *Microsoft Office Picture Manager*, για το οποίο έχει ήδη γίνει αναφορά σε προηγούμενο εδάφιο. Για την εστίαση που έχουμε εφαρμόσει, τα 50 μm της εμφανιζόμενης κλίμακας αντιστοιχούν σε 2.35 cm του υποδεκάμετρου, κάτι που σημαίνει ότι το 1 cm απεικονίζει απόσταση 21.277 μm πάνω στην εικόνα του δοκιμίου. Με βάση τα παραπάνω, και παραδεχόμενοι ότι η μικρή γκρίζα κηλίδα έχει ενσωματωθεί σε κάποιο σημείο της κυρίως επιφάνειας (όσον αφορά τη μέτρηση του εμβαδού που θα διεξαχθεί στη συνέχεια), μετράμε τις διαστάσεις α και β για την περιοχή που μας ενδιαφέρει:

- $\alpha = 21.277 \cdot 10.6 = 225.536 \mu\text{m}$
- $\beta = 21.277 \cdot 5.8 = 123.407 \mu\text{m}$

Ο λόγος διαστάσεων $\alpha:\beta$ υπολογίζεται παρακάτω:

- Για μέγεθος διαφράγματος 3 μm : $R_{\alpha\beta} = \frac{271.084}{153.318} = 1.7681$
- Για μέγεθος διαφράγματος 1.5 μm : $R_{\alpha\beta} = \frac{225.536}{123.407} = 1.8276$

Από τα παραπάνω παρατηρούμε του λόγου του αληθές, ότι δηλαδή ο λόγος διαστάσεων $\alpha:\beta$ δεν παρουσιάζει αξιόλογη μεταβολή, μόνο δηλαδή σε ποσοστό $\frac{1.8276 - 1.7681}{1.7681} \cdot 100\% = 3.365\%$ προς τα πάνω καθώς ελαττώνεται το διάφραγμα.

Για την εξεταζόμενη επιφάνεια του παρόντος Εδαφίου, ο τύπος (6.2) θα μας βοηθήσει να υπολογίσουμε, κατά προσέγγιση, την τιμή του εμβαδού της επιφάνειας που έχει δημιουργηθεί λόγω της φωτοαποδόμησης:

$$A = \frac{\pi \cdot 225.536 \cdot 123.407}{4} = 21859.7681 \mu\text{m}^2 = 2.18598 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2 \quad (6.9)$$

Ακολουθεί η εύρεση της ροής ακτινοβολίας Laser (Laser Fluence), σε μονάδες ενέργειας ανά μήκος:

$$F = \frac{E_{LASER}}{A} = \frac{3 \cdot 10^{-3} [J]}{2.18659 \cdot 10^{-4} [cm^2]} = 13.719993 J/cm^2 \quad (6.10)$$

Συγκρίνοντας την τιμή αυτή με την ποσότητα που υπολογίστηκε από τη Σχέση (6.4) και αφορά την περίπτωση ίδιας έντασης της δέσμης αλλά διπλάσιου μεγέθους διαφράγματος (η ποσότητα αυτή βρέθηκε ίση με $9.190388 J/cm^2$), παρατηρούμε ότι η ελάττωση του διαφράγματος στο μισό επιφέρει σαφώς

σημαντική αύξηση στη ροή ακτινοβολίας, κατά $\frac{13.719993 - 9.190388}{9.190388} \cdot 100\% = 49.29\%$. Αυτή η αύξηση

προφανώς οφείλεται στην ελάττωση της έκτασης της επιφάνειας από την οποία αφαιρείται υλικό λόγω της επίδρασης της ακτινοβολίας Laser πάνω σε αυτό.

Ιδιαίτερη σημασία θα έχει, επί του παρόντος, και η επίδραση της αλλαγής της διαμέτρου (του μεγέθους) διαφράγματος από τα 3 μm στο 1.5, στο πώς διαμορφώνεται οπτικά η θερμικά επηρεασμένη ζώνη (HAZ) και πώς μεταβάλλεται η έκτασή της. Το συγκριτικό Σχήμα 6.18., για την ίδια τιμή ενέργειας Laser (3 mJ) αλλά λαμβάνοντας υπόψη διαφορετικά μεγέθη διαφράγματος, μπορεί να μας βοηθήσει να βγάλουμε το ιδιαίτερα χρήσιμο συμπέρασμα ότι η HAZ ελαττώνεται δραματικά όταν μειώνουμε το μέγεθος του διαφράγματος. Ο λόγος, και σε αυτή την περίπτωση, είναι κατά πάσα πιθανότητα το γεγονός ότι οι ακτίνες του Laser που συναποτελούν τον παλμό είναι περισσότερο συγκεντρωμένες γύρω από το σημείο μέγιστης έντασης του Gaussian προφίλ και άρα λιγότερο διασκορπισμένες ανά το επίπεδο XY. Η ελάττωση του μεγέθους διαφράγματος επιδρά και στην ομοιομορφία της HAZ, η οποία έχει λιγότερο ακανόνιστο σχήμα, κατ'αντιστοιχία και με την κυρίως φωτοαποδομημένη περιοχή. Ενδεχομένως βέβαια να εμφανίζονται ορισμένες περιοχές, διάσπαρτες πάνω στο Σχήμα 6.18.[β], που έχουν αποχρωματιστεί και αυτές, κάτι που, με αυτό τον τρόπο, υποδηλώνει ότι έχουν επηρεαστεί και αυτές, σε θερμικό επίπεδο, από την ακτινοβολία Laser που έχει προσπέσει, με αποτέλεσμα να μπορούμε να τις τοποθετήσουμε στη HAZ. Ωστόσο, αυτές χαρακτηρίζονται από πολύ μικρή έως αμελητέα έκταση και δε θα συνυπολογιστούν στη διαδικασία εύρεσης της HAZ, η οποία θα είναι η ίδια με αυτή που εξετάστηκε στα Εδάφια 6.7.1. έως 6.7.3..

Συγκεκριμένα, θα διατηρήσουμε την εστίαση (zoom) του Σχήματος 6.18.[β], μέσα στο Microsoft Office Picture Manager, σε ένα επίπεδο τέτοιο, ώστε να μην επηρεάζεται η αντιστοιχία των 2.35 μm του Σχήματος ανά 1 cm του υποδεκάμετρου, που έχουμε αναφέρει και παραπάνω. Μετράμε την οριζόντια και κατακόρυφη απόσταση (α' και β' , αντίστοιχα) μεταξύ των ακραίων θέσεων της HAZ, οι οποίες

βρίσκονται περιμετρικά της φωτοαποδομημένης επιφάνειας, κάτι που μπορεί στη συνέχεια, με τη βοήθεια της γενικευμένης σχέσης υπολογισμού εμβαδών $A = \frac{\pi \alpha' \beta'}{4}$ για επιφάνειες που προσομοιάζουν σε ορθογώνιο ή κύκλο, να μας οδηγήσει στην εύρεση της έκτασης της περιοχής που συμπεριλαμβάνει τη HAZ και τη φωτοαποδομημένη επιφάνεια μαζί. Έχουμε λοιπόν τα εξής:

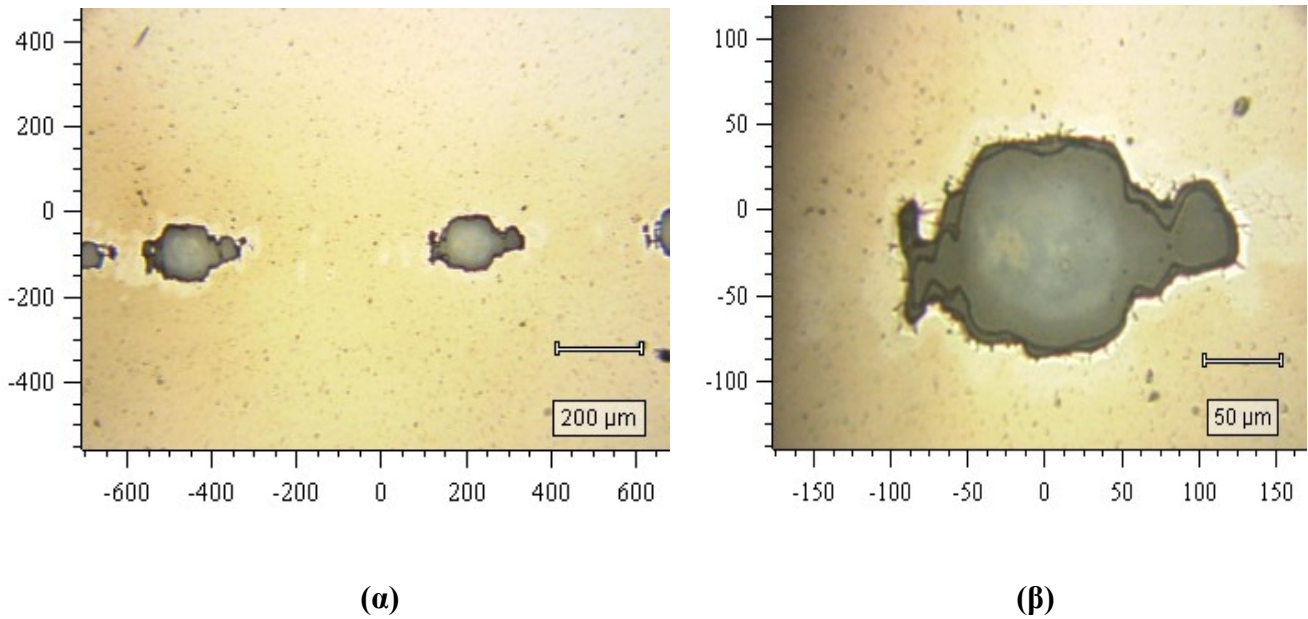
- $\alpha' = 12.7 \cdot 21.277 = 270.2179 \mu\text{m}$
- $\beta' = 7.3 \cdot 21.277 = 155.3321 \mu\text{m}$
- $A' = \frac{\pi \cdot 270.2179 \cdot 155.3321}{4} = 32965.9207 \mu\text{m}^2 = 3.29659 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$

Η έκταση που αντιστοιχεί μόνο στη HAZ, χωρίς να υπολογίζεται το εμβαδό της φωτοαποδομημένης περιοχής που περικλείεται, θα ισούται με $A' - A = (3.29659 - 2.18598) \cdot 10^{-4} = 1.11061 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$, που είναι μία ιδιαίτερα χαμηλή τιμή, αν ανατρέξουμε στις αριθμητικές τιμές που βρήκαμε στα τρία προηγούμενα Εδάφια. Αρχικά, μπορούμε να δούμε ότι η ελάττωση του διαφράγματος, με την ενέργεια του Laser

σταθερή στα 3 mJ, επιφέρει σημαντική μείωση στην έκταση της HAZ, κατά $\frac{1.92931 - 1.11061}{1.92931} = 42.43\%$, κάτι που αποτελεί πολύ σημαντικό ποσοστό. Πέραν του μειωμένου διαφράγματος, ένας επιπρόσθετος λόγος στον οποίο μπορεί να οφείλεται αυτή η σημαντική ελάττωση, έχει να κάνει με το εξής: Μπορούμε να παρατηρήσουμε, με τη βοήθεια του Σχήματος 6.18.[β], ότι λαμβάνει χώρα αποχρωματισμός της επιφάνειας περισσότερο κατά τον οριζόντιο (X) άξονα και πολύ λιγότερο κατά τον κατακόρυφο (Y) – άλλωστε, οι αποστάσεις β και β' , όπως αυτές έχουν βρεθεί στο τρέχον Εδάφιο, δεν παρουσιάζουν σημαντική διαφορά. Το γεγονός λοιπόν ότι η ποσότητα $|\beta - \beta'|$ είναι ιδιαίτερα μικρή ($|\beta - \beta'| = |123.407 - 155.3321| = 31.9251 \mu\text{m}$), επηρεάζει και την τελική έκταση που αποκτά η HAZ.

6.7.5. Spot δοκιμίου Mo ακτινοβολημένο με παλμό nanosecond Laser ενέργειας 2 mJ, διερχόμενο μέσα από διάφραγμα μεγέθους 1.5 μm

Τα παρακάτω Σχήματα 6.19.[α] και [β] έχουν σκοπό να μας παρουσιάσουν το πώς έχει διαμορφωθεί η φωτοαποδομημένη επιφάνεια των δύο spots που ακτινοβολήθηκαν πάνω στο λεπτό υμένιο από Mo, με την ένταση της δέσμης Laser να έχει διαμορφωθεί στα 2 mJ και το μέγεθος του διαφράγματος στο 1.5 μm .

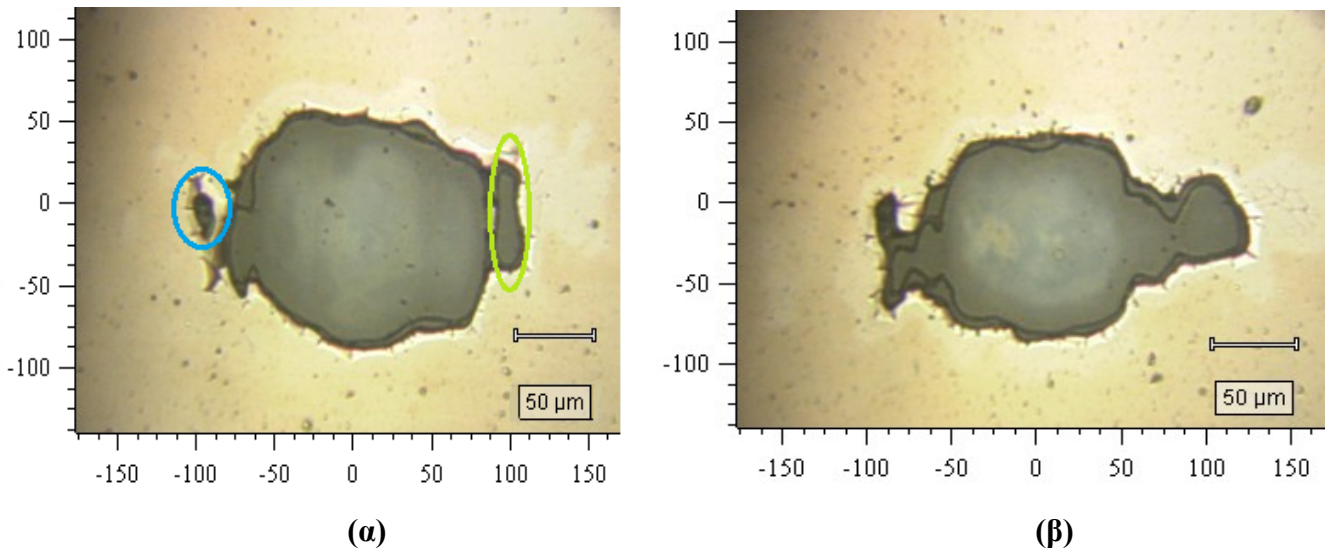


Σχήμα 6.19. Απεικονίσεις των ακτινοβοληθεισών περιοχών (spots) πάνω στο λεπτό υμένιο από Mo με nanosecond παλμούς Laser ενέργειας 2 mJ, για μέγεθος διαφράγματος 1.5 μm. [α] Και τα δύο spots που αποδομήθηκαν, [β] Το ένα από τα δύο προαναφερθέντα spots, σε μεγαλύτερη μεγέθυνση. Στην εικόνα [α] δίνεται έμφαση στις δύο κεντρικές γκρίζες περιοχές (οι ακραίες αφορούν τμήματα που έχουν ακτινοβοληθεί στα πλαίσια πειραμάτων υπό άλλες συνθήκες).

Συγκρίνοντας τα Σχήματα 6.17.[β] και 6.19.[β] μεταξύ τους, μπορούμε να οδηγηθούμε σε δύο σημαντικές παρατηρήσεις:

- Μειώνοντας την ενέργεια του Laser, επέρχεται μία μικρή ελάττωση στην έκταση της φωτοαποδομημένης επιφάνειας, αλλά και της θερμικά επηρεασμένης ζώνης.
- Η απόληξη που εμφανίζεται στο δεξί τμήμα της περιοχής όπου έλαβε χώρα η φωτοαπόδοση, όπως απεικονίζεται στο Σχήμα 6.19.[β], είναι λιγότερο εκτεταμένη και μικρότερου μεγέθους σε σχέση με την αντίστοιχη του Σχήματος 6.17.[β], κάτι που δικαιολογεί τη διαπίστωση ότι αυξάνεται η ομοιομορφία της επιφάνειας καθώς η ενέργεια του Laser ελαττώνεται.

Παραθέτουμε επίσης, ένα συγκριτικό Σχήμα (το 6.20. παρακάτω), στο οποίο εμφανίζεται στην αριστερή πλευρά η φωτοαποδομημένη επιφάνεια που προέκυψε από την εφαρμογή Laser έντασης 2 mJ, για μέγεθος διαφράγματος 3 μm, και στη δεξιά πλευρά η περιοχή που σχηματίστηκε για ίδια ένταση δέσμης Laser και διάφραγμα 1.5 μm:



Σχήμα 6.20. Σύγκριση στη δομή και τη μορφολογία των επιφανειών που έχουν υποστεί φωτοαποδόμηση (αφαίρεση υλικού) λόγω της εφαρμογής Gauss δέσμης Laser έντασης 2 mJ, για διαφορετικές τιμές μεγέθους διαφράγματος: [α] 3 μm , [β] 1.5 μm .

Εκ πρώτης όψεως, μπορούμε να παρατηρήσουμε, συγκρίνοντας το Σχήμα 6.20.[α] με το [β], ότι οι όποιες διαφοροποιήσεις προκαλούνται, λόγω της μείωσης του διαφράγματος, αφορούν κυρίως το σχήμα και τη διαμόρφωση της φωτοαποδομημένης περιοχής, και δε σχετίζονται σε ιδιαίτερο βαθμό ούτε με το εμβαδόν της, το οποίο οπτικά φαίνεται σχεδόν αμετάβλητο, αλλά ούτε και με την έκταση της θερμικά επηρεασμένης ζώνης, η οποία βέβαια υφίσταται μία μικρή φυσιολογική ελάττωση λόγω της μεταβολής του μεγέθους διαφράγματος προς τα κάτω.

Μία θετική επίδραση της μείωσης του διαφράγματος, όπως φαίνεται από τη σύγκριση, είναι το γεγονός ότι η φωτοαποδομημένη επιφάνεια είναι ενιαία και δεν απαρτίζεται από τμήματα ανάμεσα στα οποία υπάρχουν κενά, έστω και μικρά. Στο Σχήμα 6.20.[α], οι επιφάνειες που έχουν σημειωθεί με γαλάζιο και πράσινο κύκλο εμφανίζουν δείγματα φωτοαποδόμησης (λόγω του γκριζού χρώματος), αλλά δεν είναι ενωμένες με την κυρίως περιοχή. Κάτι τέτοιο δεν εμφανίζεται στο Σχήμα [β], δείγμα του ότι τα κενά αυτά έχουν εξαλειφθεί και η επιφάνεια που προέκυψε έχει γίνει περισσότερο ομοιογενής.

Το γεγονός ότι στο Σχήμα [β] το χρώμα που απεικονίζει το μικροσκόπιο Raman έχει εν γένει πιο ανοιχτή γκρι απόχρωση, ειδικά περιμετρικά του κέντρου της φωτοαποδομημένης επιφάνειας, σε σχέση με την περίπτωση του [α]. Κάτι τέτοιο καταδεικνύει εντονότερη ακτινοβολή της υπόψη περιοχής σε σχέση με τα εξωτερικά άκρα της. Θα μπορούσε να οφείλεται σε ένα βαθμό στη μεγαλύτερη συγκέντρωση Laser λόγω του μικρότερου διαφράγματος, αλλά και σε άλλους παράγοντες όπως είναι η ατελής ευθυγράμμιση της δέσμης.

Εφαρμόζοντας, στο Σχήμα 6.20.[β], την επιθυμητή εστίαση, ώστε να είναι εύκολα παρατηρήσιμες οι διαστάσεις της φωτοαποδομημένης επιφάνειας, φτάνουμε σε ένα σημείο στο οποίο η μεγέθυνση έχει γίνει σε τέτοιο βαθμό, ώστε τα 50 μm της κλίμακας του μικροσκοπίου να αντιστοιχούν σε 2.35 cm στο υποδεκάμετρο, κατά τέτοιον τρόπο δηλαδή ώστε το 1 cm του υποδεκάμετρου να συμβαδίζει με 21.277 μm πάνω στην εικόνα του δοκιμίου. Λαμβάνοντας το κέντρο της γκρι περιοχής και τοποθετώντας το υποδεκάμετρο παράλληλα στον οριζόντιο και κατακόρυφο καρτεσιανό αριθμημένο άξονα που παρατηρείται πάνω στην εικόνα, μπορούμε να υπολογίσουμε προσεγγιστικά την οριζόντια διάσταση a και την κατακόρυφη β :

- $a = 21.277 \cdot 10.2 = 217.0254 \mu\text{m}$
- $\beta = 21.277 \cdot 6 = 127.662 \mu\text{m}$

Ο λόγος διαστάσεων $a:\beta$, για ενέργεια ακτινοβολίας Laser 2 mJ και τα δύο διαφορετικά μεγέθη διαφράγματος 3 και 1.5 μm , υπολογίζεται παρακάτω:

- Για μήκος διαφράγματος 3 μm : $R_{a\beta} = \frac{186.1738}{143.287} = 1.29931$
- Για μήκος διαφράγματος 1.5 μm : $R_{a\beta} = \frac{217.0254}{127.662} = 1.7$

Από τα παραπάνω, βλέπουμε ότι η επιφάνεια που προκύπτει λόγω της μείωσης του διαφράγματος αλλάζει σε σημαντικό βαθμό όσον αφορά το τελικό σχήμα. Πάντως, η επιφάνεια του Σχήματος [β] χαρακτηρίζεται από μεγαλύτερη πολυπλοκότητα συγκριτικά με αυτή του [α], κάτι στο οποίο οφείλονται οι πιθανές ανακρίβειες όσον αφορά τον υπολογισμό των διαστάσεων αλλά και του λόγου αυτών. Βέβαια, ακόμα και με την παραπάνω θεώρηση, καταλήγουμε στη διαπίστωση ότι η ελάττωση του διαφράγματος στα 1.5 μm , διατηρώντας την ενέργεια του Laser σταθερή, επιφέρει αύξηση στο λόγο διαστάσεων κατά $\frac{1.7 - 1.29931}{1.29931} = 30.84\%$ περίπου.

Για την εξεταζόμενη επιφάνεια του παρόντος Εδαφίου, ο τύπος (6.2) θα μας βοηθήσει να υπολογίσουμε, κατά προσέγγιση, την τιμή του εμβαδού της επιφάνειας που έχει δημιουργηθεί λόγω της φωτοαποδόμησης. Λόγω πάντως της πολυπλοκότητας της επιφάνειας, ίσως κρίνεται απαραίτητο αυτή να διαχωριστεί σε μικρότερα τμήματα διακριτού και καθορισμένου σχήματος, ώστε το εμβαδό να προκύψει με μεγαλύτερη ακρίβεια, αλλά κάτι τέτοιο δεν είναι απαραίτητο να μας απασχολεί σε έντονο βαθμό, στα πλαίσια της ανάλυσής μας. Έχουμε λοιπόν ότι:

$$A = \frac{\pi \cdot 217.0254 \cdot 127.662}{4} = 21760.16 \mu\text{m}^2 = 2.17602 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2 \quad (6.11)$$

Παραθέτοντας δίπλα-δίπλα τις σχέσεις (6.7) και (6.9), είναι σημαντικό να αναφέρουμε ότι η ελάττωση της έντασης του Laser κατά 1 mJ δεν επιφέρει ιδιαίτερη μεταβολή στην έκταση της φωτοαποδομημένης επιφάνειας. Όσον αφορά τη ροή ακτινοβολίας Laser, αυτή θα υπολογιστεί παρακάτω:

$$F = \frac{E_{LASER}}{A} = \frac{2 \cdot 10^{-3} [J]}{2.17602 \cdot 10^{-4} [cm^2]} = 9.19109 J/cm^2 \quad (6.12)$$

Συγκρίνοντας την τιμή αυτή με την ποσότητα που υπολογίστηκε από τη Σχέση (6.6) και αφορά την περίπτωση ίδιας έντασης της δέσμης αλλά διπλάσιου μεγέθους διαφράγματος (η ποσότητα αυτή βρέθηκε ίση με $9.54586 \frac{J}{cm^2}$), παρατηρούμε ότι η ελάττωση του διαφράγματος στο μισό επιφέρει μία μικρή

μείωση στη ροή ακτινοβολίας, κατά $\frac{9.54586 - 9.19109}{9.54586} \cdot 100\% = 8.58\%$. Αυτή η διακύμανση του μεγέθους F δικαιολογείται από το γεγονός ότι το εμβαδό της φωτοαποδομημένης επιφάνειας διατηρείται πρακτικά σταθερό, ενώ ταυτόχρονα μειώνεται η ενέργεια που περικλείει η ακτινοβολία Laser (με το τελευταίο μέγεθος να βρίσκεται στον αριθμητή της Σχέσης (6.10), μέσω της οποίας υπολογίζεται το F).

Προχωράμε τώρα στην ανάλυσή μας σχετικά με την έκταση της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ) και την τιμή στην οποία αυτή διαμορφώνεται. Εκ πρώτης όψεως, παρατηρώντας τις δύο εικόνες [α] και [β] πάνω στο Σχήμα 6.20., μπορούμε να δούμε ότι η έκταση της HAZ ελαττώνεται μόνο σε μικρό βαθμό, εάν διατηρηθεί η ενέργεια του Laser στα 2 mJ και ελαττωθεί η διάμετρος του διαφράγματος κατά 50%. Κάτι τέτοιο έρχεται σε άμεση αντίθεση με τα όσα έχουμε παρατηρήσει στο Εδάφιο 6.7.4., που αφορούσαν τη σημαντική μείωση στο εμβαδό της HAZ έπειτα από το «στένεμα» του διαφράγματος. Κυρίαρχο ρόλο παίζει η ατελής ευθυγράμμιση και παραμόρφωση της προσπίπτουσας δέσμης Laser ενέργειας 2 mJ, κατά τη διάρκεια της πραγματοποίησης των πειραμάτων στο ΕΙΕ.

Η διαπίστωσή μας σχετικά με το πόσο μειώνεται η HAZ μπορεί να επιβεβαιωθεί (ή να διαψευσθεί) διεξάγοντας τους αντίστοιχους ποσοτικούς υπολογισμούς, όπως ακριβώς συνέβη και στα τέσσερα προηγούμενα Εδάφια της Υποενότητας 6.7.. Διατηρώντας, στο Σχήμα 6.20.[β], το βαθμό εστίασης (Zoom) σταθερό στα 2.35 μm της εικόνας ανά 1 cm του υποδεκάμετρου (μέσα από το Picture Manager), έχουμε τη δυνατότητα να υπολογίσουμε την οριζόντια και κατακόρυφη διάσταση (a' και β' , αντίστοιχα) της περιοχής που περιλαμβάνει τόσο τη HAZ όσο και τη φωτοαποδομημένη επιφάνεια. Φέρουμε νοητές παράλληλες γραμμές προς τους δύο άξονες συμμετρίας και μετράμε τις προκύπτουσες διαστάσεις:

- $a' = 12.6 \cdot 21.277 = 268.0902 \mu m$
- $\beta' = 7.4 \cdot 21.277 = 157.4498 \mu m$

Αυτό σημαίνει ότι το εμβαδό της περιοχής A' , από την οποία θα αφαιρεθεί η φωτοαποδομημένη επιφάνεια A για να βρεθεί η HAZ, θα είναι το εξής:

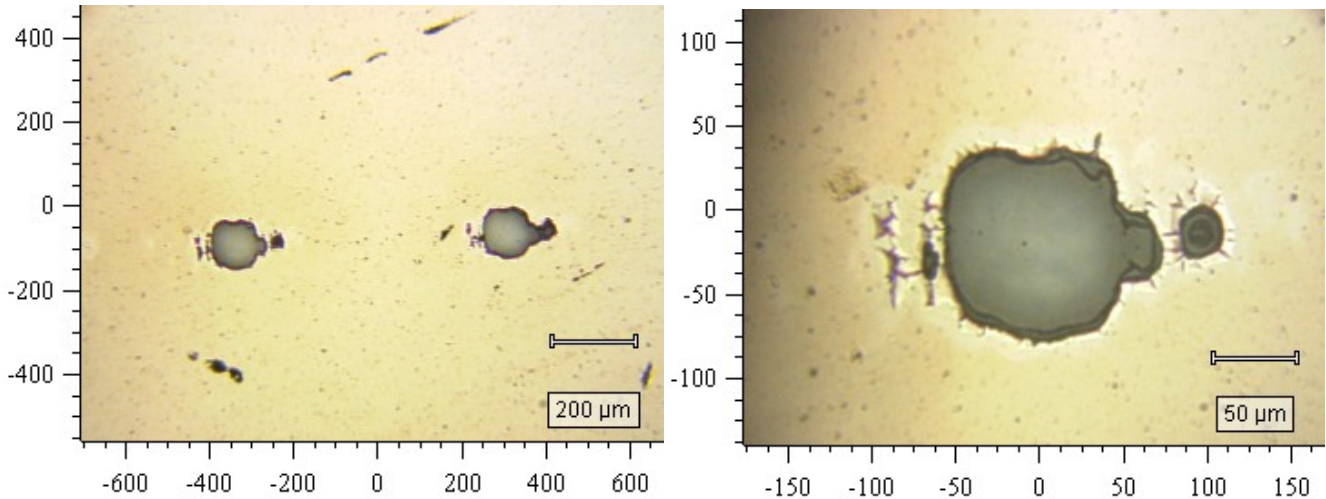
$$A' = \frac{\pi \cdot 268.0902 \cdot 157.4498}{4} = 33152.2442 \mu\text{m}^2 = 3.31522 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$$

Τελικά: $HAZ = A' - A = (3.31522 - 2.17602) \cdot 10^{-4} = 1.1392 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$.

Καταρχήν, παρατηρούμε, έχοντας υπολογίσει την αντίστοιχη έκταση της HAZ για την περίπτωση ακτινοβολήσης με Laser ενέργειας 3 mJ (1.11061cm^2), ότι η μείωση της ενέργειας δεν επιφέρει υπολογίσιμη μεταβολή στην έκταση της HAZ (το αντίστοιχο ποσοστό ισούται, πληροφοριακά, με $\frac{1.1392 - 1.11061}{1.1392} = 2.51\%$). Αν όμως κάνουμε τη σύγκριση με την τιμή $1.45474 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$, που αναφέρεται σε spot που ακτινοβολήθηκε με Laser ίδιας ενέργειας, με τη δέσμη όμως να έχει διέλθει μέσα από διάφραγμα διαμέτρου 3 μm , μπορούμε να παρατηρήσουμε μία σημαντική ελάττωση της τάξης του $\frac{1.45474 - 1.11061}{1.45474} = 23.66\%$, οφειλόμενη κατά κύριο λόγο στην ελάττωση του διαφράγματος. Αυτή είναι υπεύθυνη για τη συγκέντρωση της δέσμης Laser πιο κοντά στο κέντρο της ακτίνας της, με αποτέλεσμα να προβάλλει ένα στενότερο εύρος θέσεων πάνω στο επίπεδο XY, όπως έχουμε διαπιστώσει και σε προηγούμενες περιπτώσεις. Αυτή η σημαντική μείωση στη θερμικά επηρεασμένη ζώνη, ταυτόχρονα με την αυξημένη ομοιομορφία εντός της φωτοαποδομημένης επιφάνειας, είναι δύο παράγοντες εξέχουσας σημασίας που συμβάλλουν στο να βελτιωθεί σε έναν ικανοποιητικό βαθμό η ποιότητα της φωτοαποδόμησης, που άλλωστε είναι και ένας επιζητούμενος σκοπός από τους περισσότερους Μηχανικούς που καταπιάνονται με αυτού του τύπου τις κατεργασίες.

6.7.6. Spot δοκιμίου Mo ακτινοβολημένο με παλμό nanosecond Laser ενέργειας 1 mJ, διερχόμενο μέσα από διάφραγμα μεγέθους 1.5 μm

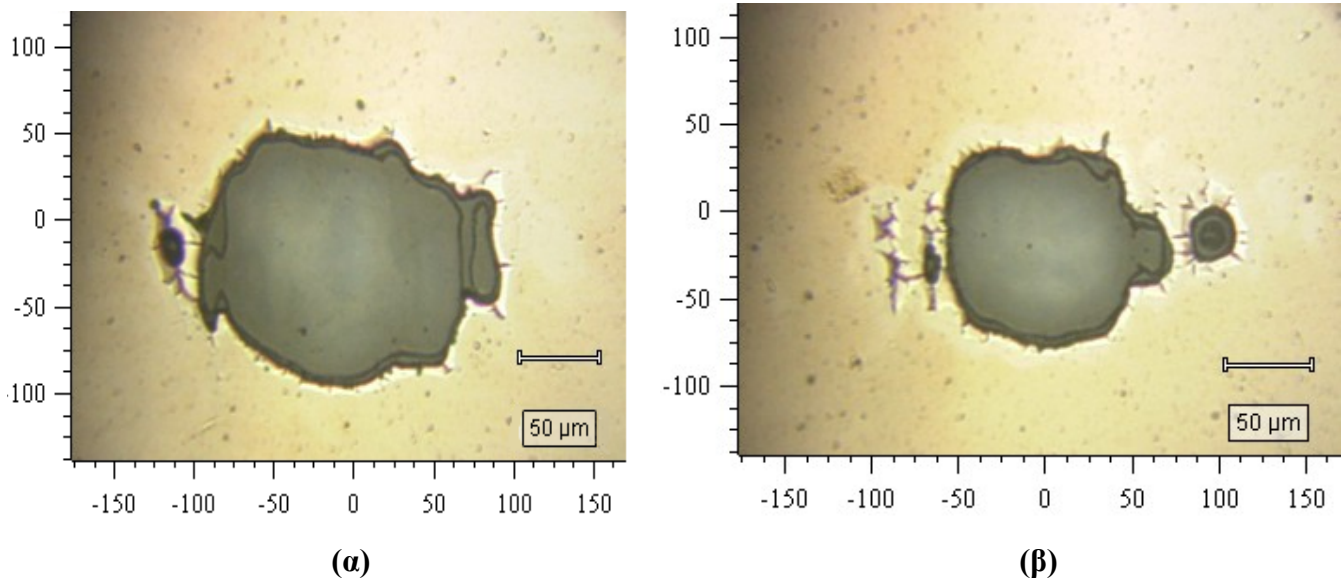
Τα παρακάτω Σχήματα 6.21.[α] και [β] εμφανίζουν, σε μικρότερη και μεγαλύτερη μεγέθυνση αντίστοιχα, τις περιοχές πάνω στο λεπτό υμένιο από Mo, από τις οποίες έχει αφαιρεθεί υλικό λόγω της αλληλεπίδρασής του με ακτινοβολία Laser ενέργειας 1 mJ, διερχόμενο μέσα από διάφραγμα μεγέθους 1.5 μm .



Σχήμα 6.21. Απεικονίσεις των ακτινοβοληθεισών περιοχών (spots) πάνω στο λεπτό υμένιο από Mo με nanosecond παλμούς Laser ενέργειας 1 mJ, για μέγεθος διαφράγματος 1.5 μm. [a] Και τα δύο spots που αποδομήθηκαν, [b] Το ένα από τα δύο προαναφερθέντα spots, σε μεγαλύτερη μεγέθυνση.

Μελετώντας το Σχήμα 6.21.[β] σε συνδυασμό με το 6.19.[β], το οποίο αναφέρεται σε ένταση 2 mJ για τη δέσμη Laser, παρατηρούμε ότι η περαιτέρω ελάττωση της έντασης της ακτινοβολίας οδηγεί σε μία επιφάνεια η οποία παρουσιάζει σαφώς μεγαλύτερη ομοιογένεια, τόσο από άποψη σχήματος (μεταξύ ορθογωνίου και κύκλου) όσο και από άποψη κατανομής του βαθμού φωτοαποδόμησης ανά χωρίο (λόγω του γεγονότος ότι το γκριζο χρώμα της κυρίως φωτοαποδομημένης επιφάνειας έχει μία απόχρωση που δε μεταβάλλεται σημαντικά, με μοναδική εξαίρεση ίσως τις περιοχές πιο κοντά στο κέντρο, οι οποίες εμφανίζονται στο μικροσκόπιο με ανοικτή απόχρωση λόγω της μεγαλύτερης έντασης Laser που προσπίπτει, πάντα σύμφωνα με την κατανομή Gauss που αυτή ακολουθεί). Επίσης, η ελάττωση της δέσμης Laser οδηγεί και σε περαιτέρω σμίκρυνση της απόληξης, υπό μορφή «αυτιού», που εμφανίζεται στο δεξί τμήμα του Σχήματος 6.21.[β]. Οι μικρές κηλίδες αριστερά και δεξιά (κυρίως) της μεγάλης επιφάνειας, είναι τμήματα που έχουν υποστεί και αυτά φωτοαποδόμηση, λόγω του γεγονότος ότι τμήμα της δέσμης Laser προσέπεσε σε εκείνες τις περιοχές, κατά πάσα πιθανότητα λόγω ατελούς ευθυγράμμισης και παραμόρφωσης της δέσμης Laser.

Στο παρακάτω Σχήμα 6.22. εμφανίζονται, σε σύγκριση, οι εικόνες του μικροσκοπίου από τις δύο περιπτώσεις φωτοαποδόμησης που αναφέρονται σε ενέργεια δέσμης Laser 1 mJ. Αριστερά λαμβάνεται η περίπτωση που αντιστοιχεί σε μέγεθος διαφράγματος 3 μm, και δεξιά αυτή που σχετίζεται με το ήμισυ του μεγέθους αυτού (δηλαδή 1.5 μm). Με αυτό τον τρόπο θα μπορούσαμε να εξαγάγουμε διάφορα συμπεράσματα σχετικά με το ρόλο που παίζει το μέγεθος διαφράγματος στην τελική μορφή της φωτοαποδομημένης επιφάνειας και στην ποιότητα της φωτοαποδόμησης.

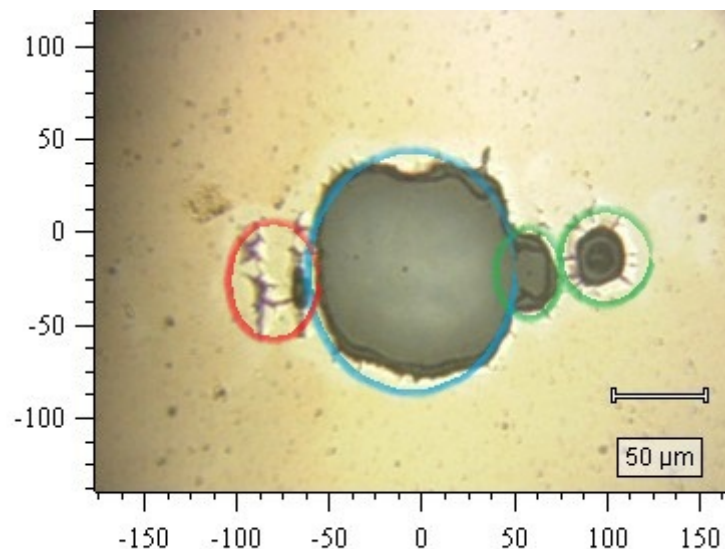


Σχήμα 6.22. Σύγκριση στη δομή και τη μορφολογία των επιφανειών που έχουν υποστεί φωτοαποδόμηση (αφαίρεση υλικού) λόγω της εφαρμογής Gauss δέσμης Laser έντασης 1 mJ, για διαφορετικές τιμές μεγέθους διαφράγματος: [α] 3 μm, [β] 1.5 μm.

Αρχικά, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η φωτοαποδομημένη επιφάνεια στην περίπτωση [β], που αντιστοιχεί σε μικρότερο διάφραγμα, είναι σημαντικά πιο ομοιόμορφη από άποψη σχήματος, χωρίς δηλαδή να εμφανίζει ιδιαίτερες προεξοχές που οδηγούν σε ένα ακανόνιστο σχήμα (σε αντίθεση με την περίπτωση [α]). Επίσης, το δεξί σχήμα περιλαμβάνει δύο προεκτάσεις – απολήξεις, μαζί με την κύρια επιφάνεια αυτού. Η μία απόληξη, σε μορφή «αυτιού», έχει ενωθεί με το κυρίως χωρίο, ενώ η δεύτερη είναι διαχωρισμένη από αυτό. Τα παραπάνω έρχονται σε αντίθεση με την περίπτωση του αριστερού σχήματος, το οποίο περιλαμβάνει μόνο μία απόληξη, πλήρως ενωμένη με τη βασική επιφάνεια. Ενδεχομένως κάποιες ατέλειες στην ευθυγράμμιση της δέσμης, καθώς έγινε η ακτινοβολία του υμενίου με το διάφραγμα να έχει οριστεί στο 1.5 μm, να έπαιξαν το ρόλο τους στη διαμόρφωση του τελικού σχήματος.

Η δεύτερη εμφανής διαπίστωση που γίνεται, συγκρίνοντας τις δύο παραπάνω περιπτώσεις, είναι ότι ελαττώνεται η έκταση της φωτοαποδομημένης περιοχής μαζί με το μέγεθος του διαφράγματος. Η ελάττωση αυτή δεν είναι ανάλογη της μείωσης του διαφράγματος, κάτι που σημαίνει ότι δε μειώνεται η οριζόντια και η κατακόρυφη διάσταση στο μισό. Όμως, μπορούμε να δούμε ότι η διαφορά στο λόγο διαστάσεων μεταξύ του αριστερού και του δεξιού Σχήματος δεν είναι ιδιαίτερα σημαντική. Μένει να επιβεβαιώσουμε την παραπάνω πρόταση μετρώντας τις διαστάσεις της δεξιάς επιφάνειας και υπολογίζοντας τις αναλογίες $\alpha:\beta$ για κάθε ένα από τα δύο Σχήματα.

Το πρώτο από τα δύο βήματα θα εκτελεστεί αφότου μεγεθύνουμε την εικόνα που αντιστοιχεί στο Σχήμα 6.22. σε έναν τέτοιο βαθμό ώστε να είναι πιο ακριβής η τελικώς εξαγόμενη μέτρηση. Η φωτοαποδομημένη περιοχή δεν είναι ενιαία, αλλά περιλαμβάνει, στο δεξί τμήμα, μία κυκλική κηλίδα που είναι αποκομμένη από την υπόλοιπη επιφάνεια. Η ύπαρξη της υπόψη κηλίδας θα χρησιμοποιηθεί μόνο για τον υπολογισμό του εμβαδού της επιφάνειας του αφαιρεθέντος υλικού. Όμως, θα αμεληθεί στην περίπτωση υπολογισμού των διαστάσεων α και β , χάριν απλοποίησης, λαμβάνοντας δηλαδή υπόψη, στο ακόλουθο Σχήμα 6.23.. μόνο την περιοχή που έχει σημειωθεί με γαλάζιο χρώμα, αλλά και την απόληξη που είναι ενωμένη με την υπόψη περιοχή, όσο και αν κάτι τέτοιο αποκλίνει κάπως από την πραγματικότητα. Στην ίδια θεώρηση παραδεχόμαστε ότι η περιοχή που έχει περικλειστεί στο κόκκινο πλαίσιο έχει ενσωματωθεί στην κυρίως επιφάνεια, επιφέροντας πολύ μικρή αύξηση στο εμβαδό της και συνεπώς αμελητέα για τους τρέχοντες υπολογισμούς μας. Όπως έχουμε επαναλάβει και σε προηγούμενες περιπτώσεις, η δημιουργία των δύο περιοχών που έχουν διαχωριστεί από την κυρίως επιφάνεια οφείλεται σε μεγάλο βαθμό στο Gaussian χαρακτήρα της δέσμης Laser κατά το επίπεδο XY, σε πιθανές ατέλειες στην ευθυγράμμιση της δέσμης και σε παραμόρφωση αυτής, ως άμεση συνέπεια.



Σχήμα 6.23. Διαχωρισμός της φωτοαποδομημένης περιοχής του Σχήματος 6.20. [β] σε χωρία, με το γαλάζιο να αποτελεί την κυρίως επιφάνεια, τα δύο πράσινα την απόληξη της επιφάνειας αυτής αλλά και μιας πρόσθετης ανεξάρτητης κηλίδας, και το κόκκινο ορισμένα άλλα τμήματα που προσεβλήθησαν από τη Gaussian δέσμη Laser.

Στην εστίαση (zoom) που έχουμε εφαρμόσει μέσα από το Microsoft Office Picture Manager, τα 50 μm της κλίμακας του μικροσκοπίου Raman αντιστοιχούν σε 2.35 cm του υποδεκάμετρου, δηλαδή το 1 cm αυτού αντικατοπτρίζει μήκος 21.277 μm πάνω στο δοκίμιο, όπως έχουμε δει και προηγουμένως. Με βάση τα όσα έχουν ειπωθεί παραπάνω, οι διαστάσεις α και β υπολογίζονται ακολούθως:

- $a = 21.277 \cdot 5.95 = 126.598 \mu m$
- $\beta = 21.277 \cdot 5.2 = 110.64 \mu m$

Η σύγκριση του λόγου διαστάσεων $a:\beta$ θα γίνει με αυτές που υπολογίστηκαν στα πλαίσια του Εδαφίου 6.7.3., που αναφέρεται σε ακτινοβοληθείσα επιφάνεια με ίδια ένταση Laser αλλά διαφορετικό μέγεθος διαφράγματος. Έχουμε λοιπόν ότι:

- Για μέγεθος διαφράγματος 3 μm : $R_{a\beta} = \frac{179.0712}{134.8848} = 1.3276$
- Για μέγεθος διαφράγματος 1.5 μm : $R_{a\beta} = \frac{126.598}{110.64} = 1.1442$

Αν πάντως θεωρήσουμε ότι η κυκλική κηλίδα, στο δεξί τμήμα του Σχήματος 6.21. έχει ενσωματωθεί στην κυρίως επιφάνεια, τότε η οριζόντια διάσταση της συνιστάμενης περιοχής προσανξάνεται κατά $21.28 \cdot 1.1 = 23.408 \mu m$ (προσεγγιστικά, κατόπιν μέτρησης του μήκους 1.1 cm με το υποδεκάμετρο), με αποτέλεσμα η ποσότητα a να γίνεται ίση με $126.598 + 23.408 = 150.006$, προσδίδοντας στο λόγο διαστάσεων την τιμή $R_{a\beta} = \frac{150.006}{110.64} = 1.3558$, η οποία διαφέρει ελάχιστα από την αντίστοιχη περίπτωση

του διπλάσιου μεγέθους διαφράγματος. Πιο συγκεκριμένα, η πρώτη θεώρηση μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η μείωση του διαφράγματος επιφέρει ελάττωση $\frac{1.3276 - 1.1442}{1.3276} \cdot 100\% = 13.81\%$ στη

φωτοαποδομημένη επιφάνεια, ενώ η δεύτερη δίνει αύξηση $\frac{1.3558 - 1.3276}{1.3276} \cdot 100\% = 2.12\%$, κάτι που

προφανώς αντικατοπτρίζει μη αξιόλογη μεταβολή.

Ο υπολογισμός του εμβαδού της φωτοαποδομημένης περιοχής θα γίνει με βάση την παραδοχή ότι η περιοχή που σημάνθηκε με κόκκινο χρώμα ενσωματώνεται στην κυρίως επιφάνεια, με αποτέλεσμα πρακτικά να προστίθενται τα εμβαδά της γαλάζιας και των δύο πράσινων περιοχών, με τη σχέση

$A = \frac{\pi\alpha\beta}{4}$ να χρησιμοποιείται για τη γαλάζια περιοχή και την $A = \frac{\pi d^2}{4} = \pi r^2$ για τις δύο πράσινες

(πρακτικά κυκλικές). Η ποσότητα a θα αλλάξει εδώ για τις ανάγκες των υπολογισμών μας, και θα ισούται με την οριζόντια διάσταση μόνο της γαλάζιας επιφάνειας. Με την εστίαση στο Picture Manager αμετάβλητη σε σχέση με πριν, αυτή η διάσταση μετράται ίση με 4.95 cm, άρα, θα αντικατοπτρίζει μήκος $4.95 \cdot 21.277 = 105.321 \mu m$ πάνω στο πραγματικό δοκίμιο.

Για τα δύο πράσινα χωρία, αυτό που αντιστοιχεί στην απόληξη – «αυτί», σε πλήρη σύνδεση με το γαλάζιο χωρίο, έχει διάμετρο $1 \cdot 21.277 = 21.277 \mu m$, ενώ το δεύτερο $1.1 \cdot 21.277 = 23.405 \mu m$. Τελικά,

έχοντας υπόψη μας τις παραπάνω επεξηγήσεις, το συνολικό εμβαδό της φωτοαποδομημένης επιφάνειας θα υπολογιστεί ως εξής:

$$A = \frac{\pi(105.321 \cdot 110.64 + 21.277^2 + 23.405^2)}{4} = 9937.8159 \mu\text{m}^2 = 9.93782 \cdot 10^{-5} \text{cm}^2 \quad (6.13)$$

Μέσω της παράθεσης των Σχέσεων (6.11) και (6.13) δίπλα-δίπλα, θα καταλάβουμε ότι η μείωση της φωτοαποδομημένης επιφάνειας λόγω της εφαρμογής Laser μικρότερης έντασης είναι ιδιαίτερα σημαντική, και σχεδόν ανάλογη της ελάττωσης αυτής (σημειώνεται ότι το εμβαδό που υπολογίστηκε από την (6.11) είναι ίσο με $2.17663 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$). Η ροή ακτινοβολίας Laser F θα λάβει την παρακάτω τιμή:

$$F = \frac{E_{LASER}}{A} = \frac{1 \cdot 10^{-3} [J]}{9.93782 \cdot 10^{-5} [cm^2]} = 10.062569 J/cm^2 \quad (6.14)$$

Η σύγκριση της τιμής αυτής με αυτή που υπολογίστηκε από τη Σχέση (6.8), δηλαδή την τιμή $5.27134 J/cm^2$, μας οδηγεί στη διαπίστωση ότι η μείωση του διαφράγματος στο μισό, διατηρώντας σταθερή την ένταση του Laser στο 1 mJ, επιφέρει έντονη αύξηση της ροής ακτινοβολίας, κατά $\frac{10.06257 - 5.27134}{5.27134} = 90.89\%$. Με άλλα λόγια, η ροή ακτινοβολίας σχεδόν διπλασιάζεται, λόγω

προφανώς της μείωσης της φωτοαποδομημένης επιφάνειας στο μισό. Η αύξηση αυτή κρίνεται ιδιαίτερα λογική, από τη στιγμή που η μείωση του διαφράγματος οδηγεί σε μεγαλύτερη συγκέντρωση της δέσμης Laser γύρω από την κεντρική της θέση (θέση μέγιστης έντασης), με αποτέλεσμα τα φαινόμενα εκτροπής της δέσμης να είναι περιορισμένα (εξαίρεση αποτελεί η κηλίδα που έχει διαχωριστεί από το κυρίως χωρίο). Ως αποτέλεσμα, ελαττώνεται η φωτοαποδομημένη επιφάνεια και αυξάνεται η ροή ακτινοβολίας.

Όπως συνέβη και με τα πέντε προηγούμενα Εδάφια, έτσι και εδώ δε θα πρέπει να παραλείψουμε την αναφορά μας στη θερμικά επηρεασμένη ζώνη (HAZ) που δημιουργείται μετά από το πέρας της κατεργασίας, δίνοντας εξέχουσα έμφαση στην έκταση της περιοχής αυτής έπειτα από τη διεξαγωγή του αντίστοιχου πειράματος. Μία πρώτη εικόνα μπορεί να ληφθεί από το Σχήμα 6.22.[β] και τη σύγκρισή του με το [α], για το διπλάσιο μέγεθος διαφράγματος. Στο [β] Σχήμα παρατηρούμε μία HAZ που απλώνεται ομοιόμορφα κατά τους X και Y άξονες, γύρω από το φωτοαποδομηθέν τμήμα. Επιπλέον, η περιοχή που παρουσιάζει απλά θερμοκρασιακή ανύψωση λόγω του Laser είναι ελαφρώς ελαττωμένη στο Σχήμα [β] από ότι στο [α], με την ελάττωση του διαφράγματος να προβάλλει ως ο κύριος αλλά ταυτόχρονα και περισσότερο αντιπροσωπευτικός λόγος για αυτή τη μείωση, αν όχι και τόσο μικρή. Είναι επίσης εύκολο να παρατηρηθεί ότι η αυξημένη ομοιομορφία που επιφέρει στην αποδομημένη περιοχή η ελάττωση του διαφράγματος από το οποίο διέρχεται η δέσμη, αφορά και τη HAZ.

Στη συνέχεια, θα υπολογίσουμε την αριθμητική τιμή του εμβαδού της HAZ, όπως κάναμε και σε παραπάνω Εδάφια. Ορίζουμε ως α' και β' αντίστοιχα, την οριζόντια και κατακόρυφη απόσταση μεταξύ των δύο άκρων πάνω στο Σχήμα 6.20.[β], από όπου αρχίζει να εμφανίζεται αποχρωματισμός, που παρατηρείται με λευκό χρώμα. Διατηρώντας την εστίαση (zoom) σταθερή μέσα από το Picture Manager, στην τιμή $2.35 \mu\text{m}$ ανά 1 cm του υποδεκάμετρου, υπολογίζουμε τα εξής:

- $\alpha' = 11.4 \cdot 21.277 = 242.5578 \mu\text{m}$
- $\beta' = 5.9 \cdot 21.277 = 125.5343 \mu\text{m}$

Το εμβαδό που περικλείεται από την περιοχή που περιλαμβάνει τόσο τη HAZ όσο και τη φωτοαποδομημένη επιφάνεια μπορεί να υπολογιστεί με τη βοήθεια της σχέσης

$$A' = \frac{\pi \alpha' \beta'}{4} = \frac{\pi \cdot 242.5578 \cdot 125.5343}{4} = 23914.8429 \mu\text{m}^2 = 2.39148 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2. \text{ Ως αποτέλεσμα, η έκταση}$$

της θερμικά επηρεασμένης ζώνης θα είναι απλά η διαφορά της προηγούμενης ποσότητας και του εμβαδού της φωτοαποδομημένης επιφάνειας ξεχωριστά, δηλαδή θα έχει αριθμητική τιμή ίση με

$$A' - A = (2.39148 - 0.99378) \cdot 10^{-4} = 1.3977 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2. \text{ Αν κάνουμε τη σύγκριση με τις αντίστοιχες τιμές}$$

που εξήχθησαν για τις περιπτώσεις ακτινοβολήσης με μεγαλύτερη ενέργεια Laser, θα δούμε ότι η φωτοαποδομημένη περιοχή *αυξάνεται* σε έκταση (σε σχέση με την περιοχή μεταξύ 1.1 – 1.15 cm² στην οποία κυμαίνονται οι εκτάσεις, όπως τις υπολογίσαμε στα Εδάφια 6.7.4. και 6.7.5.). Για παράδειγμα, το ποσοστό αύξησης της HAZ μεταξύ των περιπτώσεων ενέργειας 2 mJ και 1 mJ (που είναι η *τρέχουσα*) θα

$$\text{ισούται με } \frac{1.3977 - 1.11061}{1.11061} = 25.85\%. \text{ Εκ πρώτης όψεως, μπορούμε να πούμε ότι κάτι τέτοιο φαίνεται}$$

ιδιαίτερα παράδοξο, αλλά ενδεχομένως και να μην είναι, από τη στιγμή που η ελάττωση της έντασης του Laser προκαλεί μερική προσβολή των επιφανειών που, υπό συνθήκες μεγαλύτερης ενέργειας, θα υφίσταντο φωτοαποδόμηση. Με άλλα λόγια, χωρία που θα μπορούσαν να ανήκουν στη φωτοαποδομημένη περιοχή, εάν η ενέργεια του παλμού με το οποίο ακτινοβολήθηκε ήταν ίση με 2 ή 3 mJ, ανήκουν τώρα στη θερμικά επηρεασμένη ζώνη.

Επίσης, αύξηση της HAZ παρατηρείται και σε σύγκριση με την περίπτωση ακτινοβολήσης ενός spot του υμενίου από Mo με Laser ίδιας ενέργειας, το οποίο όμως έχει διέλθει μέσα από διάφραγμα διαμέτρου 3 μm. Η αύξηση αυτή, από την τιμή 1.23355 cm², υπολογίζεται ποσοστιαία σε

$$\frac{1.3977 - 1.23355}{1.23355} = 13.31\%. \text{ Ένας πιθανός λόγος για τον οποίο κάτι τέτοιο συμβαίνει ενδέχεται να κάνει}$$

με τη μορφή της δέσμης, τόσο από άποψη παραμόρφωσής της όσο και από άποψη μικρότερου διασκορπισμού και εντονότερης συγκέντρωσης της δέσμης Laser γύρω από την κεντρική θέση μέγιστης έντασης. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα, περιοχές που υπό άλλες συνθήκες θα είχαν φωτοαποδομηθεί σε

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

σημαντικό βαθμό σχηματίζοντας οπές, να μην έχουν επηρεαστεί ιδιαίτερα, παρά μόνο στη θερμοκρασία τους, ώστε τελικά να λογιστούν ως τμήματα της HAZ.

6.7.7. Συγκεντρωτική παράθεση πειραματικών μετρήσεων και αποτελεσμάτων, για όλα τα spots από Mo που έχουν ακτινοβοληθεί. Εξαγωγή συμπερασμάτων.

Στα πλαίσια του παρόντος Εδαφίου, θα δοθεί ιδιαίτερη προσοχή και έμφαση στον Πίνακα 6.1., ο οποίος παρουσιάζει συγκεντρωτικά όλες τις πειραματικές μετρήσεις που έχουν διεξαχθεί, έπειτα από την ακτινοβολή των δοκιμίων με δέσμες Laser χαρακτηριζόμενες από διαφορετικές εντάσεις, και με μεταβλητό μέγεθος διαφράγματος μεταξύ 1.5 και 3 μm . Ο βασικός σκοπός μιας τέτοιας ανάλυσης είναι να μπορούμε να έχουμε μία πληρέστερη εικόνα του πώς τα διάφορα μεγέθη επιδρούν στην έκταση της επιφάνειας φωτοαποδόμησης, στην ποιότητα του φαινομένου και στο πώς κατανέμεται ποιοτικά η θερμοκρασία γύρω από το σημείο όπου εφαρμόστηκε η ακτινοβολία. Σημειώνεται εδώ ότι οι ποσοτικές μετρήσεις μιας τέτοιας κατανομής απαιτούν τη χρήση ιδιαίτερα εξειδικευμένου εξοπλισμού και επιβάλλεται να γίνουν αμέσως μετά το πέρας της διαδικασίας φωτοαποδόμησης, καθώς σε διαφορετική περίπτωση τα αποτελέσματα θα έχουν επηρεαστεί από την ψύξη του υμενίου, λόγω της επαφής του με το περιβάλλον τυπικής θερμοκρασίας, συνήθως όχι μεγαλύτερης από 310 K (για τους καλοκαιρινούς μήνες).

A/A Spot	Ενέργεια Laser (mJ)	Μέγεθος διαφράγματος (μm)	Οριζόντια διάσταση (μm)	Κατακόρυφη διάσταση (μm)	Λόγος διαστάσεων, D:E	Εμβαδό φωτοαποδομημένης επιφάνειας (cm^2)	Ροή ακτινοβολίας Laser (J/cm^2)
1	3	3	271.084	153.318	1.7681	3.26428E-04	9.190388
2	2	3	186.1738	143.287	1.2993	2.09515E-04	9.545856
3	1	3	179.0712	134.8848	1.3276	1.89705E-04	5.271342
4	3	1.5	225.536	123.407	1.8276	2.18598E-04	13.723822
5	2	1.5	217.0254	127.662	1.7	2.17663E-04	9.188516
6	1	1.5	150.006	110.64	1.3558	9.93782E-05	10.06257

Πίνακας 6.1. Παράθεση και σύγκριση μετρήσεων και αποτελεσμάτων που προέκυψαν από την πειραματική διαδικασία ακτινοβολήσης έξι διαφορετικών spots πάνω σε ένα λεπτό υμένιο από Mo, για διαφορετικές τιμές έντασης Laser και μεγέθους διαφράγματος.

Η πρώτη παρατήρηση που μπορεί να γίνει, εξετάζοντας τα παραπάνω αριθμητικά αποτελέσματα, είναι το γεγονός ότι καθώς ελαττώνεται η ένταση της δέσμης, ελαττώνεται και η επιφάνεια που αποδομείται.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Κάτι τέτοιο φαντάζει εν γένει λογικό, επειδή όσο πιο έντονη είναι η ακτινοβολία που προσπίπτει σε μία επιφάνεια τόσο πιο έντονα προσβάλλεται αυτή από το Laser, επιφέροντας και τις ανάλογες συνέπειες. Η αυξημένη ένταση της ακτινοβολίας έχει ως επακόλουθο την ταχύτερη ανύψωση της θερμοκρασίας των σωματιδίων του Mo, με αποτέλεσμα η μετάβαση στην αέρια φάση και η συνακόλουθη απομάκρυνσή τους από την κύρια επιφάνεια του υμενίου να γίνεται ταχύτερα και με εντονότερο ρυθμό.

Από τη στιγμή που η προσπίπτουσα δέσμη είναι Gaussian κατά το επίπεδο XY, το Laser προσβάλλει, εκτός από την περιοχή όπου εφαρμόζεται η δέσμη, και μία σειρά από γειτονικές θέσεις. Κοντά στην κεντρική περιοχή, η προσβολή γίνεται από ακτίνες μεγαλύτερης ενέργειας, κάτι που, σε συνδυασμό με το πολύ μικρό πάχος του υμενίου, συγκριτικά με τις δύο άλλες διαστάσεις του (συγκεκριμένα, το πάχος μετρήθηκε ίσο με 250 nm), οδηγεί στην πλήρη φωτοαποδόμηση των υπόψη περιοχών, αφαιρώντας όλο το υλικό που αυτές περιλαμβάνουν. Βέβαια, σε περιοχές που βρίσκονται πιο μακριά, και οι οποίες ακτινοβολήθηκαν και αυτές με τη σειρά τους, η ένταση των προσπιπτουσών ακτινών δεν είναι τέτοια ώστε να επέλθει φωτοαποδόμηση, κάτι που οφείλεται στο Gaussian προφίλ της δέσμης. Παρά το γεγονός ότι τα συγκεκριμένα χωρία δεν αποδομούνται, η επίδραση του Laser είναι αρκετά σημαντική ώστε να οδηγήσει σε αύξηση της θερμοκρασίας, οδηγώντας με αυτό τον τρόπο στο σχηματισμό θερμικά επηρεασμένων ζωνών (HAZ). Η ανύψωση της θερμοκρασίας σε αυτές τις ζώνες, όπως συμβαίνει και σε διάφορα σημεία της φωτοαποδομημένης περιοχής, μπορεί εν μέρει να οφείλεται και στα φαινόμενα θερμικής διάχυσης που λαμβάνουν χώρα εντός του δοκιμίου, όσο και αν ο βαθμός αυτής της διάχυσης δεν είναι σημαντικός, επειδή η σχετικά μικρή διάρκεια παλμού (10 ns, χαρακτηριστική τιμή Laser *βραχέων* παλμών) οδηγεί σε ταχεία αύξηση της θερμοκρασίας.

Το διάφραγμα μέσα από το οποίο διέρχεται η δέσμη, καθορίζει εντέλει πόσο συγκεντρωμένη αυτή θα είναι, άρα και το πόσο θα διασκορπίζεται από το σημείο της επιφάνειας του υμενίου προς το οποίο επιδιώκουμε αυτή να κατευθυνθεί. Ο διασκορπισμός θα είναι μεγαλύτερος στην περίπτωση του διαφράγματος των 3 μm , κάτι που έχει ως συνέπεια να υφίστανται εντονότερη θέρμανση περιοχές γύρω από το κέντρο της τελικώς φωτοαποδομημένης επιφάνειας. Η συγκέντρωση των ακτίνων θα είναι μεγαλύτερη όταν μειωθεί το διάφραγμα στο μισό, πράγμα που σημαίνει ότι η πολύ έντονη θέρμανση θα περιορίζεται σε στενότερη έκταση.

Αυτό που συγκεντρώνει το πολύ έντονο ενδιαφέρον του μελετητή – αναγνώστη είναι το γεγονός ότι η μεταβολή του εμβαδού, και κατά συνέπεια της ροής ακτινοβολίας Laser (Laser Fluence), δεν είναι πάντοτε ανάλογη της έντασης του Laser και του μεγέθους του διαφράγματος. Υπάρχουν ορισμένες περιπτώσεις, εντός του Πίνακα 6.1., στις οποίες ικανοποιείται κάποια σχέση αναλογίας. Μία τέτοια παρατηρείται συγκρίνοντας τα αποτελέσματα από τα Spots με A/A 3 και 6, που αντιστοιχούν σε ακτινοβολία με Laser ενέργειας 1 mJ και μέγεθος διαφράγματος 1.5 μm . Συγκεκριμένα, το εμβαδό της

φωτοαποδομημένης επιφάνειας ελαττώνεται περίπου στο μισό όταν γίνεται η ίδια ελάττωση στο διάφραγμα, ενώ ταυτόχρονα η ποσότητα F (ροή ακτινοβολίας) διπλασιάζεται. Όμως, αν για παράδειγμα συγκρίνουμε μεταξύ τους τα αποτελέσματα από τα Spots 2 και 5, που ακτινοβολήθηκαν με παλμούς ενέργειας 2 mJ, θα δούμε ότι οι σχηματιζόμενες επιφάνειες έχουν παραπλήσια εμβαδά, με το F να λαμβάνει και αυτό πολύ κοντινές τιμές ανάμεσα στις δύο περιπτώσεις. Αρκετοί παράγοντες συμβάλλουν στη μη ικανοποίηση της αναλογίας μεταξύ μεγέθους διαφράγματος και εμβαδού φωτοαποδομημένης επιφάνειας, με τους πιθανότερους να παρατίθενται παρακάτω:

- Η μεταφορά θερμότητας διαμέσου του υμενίου, κυρίως μέσω αγωγής και συναγωγής, η οποία προκαλεί αύξηση της θερμοκρασίας σε τέτοιο βαθμό ώστε τα άτομα της προσβαλλόμενης περιοχής να περιέρχονται στην αέρια κατάσταση και, κατά συνέπεια, να απομακρύνονται από το υλικό.
- Η ατελής ευθυγράμμιση και παραμόρφωση της δέσμης Laser, που έχει ως αποτέλεσμα να μετατοπίζονται τμήματα του Gaussian προφίλ της δέσμης σε περιοχές πάνω στο επίπεδο XY που βρίσκονται πιο μακριά από το κεντρικό σημείο εφαρμογής του Laser.
- Πιθανές μορφολογικές ατέλειες πάνω στο υμένιο, καθώς επίσης και χωρία που παρουσιάζουν μικρότερο πάχος σε σχέση με άλλα (η τιμή του πάχους του υμενίου που μετρήθηκε, περί τα 280 nm, είναι πολύ πιθανό να μην είναι σταθερή σε όλο τον όγκο του υμενίου), με αποτέλεσμα η ανύψωση της θερμοκρασίας να είναι ταχύτερη και η φωτοαποδόμηση ευκολότερη.
- Ενδεχομένως να παίζουν ρόλο και ορισμένες παραδοχές στις μετρήσεις και τους υπολογισμούς που έχουν διεξαχθεί από την πλευρά μας. Πιο συγκεκριμένα, κάποιες από τις διαστάσεις των δοκιμίων (οριζόντιες και κατακόρυφες) έχουν μετρηθεί θεωρώντας ότι η οριζόντια διάσταση αρχίζει να μετράται από το μέσον της κατακόρυφης διάστασης της φωτοαποδομηθείσας επιφάνειας και αντίστροφα. Κάτι τέτοιο επηρεάζει και τους υπολογισμούς των εμβαδών, χωρίς να αγνοούμε επίσης και το γεγονός ότι ο βαθμός ομοιογένειας των περιοχών από τις οποίες αφαιρείται υλικό μεταβάλλεται σημαντικά ανάλογα με την περίπτωση, με αποτέλεσμα ο γενικός τύπος $A = \frac{\pi\alpha\beta}{4}$ που έχει χρησιμοποιηθεί καθολικά μέχρι στιγμής να μην είναι πάντα ικανοποιητικός και να μη μας δίνει τα επιθυμητά αποτελέσματα. Στην περίπτωση του 5^{ου} Spot, για παράδειγμα, κάτι τέτοιο επιβεβαιώνεται από το γεγονός ότι έχει σχηματιστεί μία γκρίζα κηλίδα λόγω φωτοαποδόμησης από τη – μάλλον παραμορφωμένη – δέσμη Laser, η οποία και έχει διαχωριστεί από τη μεγάλη κηλίδα που αντικατοπτρίζει την κυρίως φωτοαποδομημένη επιφάνεια.

Επίσης, παρατηρώντας τον Πίνακα 6.1. μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι τόσο η διάχυση θερμότητας όσο και η παραμόρφωση και ελλιπής ευθυγράμμιση της δέσμης οφείλεται για την ισότητα (στο περίπου)

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

των εμβαδών των επιφανειών που έχουν αποδομηθεί, μεταξύ των περιπτώσεων 4 και 5, παρά το γεγονός ότι η ενέργεια του Laser μεταξύ αυτών διαφέρει κατά 1 mJ. Κάτι τέτοιο μπορεί να εξηγήσει και τη μη αξιόλογη μεταβολή του εμβαδού και της ροής ακτινοβολίας, μεταπηδώντας από την περίπτωση 2 στην 5, όπου επιλέγουμε να μειώσουμε το διάφραγμα στη μισή τιμή, διατηρώντας την ενέργεια του Laser σε μία τιμή που είναι σταθερή και ίση με 2 mJ. Τέλος, μπορούμε, συγκρίνοντας τα αποτελέσματα που αναφέρονται στο 1° και το 4° Spot μεταξύ τους (ενέργεια 3 mJ, μεταβλητό διάφραγμα), μπορούμε να παρατηρήσουμε μείωση περίπου κατά το 1/3 και αύξηση κατά το ήμισυ σε εμβαδό και ροή ακτινοβολίας αντίστοιχα, καθώς μειώνεται το διάφραγμα στο μισό. Κάτι τέτοιο προφανώς και δεν υποδηλώνει ότι η μεταβολή αυτών των μεγεθών εξαρτάται αναλογικά από το μέγεθος του διαφράγματος, αλλά δείχνει, αν μη τι άλλο, μία σημαντική μείωση του εμβαδού καθώς το διάφραγμα ελαττώνεται.

Γενικά, οι συσχετισμοί μεταξύ των διαφόρων spots, όσον αφορά τα τελικά αποτελέσματα, δεν είναι συγκεκριμένοι, και λαμβάνουν υπόψη πολλές διαφορετικές συνθήκες αλλά και παραδοχές οι οποίες τα επηρεάζουν. Αυτό που μπορούμε να πούμε είναι ότι, όταν οι συνθήκες κάτω από τις οποίες δύο διαφορετικά spots ακτινοβολούνται είναι οι ίδιες ή παραπλήσιες, οι συγκρίσεις που γίνονται μαρτυρούν κάποια ικανοποιητική σχέση αναλογίας με την ενέργεια της δέσμης και το μέγεθος του διαφράγματος. Στη χειρότερη περίπτωση, ακόμα κι αν δηλαδή δεν ικανοποιούνται οι αναλογίες, μπορούμε να πούμε ότι, στις πιο πολλές συγκρίσεις, φαίνεται ότι η μονοτονία της ενέργειας της δέσμης (και του μεγέθους του διαφράγματος) είναι η ίδια με αυτή του εμβαδού και αντίθετη από αυτή της ροής ακτινοβολίας Laser (καθώς, στη σχέση υπολογισμού της, που αντιπροσωπεύει ένα λόγο, το μέγεθος της επιφάνειας που έχει φωτοαποδομηθεί βρίσκεται στον παρονομαστή).

Σε αυτό το σημείο, μπορούμε να εξαγάγουμε ορισμένα ιδιαιτέρως χρήσιμα συμπεράσματα αναφορικά με την ομοιογένεια των προκυπτουσών επιφανειών. Έχοντας παρατηρήσει όλες τις απεικονίσεις που έχουν ληφθεί από το μικροσκόπιο Raman, μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η ελάττωση της ενέργειας του Laser βελτιώνει την ποιότητα της φωτοαποδομημένης επιφάνειας, ενώ ελαττώνει και την έκταση της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ), καθώς οι περιοχές που βρίσκονται σε κάποια απόσταση από το κέντρο του σημείου εφαρμογής προσβάλλονται από ακτινοβολία σαφώς χαμηλότερης έντασης (λόγω του Gaussian προφίλ), η οποία, όπως είναι φυσικό, δεν επαρκεί για να προκαλέσει την πλήρη φωτοαποδόμηση του δοκιμίου. Επίσης, η ελάττωση του διαφράγματος αυξάνει την ομοιομορφία των επιφανειών που υφίστανται φωτοαποδόμηση, κάτι που μπορεί να δικαιολογηθεί από το στρογγύλευμα της περιφέρειας και την εξάλειψη των ακανόνιστων ακρών που εμφανίζονται κυρίως για μέγεθος διαφράγματος 3 μm και υψηλές τιμές της έντασης του Laser. Τέλος, το μέγεθος των απολήξεων που εμφανίζονται δεξιά και αριστερά από την κυρίως επιφάνεια, είτε χωριστά είτε σε άμεση ένωση (υπό μορφή «αυτιού»), δεν παρουσιάζει ιδιαίτερη εξάρτηση από την ένταση της δέσμης ή το διάφραγμα, αλλά

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

κυρίως οφείλεται σε πιθανές ατέλειες κατά τη διαδικασία ευθυγράμμισης της δέσμης στο εργαστήριο του ΕΙΕ, προκαλώντας παραμόρφωσή της σε μικρότερο ή μεγαλύτερο βαθμό. Τέτοιες ατέλειες είναι απολύτως φυσιολογικές σε μία τυπική πειραματική διαδικασία, και δεν είναι εύκολο να περιοριστούν ή να εξαλειφθούν ακόμα και όταν η υπόψη διαδικασία πραγματοποιείται από χειριστές με ιδιαίτερα υψηλό βαθμό εμπειρίας.

6.7.8. Συγκριτική παράθεση των εκτάσεων της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ) και των σχετικών διαφορών τους με τις φωτοαποδομημένες περιοχές

Στο παρόν Εδάφιο, θα παραθέσουμε το πώς έχει διαμορφωθεί το εμβαδό της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ) για κάθε ένα από τα spots που ακτινοβολήθηκαν πάνω στο λεπτό υμένιο από το Μο, καθώς επίσης και το λόγο της φωτοαποδομημένης περιοχής προς τη HAZ ανά περίπτωση. Η σημασία της παράθεσης αυτών των αποτελεσμάτων είναι ιδιαίτερα μεγάλη, καθώς μπορεί να μας δώσει το έναυσμα για να βελτιστοποιήσουμε, στο μέτρο του δυνατού, τη συγκεκριμένη διαδικασία. Τα αριθμητικά αποτελέσματα στα οποία θα βασιστούμε παρατίθενται στη συνέχεια, στον Πίνακα 6.3.:

A/A Spot	Ενέργεια Laser (mJ)	Μέγεθος διαφράγματος (μm)	Εμβαδό φωτοαποδομημένης επιφάνειας (cm ²)	Εμβαδό HAZ (cm ²)	Λόγος εμβαδών (Φ/A) προς HAZ
1	3	3	3.26428E-04	1.92931E-04	1.69194
2	2	3	2.09515E-04	1.45474E-04	1.44022
3	1	3	1.89705E-04	1.23355E-04	1.53788
4	3	1.5	2.18598E-04	1.11061E-04	1.96827
5	2	1.5	2.17663E-04	1.13920E-04	1.91067
6	1	1.5	9.93782E-05	1.39770E-04	0.71101

Πίνακας 6.2. Συγκεντρωτική παράθεση των εκτάσεων της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ) για κάθε ένα από τα ακτινοβοληθέντα Spots, καθώς επίσης και το λόγο εμβαδόν της φωτοαποδομημένης επιφάνειας προς τη HAZ.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Αυτό που μπορούμε καταρχήν να παρατηρήσουμε είναι ότι η έκταση της HAZ ελαττώνεται με την ενέργεια του Laser όταν το διάφραγμα έχει μέγεθος (διάμετρο) 3 μm , κάτι που κρίνεται φυσιολογικό από τη στιγμή που η θερμοκρασιακή ανύψωση και η διάχυση θερμότητας εντός του υλικού μειώνεται με την ενέργεια, η οποία ουσιαστικά αντικατοπτρίζει την ενέργεια των φωτονίων του Laser, τα οποία απορροφούνται από το υλικό. Η ενέργεια των φωτονίων, κατά την απορρόφησή της, μετατρέπεται σε θερμότητα, η οποία αυξάνει τη θερμοκρασία του υλικού τοπικά. Με βάση τις παραπάνω προτάσεις μπορούμε να δικαιολογήσουμε την ελάττωση της HAZ στις περιπτώσεις 1 έως 3, στις οποίες ο λόγος εμβαδών της φωτοαποδομημένης περιοχής προς τη HAZ ταλαντεύεται γύρω από την τιμή 1.5, χωρίς να ακολουθεί κάποια συγκεκριμένη συσχέτιση με την ενέργεια του Laser. Η μέγιστη ενέργεια των 3 mJ, σε συνδυασμό με το μεγάλο διάφραγμα που επιτρέπει το διασκορπισμό της δέσμης κατά το επίπεδο XY σε μεγάλο βαθμό (με δεδομένο το Gaussian προφίλ της δέσμης), είναι ένας ιδιαίτερα πιθανός λόγος για τον οποίο ο λόγος των δύο επιφανειών που αναφέρονται στον Πίνακα και το Εδάφιο γενικότερα είναι ο μέγιστος για το τρέχον διάφραγμα.

Οι περιπτώσεις 4 και 5 καταδεικνύουν ότι το ελαττωμένο διάφραγμα των 1.5 μm μειώνει σημαντικά την έκταση της HAZ, λόγω της αυξημένης συγκέντρωσης των φωτονίων του Laser γύρω από το σημείο εφαρμογής της δέσμης, κάτι που, ως επακόλουθο, ισχύει και για τα φωτόνια που απορροφούνται από το υλικό, για τα οποία το εύρος θέσεων πάνω στο επίπεδο XY είναι περιορισμένο, ασκώντας έτσι σημαντική επίδραση αρχικά στη φωτοαποδομημένη περιοχή (η οποία είναι αρκετά υψηλή λόγω και της σημαντικής ενέργειας που περικλείει η δέσμη Laser) και κυρίως στη HAZ, την οποία μειώνει σε τέτοιο βαθμό ώστε τελικά ο λόγος της φωτοαποδομημένης επιφάνειας προς τη HAZ να διαμορφώνεται λίγο πιο κάτω από την τιμή 2. Κάτι τέτοιο προφανώς δεν υφίσταται στην περίπτωση υπ' αριθμόν 6, όπως ο Πίνακας 6.2. καταδεικνύει. Πρόκειται για τη μοναδική περίπτωση στην οποία το εμβαδό της HAZ είναι μεγαλύτερο, και μάλιστα σε σημαντικό βαθμό, από την έκταση της φωτοαποδομημένης περιοχής. Η εξήγηση για το συγκεκριμένο φαινόμενο μπορεί να δοθεί ακολούθως: Καταρχήν, το γεγονός ότι η ένταση του Laser είναι 1 mJ, σε συνδυασμό με το Gaussian προφίλ της δέσμης, σημαίνει ότι το 1 mJ είναι η μέγιστη ένταση που μπορεί να υπάρξει στη δέσμη, και την οποία χαρακτηρίζει μία ακτίνα ή μία μικρή ομάδα ακτίνων που προσπίπτουν στη θέση που χαρακτηρίζεται από τις ίδιες X και Y συντεταγμένες με τη θέση εκπομπής, με δεδομένο ότι η κατεύθυνση της δέσμης είναι στον άξονα των Z. Καθώς προχωράμε πάνω στο επίπεδο XY, η ένταση ελαττώνεται, σε τέτοιο βαθμό ώστε να μη συντελείται πλέον φωτοαποδόμηση αλλά απλά ένας τυπικός θερμικός επηρεασμός. Στις περιοχές που τον υφίστανται, είτε λόγω πρόσπτωσης των ακτίνων είτε λόγω μεταφοράς θερμότητας, είναι εύκολο να παρατηρηθεί ότι η θερμοκρασία της επιφάνειας έχει ανέβει, αλλά το γεγονός ότι το πάχος του υμενίου παραμένει αμετάβλητο ή αλλάζει ελάχιστα, μας κάνει να σκεφτόμαστε ότι δεν έχει λάβει χώρα φωτοαποδόμηση. Ενδεχομένως να έχουν

τακεί (λιώσει) ορισμένα τμήματα του υμενίου από την αύξηση της θερμοκρασίας, αλλά, από τη στιγμή που δεν έχουν περιέλθει στην αέρια κατάσταση, δεν μπορούμε να αναφερόμαστε σε φωτοαποδόμηση.

Ο λόγος 0.77 της φωτοαποδομημένης περιοχής προς της HAZ, για την περίπτωση 6, είναι μία ισχυρή απόδειξη όλων όσων έχουν αναφερθεί παραπάνω, κάτι που σημαίνει ότι η χρήση Laser έντασης 1 mJ, με τη δέσμη να διέρχεται μέσα από το «μικρό» διάφραγμα διαμέτρου 1.5 μm , δε μας επιτρέπει να παραγάγουμε το βέλτιστο αποτέλεσμα όσον αφορά την τελική διαδικασία της φωτοαποδόμησης. Παρεμπιπτόντως, αναφερόμενοι στη βελτιστοποίηση της κατεργασίας, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι σκοπός μας είναι να πετύχουμε την υψηλότερη δυνατή περιοχή φωτοαποδόμησης, ελαχιστοποιώντας ταυτόχρονα την έκταση της HAZ. Άρα, κριτήριο βελτιστοποίησης μπορεί να θεωρηθεί είτε ο λόγος των δύο εμβαδών, είτε η παραπάνω ποσότητα σε συγκερασμό με το εμβαδό της φωτοαποδομημένης περιοχής από μόνο του. Στην πρώτη περίπτωση, οι συνθήκες ακτινοβολήσης 4 και 5 (με λόγο εμβαδών μεταξύ 1.9 και 2) ικανοποιούν την προϋπόθεση βελτιστοποίησης, ενώ στη δεύτερη περίπτωση, η συνθήκη 1, για την οποία ο λόγος εμβαδών είναι ιδιαίτερα υψηλός (1.69) αλλά και το εμβαδό της περιοχής φωτοαποδόμησης είναι μέγιστο, μπορεί να μας βοηθήσει να πετύχουμε το καλύτερο δυνατό αποτέλεσμα στην κατεργασία.

6.7.9. Υπολογισμός της Απόδοσης Φωτοαποδόμησης και εξαγωγή συμπερασμάτων μέσω αυτής

Ένα ιδιαίτερα σημαντικό μέγεθος, το οποίο μπορεί να μας δώσει μία καλή εικόνα για το πόσο αποτελεσματική είναι η διαδικασία της φωτοαποδόμησης με Laser ανάλογα με την περίπτωση, ονομάζεται *απόδοση φωτοαποδόμησης* (ablation efficiency) και, όπως τονίζεται στη βιβλιογραφία [E1], ορίζεται ως ο λόγος του όγκου που έχει φωτοαποδομηθεί προς την ενέργεια ενός παλμού Laser. Η τυπική μονάδα μέτρησης του συγκεκριμένου μεγέθους είναι τα nm^3/mJ , αλλά έχουν χρησιμοποιηθεί κατά περίπτωση και άλλες μονάδες, όπως τα $\mu\text{m}^3/\text{mJ}$.

Ο όγκος στον οποίο γίνεται αναφορά μπορεί να υπολογιστεί πολύ εύκολα, γνωρίζοντας ήδη το εμβαδό, καθώς αρκεί ο πολλαπλασιασμός του με το πάχος των 280 nm, με την παραδοχή (που είναι θεωρητικά αληθής) ότι η εφαρμογή του Laser προκαλεί πλήρη αποδόμηση έως την περιοχή μέγιστου βάθους. Από τη στιγμή που η φωτοαποδομημένη επιφάνεια προσομοιάζει σε κύκλο, μπορούμε να θεωρήσουμε, υπό μορφή μίας γενικά αποδεκτής παραδοχής, ότι ο όγκος της επιφάνειας αυτής είναι περίπου *κυλινδρικός*. Με αυτό τον τρόπο, ο απλός πολλαπλασιασμός του εμβαδού επί το πάχος μπορεί να μας δώσει ικανοποιητικά αποτελέσματα. Ακόμα και στην περίπτωση που το μέγεθος που έχει βρεθεί δεν αντικατοπτρίζει επακριβώς τον όγκο, μπορεί ωστόσο, ως απλό γινόμενο του εμβαδού της φωτοαποδομημένης επιφάνειας (που περιλαμβάνει τις διαστάσεις x και y) επί το πάχος (διάσταση z), να μας δώσει μία ικανοποιητική εικόνα για το πόσο αποδοτική είναι η φωτοαποδόμηση.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Με βάση τα παραπάνω, μπορούμε να καταστρώσουμε τον Πίνακα 6.3., στον οποίο θα εμφανίζονται πληροφορίες σχετικά με τη ροή ακτινοβολίας (ή πυκνότητα ενέργειας) Laser, εκφρασμένη ως ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας (J/cm^2), τον όγκο της φωτοαποδομημένης περιοχής και την απόδοση φωτοαπόδομησης, όπως αυτή έχει οριστεί παραπάνω, για όλα τα spots που έχουν ακτινοβοληθεί:

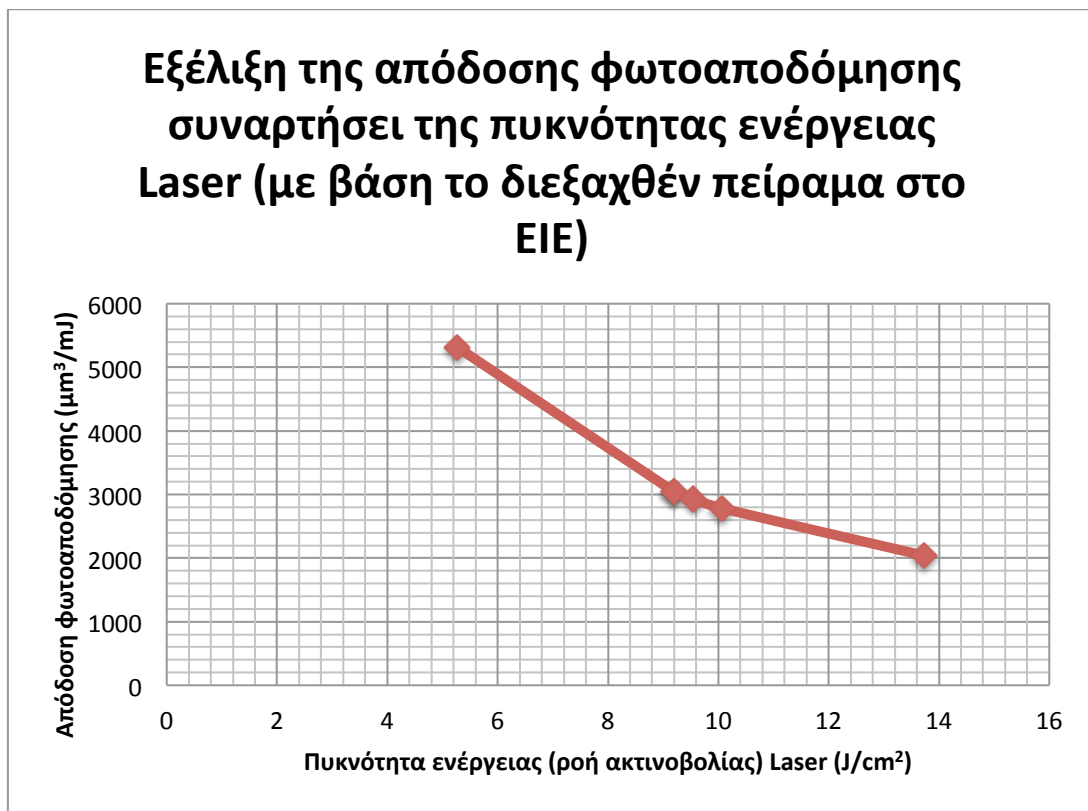
A/A Spot	Ένταση Laser (mJ)	Μέγεθος διαφράγματος (μm)	Εμβαδό φωτοαποδομημένης επιφάνειας (μm^2)	Ροή ακτινοβολίας Laser (J/cm^2)	Όγκος φωτοαποδομημένης επιφάνειας (μm^3)	Απόδοση φωτοαπόδομησης ($\mu m^3/mJ$)
1	3	3	32642.8	9.190388	9139.984	3046.661
2	2	3	20951.5	9.545856	5866.42	2933.210
3	1	3	18970.5	5.271342	5311.74	5311.740
4	3	1.5	21859.8	13.723822	6120.744	2040.248
5	2	1.5	21766.3	9.188516	6094.564	3047.282
6	1	1.5	9937.8	10.06257	2782.584	2782.584

Πίνακας 6.3. Παράθεση και σύγκριση των αποδόσεων φωτοαπόδομησης που προέκυψαν από υπολογισμούς βασισμένους σε μετρήσεις που εξήχθησαν από την πειραματική διαδικασία ακτινοβολήσης έξι διαφορετικών spots πάνω σε ένα λεπτό υμένιο από Mo, για διαφορετικές τιμές έντασης Laser και μεγέθους διαφράγματος.

Για την ανάλυση που θα ακολουθήσει, θα μας είναι χρήσιμα στοιχεία, πέραν του παραπάνω Πίνακα, τόσο ο Πίνακας 6.4. όσο και το Σχήμα 6.24., που αναπαριστούν, αριθμητικά και γραφικά αντίστοιχα, την εξέλιξη της απόδοσης φωτοαπόδομησης καθώς αυξάνεται η πυκνότητα ενέργειας (ροή ακτινοβολίας) της δέσμης Laser:

Ροή ακτινοβολίας Laser (J/cm^2)	Απόδοση φωτοαπόδομησης ($\mu m^3/mJ$)
5.271342	5311.74
9.188516	3047.28
9.190388	3046.66
9.545856	2933.21
10.06257	2782.58
13.723822	2040.25

Πίνακας 6.4. Εξέλιξη της απόδοσης φωτοαποδόμησης καθώς αυξάνεται η ροή ακτινοβολίας.



Σχήμα 6.24. Μεταβολή της απόδοσης φωτοαποδόμησης καθώς αυξάνεται η πυκνότητα ενέργειας Laser.

Παρατηρώντας αρχικά το Σχήμα 6.22., αλλά πολύ περισσότερο τον Πίνακα που βρίσκεται ακριβώς από πάνω, μπορούμε να διαπιστώσουμε αρχικά ότι όσο αυξάνεται η ροή ακτινοβολίας ελαττώνεται η απόδοση της φωτοαποδόμησης. Μάλιστα, εάν δώσουμε επιπλέον προσοχή στα αριθμητικά αποτελέσματα, και πολλαπλασιάσουμε την πυκνότητα ενέργειας με την αντίστοιχη απόδοση, σε κάθε μία από τις έξι εξεταζόμενες περιπτώσεις, μπορούμε να οδηγηθούμε στο πολύ σημαντικό συμπέρασμα ότι τα δύο μεγέθη που αντιπαρατίθενται είναι *αντιστρόφως ανάλογα*, με αποτέλεσμα να μπορεί η εξέλιξη των

διαφόρων τιμών να αναπαρασταθεί με μία *υπερβολή* της μορφής $y = \frac{a}{x}$, όπου x τα δεδομένα στον

οριζόντιο άξονα, y αυτά που βρίσκονται στον κατακόρυφο και a θετική πραγματική σταθερά. Μπορούμε επομένως να παρατηρήσουμε ότι, για την ελάχιστη τιμή ροής ακτινοβολίας από αυτές που έχουν υπολογιστεί κατά τη διάρκεια του πειράματος, η απόδοση του φαινομένου της φωτοαποδόμησης είναι μέγιστη, και ελαττώνεται εκθετικά όσο προχωράμε προς τα δεξιά του διαγράμματος. Με την απόδοση για τιμές πυκνότητας ενέργειας άνω των 10 J/cm² να διαμορφώνεται σε τιμές κατώτερες των 3000 μm³/mJ, μπορούμε να κρίνουμε ότι η διεργασία δεν είναι πλέον αποδοτική.

Το γεγονός ότι η απόδοση της διεργασίας μειώνεται σε τέτοιο βαθμό όταν η ροή ακτινοβολίας φτάσει σε υψηλά επίπεδα, μπορεί να εξηγηθεί πειραματικά λαμβάνοντας υπόψη τέσσερις παράγοντες, τους οποίους αναφέρει ο *Γρηγορόπουλος*, καθηγητής του Πανεπιστημίου Berkeley στις Ηνωμένες Πολιτείες, στη βιβλιογραφία [166], και οι οποίοι επιβεβαιώνονται και στην παρούσα περίπτωση:

- Καθώς η ισχύς του Laser αυξάνεται, αρχίζουν να εμφανίζονται κρουστικά κύματα.
- Τα δημιουργούμενα κρουστικά κύματα είναι υπεύθυνα για τη δημιουργία υψηλών πιέσεων, κάτι που έχει ως άμεση συνέπεια την ελάττωση του όγκου του υλικού.
- Ο ιονισμός διαφόρων ατόμων ή μορίων κατά τη διάρκεια της αλληλεπίδρασης ακτινοβολίας – ύλης οδηγεί στη δημιουργία ενός *νέφους πλάσματος*, το οποίο προκαλεί εξασθένηση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας καθώς διέρχεται, στην εξέλιξη του παλμού (ή και σε επόμενους παλμούς, αν γίνεται ακτινοβολήση τεμαχίων με μεγαλύτερο πάχος από αυτό που μπορεί να αποδομηθεί με έναν παλμό), μέσα από το πλάσμα. Αυτό αποτελείται από ιόντα και ελεύθερα ηλεκτρόνια, όπως γνωρίζουμε από τη βασική θεωρία σχετικά με τις καταστάσεις τις ύλης.
- Ενδεχόμενη αποκόλληση πλάσματος συντελεί στην ελάττωση του συντελεστή απορρόφησης του υλικού του υμενίου.

6.7.10. Μετρήσεις βάθους φωτοαποδόμησης και τραχύτητας επιφάνειας

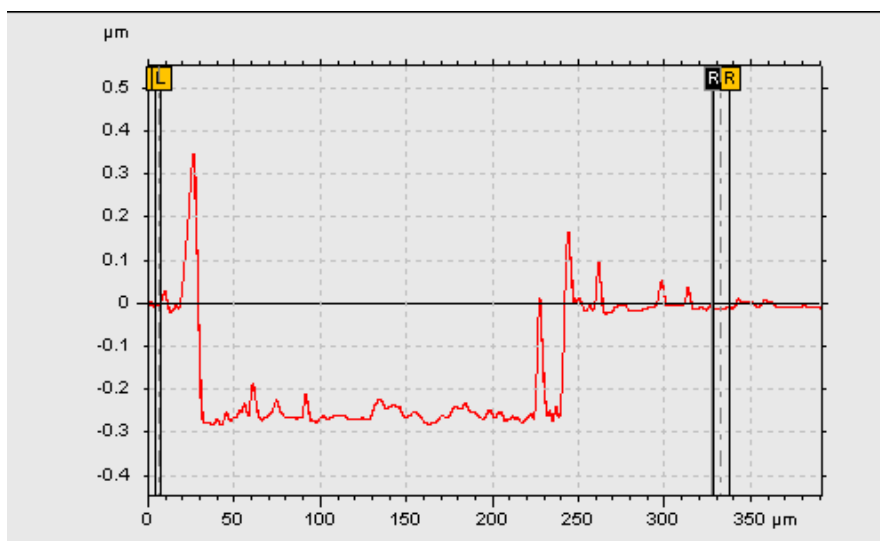
Το προφιλόμετρο *Alpha-Step IQ* της εταιρείας *KLA-Tencor*, για το οποίο έγινε λόγος νωρίτερα στο παρόν κεφάλαιο, χρησιμοποιήθηκε για να μας βοηθήσει να μετρήσουμε τις τιμές για δύο σημαντικά μεγέθη τα οποία θα πρέπει να ληφθούν υπόψη έπειτα από την ολοκλήρωση της κατεργασίας. Το ένα εξ αυτών είναι το *βάθος φωτοαποδόμησης*, δηλαδή το βάθος (κατά τον άξονα *Z*) στο οποίο έχει λάβει χώρα αφαίρεση υλικού. Το άλλο είναι η *τραχύτητα* της ακτινοβολημένης επιφάνειας, που έχει να κάνει με τις γεωμετρικές αποκλίσεις της επιφάνειας από την κατάσταση πλήρους επιπεδότητας [Πηγή: http://meklab.teipir.gr/files/TRB/Notes/CH1_Roughness_N.pdf]. Για το συγκεκριμένο μέγεθος, θα εξαχθούν συμπεράσματα υπολογίζοντας, σε προσεγγιστικό βαθμό, το μέγεθος της μέγιστης τραχύτητας, R_t . Το μέγεθος αυτό αντικατοπτρίζει τη μέγιστη απόκλιση από την επιπεδότητα και η οποία, στο σχήμα που δίνει το προφιλόμετρο, υπολογίζεται ως η μέγιστη κατακόρυφη απόσταση της πιο υψηλής κορυφής από τη βαθύτερη κοιλιά.

Μπορούμε να αναφέρουμε εδώ ότι, ένα άλλο μέγεθος το οποίο θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί στην ανάλυσή μας, και το οποίο ενδέχεται να μας απασχολήσει σε μελλοντικές μελέτες, είναι η *μέση τραχύτητα* R_a . Παριστάνει τη μέση τιμή των αποκλίσεων όλων των σημείων πάνω στο προφίλ της επιφάνειας, για το ορισθέν μήκος δειγματοληψίας, και μπορεί να υπολογιστεί ως ο λόγος όλων των εμβαδών των επιμέρους

χωρίων που περικλείονται από τη γραμμή / καμπύλη του προφίλ της ταχύτητας και την – παράλληλη στον οριζόντιο άξονα – κεντρική γραμμή. Σημειώνεται ότι με τον όρο *κεντρική γραμμή* αναφερόμαστε σε μία γραμμή αναφοράς η οποία έχει οριστεί πάνω στο προφίλ της επιφάνειας όχι αυθαίρετα, αλλά κατά τέτοιο τρόπο ώστε το εμβαδό της επιφάνειας που σχηματίζεται πάνω από τη γραμμή να είναι το ίδιο με αυτό που βρίσκεται από κάτω. Ο προσδιορισμός της κεντρικής γραμμής δεν είναι ιδιαίτερα εύκολος, ενώ και τα εμβαδά των επιμέρους επιφανειών δε χαρακτηρίζονται, σε πολλές περιπτώσεις, από κάποια συμβατική γεωμετρική σχέση, με σκοπό τον εύκολο υπολογισμό του υπόψη μεγέθους τραχύτητας.

Σημειώνεται εδώ ότι οι φωτοαποδομημένες περιοχές πάνω στις οποίες έχει εστιάσει το προφιλόμετρο (ή *πάρα πολύ κοντά*, για να είμαστε πιο ακριβείς, με δεδομένο ότι η ακίδα του προφιλόμετρο δεν τοποθετείται ακριβώς πάνω στη φωτοαποδομημένη περιοχή) αφορούν ακτινοβολήση με δέσμες Laser που έχουν διέλθει μέσα από διάφραγμα διαμέτρου 1.5 μm . Κατά συνέπεια, στο παρόν εδάφιο θα παρατεθούν *τρεις* (3) διαφορετικές εικόνες από το προφιλόμετρο. Σε κάθε μία από αυτές, θα δοθεί έμφαση στην κόκκινη καμπύλη που αφορά το προφίλ της τραχύτητας, η οποία έχει τοποθετηθεί σε ένα δισδιάστατο καρτεσιανό σύστημα αξόνων. Στον οριζόντιο άξονα παριστάνεται το μήκος πάνω στο δοκίμιο και στον κατακόρυφο η τραχύτητα. Είναι ζωτικής σημασίας να αναφερθεί εδώ ότι η (κατακόρυφη) απόσταση της βαθύτερης κοιλίας από την κεντρική γραμμή αντικατοπτρίζει το (μέγιστο) *βάθος φωτοαποδόμησης*, το οποίο μας αφορά επί του παρόντος.

Αρχίζουμε την ανάλυσή μας από το πρώτο Spot που ακτινοβολήθηκε με δέσμη Laser (μέγιστης έντασης 3 mJ (μέσα από το οποίο διέρχεται η δέσμη)). Η εικόνα που ελήφθη από το προφιλόμετρο, εστιάζοντας σε αυτό το Spot, παρατίθεται στο παρακάτω Σχήμα 6.25.:



Σχήμα 6.25. Εικόνα που ελήφθη από το προφιλόμετρο Alpha-Step IQ, για το Spot από Mo που ακτινοβολήθηκε με δέσμη Laser έντασης 3 mJ.

Το παραπάνω Σχήμα αρχικά επιβεβαιώνει το γεγονός ότι η ακτινοβολή με Laser 3 mJ δίνει το μέγιστο δυνατό μήκος της επιφάνειας από την οποία αφαιρείται πλήρως υλικό κατά τον άξονα των Z, κάτι που φαίνεται από τη μέτρηση των δύο άκρων της περιοχής για τα οποία η τραχύτητα ταλαντεύεται λίγο πάνω από τα -0.3 μm. Το Σχήμα δείχνει ότι η περιοχή για την οποία γίνεται λόγος έχει μήκος 200 μm περίπου. Δε λαμβάνεται υπόψη η μεγάλη αυξομείωση της κλίσης της καμπύλης, στην περιοχή μήκους 220-240 μm. Εάν ληφθεί υπόψη, τότε το μήκος στο οποίο αναφερόμαστε ανέρχεται στα 220 μm περίπου, επιβεβαιώνοντας πλήρως τα αποτελέσματα για την οριζόντια διάσταση της φωτοαποδομημένης περιοχής, όπως μετρήθηκε στο Εδάφιο 6.7.4. έστω και με μία πολύ μικρή αριθμητική απόκλιση της τάξης των 5 μm, η οποία οφείλεται σε πιθανά σφάλματα κατά τη μέτρηση με το υποδεκάμετρο.

Εάν παρατηρήσουμε προσεκτικά το παραπάνω Σχήμα, θα δούμε ότι η πιο βαθιά κοιλία που εμφανίζεται χαρακτηρίζεται από βάθος 280 μm, το οποίο συμπίπτει με το πάχος του υμενίου. Ως συμπέρασμα μπορούμε να πούμε αρχικά ότι ο ένας nanosecond παλμός Laser είναι αρκετός ώστε να επιφέρει την πλήρη φωτοαποδόμηση του δοκιμίου, έστω και κατά τόπους. Το «κατά τόπους» δικαιολογείται από το γεγονός ότι το βάθος φωτοαποδόμησης δεν είναι ενιαίο, αλλά υφίσταται ορισμένες μικρές αυξομειώσεις, κάτι που μπορεί να αποτελεί ένδειξη ενός εκ των παρακάτω:

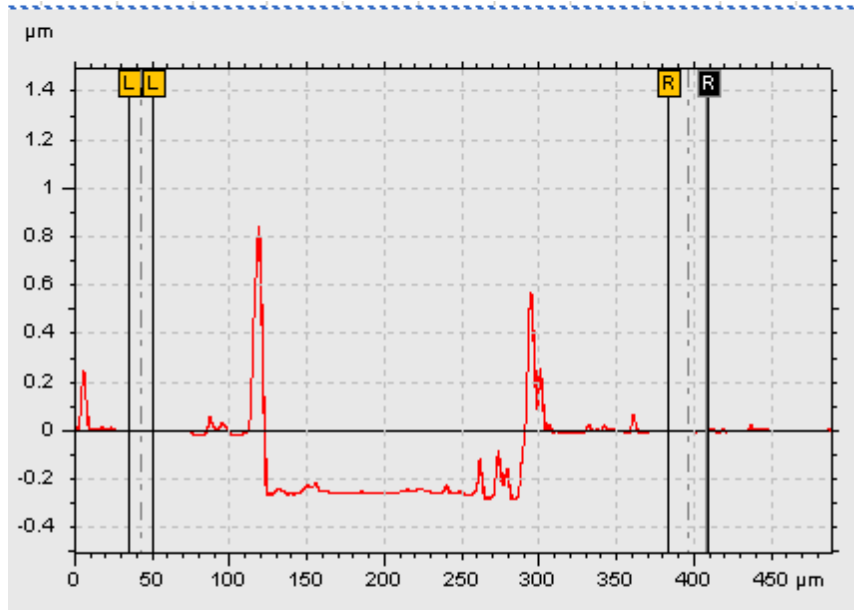
- Η φωτοαποδόμηση της επιφάνειας δεν έχει συντελεστεί πλήρως (ενδεχομένως να είναι μερική κατά περίπτωση, όπως π.χ. στην οριζόντια θέση των 70 μm, όπου το τοπικό βάθος φωτοαποδόμησης είναι ελάχιστα μεγαλύτερο από 200 μm).
- Υπάρχει περίπτωση να έχει φωτοαποδομηθεί πλήρως η επιφάνεια αλλά παρ'όλα αυτά να μην είναι σταθερή η ένδειξη του βάθους επειδή το πάχος του υμενίου δεν είναι ομοιόμορφο και παρουσιάζει αποκλίσεις κατά τόπους. Άλλωστε, η τιμή 280 nm για το πάχος του υμενίου μετρήθηκε τοπικά στο ΕΙΕ, και όχι σε περισσότερα από ένα σημεία, τόσο για να ελεγχθεί ο βαθμός ομοιομορφίας του πάχους όσο και για να υπολογιστεί κάποια μέση τιμή μετρώντας περισσότερα από ένα σημεία.

Η μέγιστη τραχύτητα R_z , αναφέρεται πάνω στην εικόνα του προφιλόμετρου με την ονομασία TIR. Η ένδειξη

TIR	0.63092 μm
-----	------------

 δηλώνει ότι $R_z = 0.63092 \mu\text{m} = 630.92 \text{nm}$, πράγμα που μας απαλλάσσει από επιπλέον υπολογισμούς, καθώς το προφιλόμετρο τους διεξάγει για εμάς. Πάντως η υψηλότερη κορυφή του προφίλ βρίσκεται περίπου 350 nm υψηλότερα από τη νοητή / μηδενική (όχι απαραίτητα κεντρική) γραμμή που έχει οριστεί από το πρόγραμμα απεικόνισης, κάτι που μπορεί να αποτελέσει ένα ακόμα δείγμα σχετικά με το πόσο υψηλή είναι η τραχύτητα. Κάτι τέτοιο μπορεί να μας χρησιμεύσει σε τυχόν αριθμητικές συγκρίσεις που θα επιθυμήσουμε να διεξαγάγουμε στη συνέχεια.

Στο ακόλουθο Σχήμα 6.26. μπορούμε να παρατηρήσουμε την εικόνα του προφίλ της τραχύτητας για το Spot που ακτινοβολήθηκε με Laser ενέργειας 2 mJ:



Σχήμα 6.26. Εικόνα που ελήφθη από το προφιλόμετρο Alpha-Step IQ, για το Spot από Mo που ακτινοβολήθηκε με δέσμη Laser έντασης 2 mJ.

Από το παραπάνω Σχήμα, μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι οι περιοχές που έχουν υποστεί φωτοαποδόμηση, έστω και σε μικρό βαθμό, είναι αυτές για τις οποίες η τιμή της τραχύτητας επιφάνειας είναι αρνητική. Βάσει της θεώρησης αυτής, η περιοχή φωτοαποδόμησης έχει μήκος περίπου ίσο με $(290-125)=165\mu m$, κάτι που όμως δεν έρχεται σε πλήρη συμφωνία με την τιμή $217.0254\mu m$ που έχουμε βρει από τον Πίνακα 6.1.. Είναι πιθανό κάτι τέτοιο να οφείλεται στο γεγονός ότι ελήφθησαν υπόψη, στις μετρήσεις που έχουμε κάνει για τον υπολογισμό της οριζόντιας διάστασης της ακτινοβολημένης περιοχής, οι μικρές κηλίδες που έχουν δημιουργηθεί είτε από ελλιπή ευθυγράμμιση της δέσμης είτε από την εκτόπιση αποβεβλημένου ή τηγμένου υλικού, ή οι πιθανές απολήξεις («αυτιά») που σχηματίζονται στα άκρα της αποδομημένης επιφάνειας (το Σχήμα 6.18.[β] επιβεβαιώνει τα λεγόμενά μας). Ο βασικός μας σκοπός και εδώ, όπως έγινε και με το προηγούμενο Σχήμα, είναι να διαπιστώσουμε σε τι βάθος λαμβάνει χώρα η φωτοαποδόμηση του υλικού. Αναμένουμε, από τη στιγμή που το ακτινοβολούμενο χωρίο ανήκει σε λεπτό υμένιο, το μολυβδαίνιο είναι ιδιαίτερα απορροφητικό υλικό (με συντελεστή απορρόφησης 0.5714, κάτι που σημαίνει ότι απορροφά το 57.14% των προσπιπτόντων φωτονίων από τη δέσμη Laser) και οι θερμοκρασίες τήξης και εξάτμισής τους μπορούν να επιτευχθούν εύκολα, με δεδομένη τη σχετικά υψηλή θερμική αγωγιμότητά του ($142\frac{W}{mK}$ στους 293 K), ότι το βάθος φωτοαποδόμησης θα είναι σχεδόν ίσο με το πάχος του υμενίου. Κάτι τέτοιο επιβεβαιώνεται και εδώ, καθώς το Σχήμα μπορεί να μας βοηθήσει να διαπιστώσουμε ότι όντως το βάθος φωτοαποδόμησης ανέρχεται στα 280 nm , όσο είναι και το πάχος του υμενίου. Άρα, και στην περίπτωση ακτινοβολήσης με

παλμούς ενέργειας 2 mJ, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η υπόψη ενέργεια, σε συνδυασμό με το πολύ μικρό πάχος συγκριτικά με τις άλλες δύο διαστάσεις του υμενίου, είναι αρκετή ώστε να προκαλέσει πλήρη αφαίρεση υλικού (εκτός από περιοχές πολύ μικρής έκτασης, π.χ. μεταξύ των οριζόντιων θέσεων 260 έως 295 μm) με ένα μόνο nanosecond παλμό.

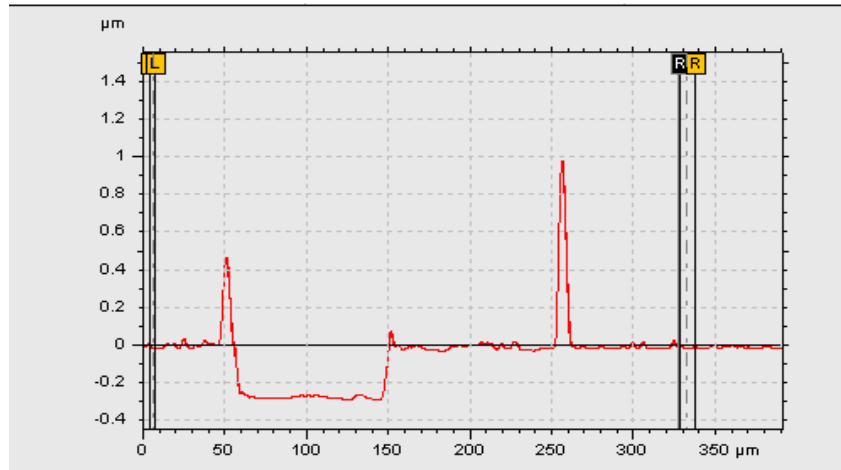
Όσον αφορά τη μέγιστη τραχύτητα, η ένδειξη

TIR	1.1229 μm
-----	-----------

, ή ακόμα και η «χειροκίνητη» μέτρηση της κατακόρυφης απόστασης μεταξύ της υψηλότερης κορυφής και της βαθύτερης κοιλάδας πάνω στο προφίλ τραχύτητας, μπορεί να μας οδηγήσει στη διαπίστωση ότι $R_t = 1.1229 \mu\text{m}$, που είναι μία τιμή αρκετά μεγαλύτερη ή σχεδόν διπλάσια αυτής που υπολογίστηκε για το Spot που ακτινοβολήθηκε με έναν παλμό Laser ενέργειας 3 mJ. Η υψηλότερη κορυφή του προφίλ χαρακτηρίζεται από θετική τεταγμένη 0.81 μm περίπου, με την αντίστοιχη τιμή από το Σχήμα 6.23. να είναι κάτι λιγότερο από τη μισή. Και αυτό αποτελεί δείγμα του γεγονότος ότι η σχηματιζόμενη επιφάνεια παρουσιάζει τοπικά αυξημένη τραχύτητα. Η λέξη-κλειδί στην προηγούμενη πρόταση είναι «τοπικά», από την άποψη ότι η οριζόντια έκταση στην οποία αντιστοιχεί αυτή η ιδιαίτερα αυξημένη τιμή της τραχύτητας (και η οποία εμφανίζεται υπό μορφή ενός «λόφου») είναι περιορισμένη συγκριτικά με την αντίστοιχη έκταση του «λόφου» γύρω από την κορυφή των 350 nm, στο Σχήμα 6.23..

Είναι τέλος σημαντικό να αναφέρουμε ότι, όπως φαίνεται στο παραπάνω Σχήμα 6.24., το βάθος φωτοαποδόμησης παρουσιάζει μία σχετικά σταθερή τιμή χωρίς πολλές διαβαθμίσεις, σε αντίθεση με την περίπτωση ακτινοβολήσης με Laser ενέργειας 3 mJ. Πράγματι, όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.23., το βάθος φωτοαποδόμησης παρουσιάζει αυξομειώσεις σε όλη την έκταση της ακτινοβοληθείσας επιφάνειας, κάτι που αποτελεί δείγμα ότι η μεγάλη ενέργεια Laser επιδρά αρνητικά στην ομοιομορφία της προκύπτουσας επιφάνειας. Αντίθετα, όταν η ακτινοβολήση γίνεται με ασθενέστερους παλμούς, η αποδόμηση της επιφάνειας είναι περισσότερο ομοιόμορφη και, κατά συνέπεια, η ποιότητα της κατεργασίας βελτιώνεται.

Η ανάλυσή μας ολοκληρώνεται εξετάζοντας το Spot που ακτινοβολήθηκε με παλμό Laser ενέργειας 1 mJ, της μικρότερης από τις τρεις που εξετάστηκαν στην παρούσα ανάλυσή μας. Το Σχήμα 6.27. θα μας βοηθήσει να εξαγάγουμε μία σειρά από χρήσιμα συμπεράσματα:



Σχήμα 6.27. Εικόνα που ελήφθη από το προφιλόμετρο Alpha-Step IQ, για το Spot από Mo που ακτινοβολήθηκε με δέσμη Laser έντασης 1 mJ.

Καταρχήν, είναι εμφανές ότι το βάθος φωτοαποδόμησης παρουσιάζει μία τιμή που υφίσταται ελάχιστες αυξομειώσεις και παραμένει σχετικά σταθερή. Είναι δικαιολογημένη αυτή η παρατήρηση, εάν λάβουμε υπόψη τη μορφή της φωτοαποδομημένης επιφάνειας, όπως αυτή απεικονίζεται στο Σχήμα 6.22.[β] ή στο Σχήμα 6.23.. Συγκεκριμένα, φαίνεται, από την απόχρωση και τις διαβαθμίσεις του χρώματος της επιφάνειας, ότι έχει επιτευχθεί ιδιαίτερα υψηλή ομοιομορφία στην αποδόμηση, κάτι που επιβεβαιώνεται και από το Σχήμα 6.27., εστιάζοντας πάντα στην περιοχή που χαρακτηρίζεται από αρνητική τεταγμένη (y).

Η κηλίδα που εμφανίζεται στη δεξιά πλευρά καθενός από τα δύο προαναφερθέντα Σχήματα, ή τα μικρά χωρία γκριζου χρώματος που βρίσκονται αριστερά της κυρίως επιφάνειας, ενδέχεται να αντικατοπτρίζονται από τις κορυφές των 0.98 μm και 0.45 μm αντίστοιχα, οι οποίες φαίνονται στο Σχήμα 6.27.. Ιδιαίτερα η δεξιά κορυφή είναι πολύ στενή (από άποψη έκτασης στον οριζόντιο άξονα), συγκριτικά με τις δύο άλλες κορυφές των προηγούμενων Σχημάτων (6.25. και 6.26.) για τις οποίες έχει ήδη γίνει λόγος, δείγμα του γεγονότος ότι η υψηλή τραχύτητα εμφανίζεται σε ένα πολύ μικρό χωρίο, το οποίο δε φαίνεται, οπτικά τουλάχιστον, να επηρεάζει γενικότερα τη μέση τιμή της τραχύτητας.

Και σε αυτή την περίπτωση, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι το βάθος φωτοαποδόμησης έχει τιμή 280 nm, που είναι ίδια με τις συνθήκες ακτινοβολήσης με παλμούς Laser υψηλότερης έντασης. Αυτό δηλαδή σημαίνει ότι και το 1 mJ είναι αρκετή ενέργεια για να αποδομήσει πλήρως το υμένιο (με δεδομένο ότι η πρακτικά εκμεταλλεύσιμη ενέργεια είναι ίση με 0.5714 mJ, αφού τόση απορροφάται από τα φωτόνια, λαμβάνοντας υπόψη το συντελεστή απορρόφησης 57.14%). Στην πλήρη αποδόμηση της περιοχής παίζει ρόλο και η θερμική αγωγιμότητα του Mo ($142 \frac{W}{mK}$), η οποία είναι ιδιαίτερα υψηλή

ώστε να μπορεί να οδηγήσει σε τήξη και εξάτμιση ορισμένες περιοχές του υλικού και να προκαλέσει τον επιθυμητό βαθμό φωτοαποδόμησης.

Τέλος, αναφέρουμε ότι η *μέγιστη τραχύτητα*, είτε μέσω υπολογισμού της κατακόρυφης απόστασης από την υψηλότερη κορυφή στη βαθύτερη κοιλιά, είτε από την ένδειξη

TIR	1.2652 μm
-----	-----------

 του προφιλόμετρου, υπολογίζεται ίση με $R_r = 1.2652 \mu m$, δείγμα του γεγονότος ότι όσο μειώνεται η ισχύς του Laser τόσο αυξάνεται η μέγιστη τραχύτητα της επιφάνειας, η οποία μάλλον εμφανίζεται σε θέση που ανήκει στη HAZ και έχει απλώς επηρεαστεί είτε από την προσπίπτουσα ακτινοβολία είτε από την εκτόπιση τήγματος ή αποβεβλημένου υλικού.

6.8. Οπτικά αποτελέσματα από το ακτινοβοληθέν δοκίμιο από αλουμίνιο (Al)

Κατ'αντιστοιχία με την προηγούμενη Υποενότητα, στην οποία μελετήθηκε η επίδραση που έχει η ακτινοβολία Laser όταν προσπίπτει πάνω σε συγκεκριμένα spots του εξετασθέντος λεπτού υμενίου από Mo, θα εστιάσουμε εδώ στην ακτινοβολήση περιοχών ενός άλλου λεπτού υμενίου από αλουμίνιο (Al), όπως αυτή έγινε μέσα στο κτίριο του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών (ΕΙΕ) στα πλαίσια της διεξαχθείσας πειραματικής διαδικασίας. Οι μετρήσεις και τα αποτελέσματα που θα παρατεθούν στη συνέχεια της Υποενότητας αναμένεται να παρουσιάσουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον τόσο από μόνες τους, όσο και συγκριτικά με το δοκίμιο από Mo που εξετάσαμε παραπάνω, τόσο λόγω των διαφορετικών ιδιοτήτων των δύο υλικών όσο και λαμβάνοντας υπόψη τη μικρή, αλλά υπολογίσιμη, διαφορά στα πάχη των υμενίων που είναι στη διάθεσή μας (280 nm για το Mo, 390 nm για το Al, όπως αυτά μετρήθηκαν στο Εργαστήριο). Καταρχήν, οι πυκνότητες μάζας σε θερμοκρασία περιβάλλοντος διαφέρουν σημαντικά ανάμεσα στα δύο στοιχεία (2.7 g/cm^3 στο Al, 12.26 g/cm^3 στο Mo), ενώ διακρίνονται και εμφανείς διαφορές στην κρυσταλλική δομή αλλά και στην απόσταση μεταξύ γειτονικών ατόμων, a . Συγκεκριμένα, το Al έχει δομή FCC με $a = 3.536 \text{ \AA}$ (η τιμή υπολογίστηκε λαμβάνοντας υπόψη τη σχέση $a = 2r_a \sqrt{2}$, για κρυσταλλικές δομές FCC, αλλά και την τιμή της ατομικής ακτίνας του Al, $r_a = 1.54 \text{ \AA}$), ενώ το Mo χαρακτηρίζεται από δομή BCC με $a = 2.7252 \text{ \AA}$. Τέλος, σημαντικό ρόλο αναμένεται να παίξουν και πιθανές διαφοροποιήσεις στα σημεία τήξης και βρασμού των δύο υλικών. Οι δύο αντίστοιχες τιμές για το Al είναι 933.47 K και 2740.15 K , ενώ για το Mo είναι σαφώς υψηλότερες και ανέρχονται στα 2890.15 K και 4885.15 K αντίστοιχα [Πηγή: www.chemicalelements.com].

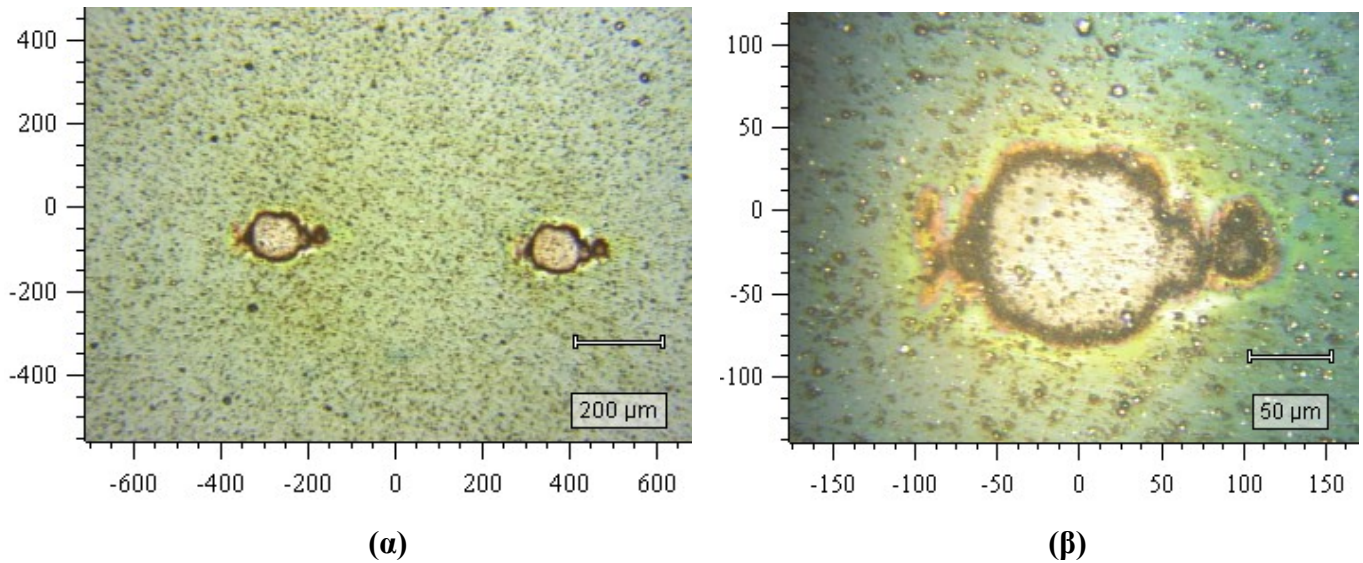
Στα πλαίσια των συγκεκριμένων μετρήσεων, διατηρήσαμε το μέγεθος του διαφράγματος σταθερό και ίσο με $1.5 \mu m$, μην έχοντας μεταβάλει τη συγκεκριμένη τιμή έπειτα από τη διεξαγωγή των αντίστοιχων πειραμάτων στο υμένιο από Mo (τα οποία προηγήθηκαν χρονικά της περίπτωσης του Al). Με αυτό τον

τρόπο, και λαμβάνοντας υπόψη ότι διεξαγάγαμε ακτινοβολήσεις με ενέργειες Laser 3, 2 και 1 mJ, όπως και στην προηγούμενη περίπτωση, καταλήξαμε στη δημιουργία 6 επιφανειών που προσεβλήθησαν από την ακτινοβολία (2 διακριτά σημεία για κάθε διαφορετική τιμή έντασης της δέσμης). Είναι πολύ σημαντικό να δούμε το πώς όλοι οι αρχικά θεωρούμενοι παράγοντες επιδρούν στην τελική διαμόρφωση της επιφάνειας, και το αν, και σε ποιο βαθμό, λαμβάνει χώρα φωτοαποδόμησή της, υπό μορφή αφαίρεσης υλικού. Για κάθε διαφορετική τιμή έντασης, έχουν παρατηρηθεί με το μικροσκόπιο και έχουν εξαχθεί σε αρχεία εικόνας JPG, δύο διαφορετικές φωτογραφίες, εκ των οποίων η μία παρουσιάζει και τα δύο ακτινοβοληθέντα spots για την υπόψη ένταση, ενώ η άλλη εστιάζει, σε μεγαλύτερη μεγέθυνση, στο ένα από τα δύο.

6.8.1. Spot δοκιμίου Al ακτινοβολημένο με παλμό nanosecond Laser ενέργειας 3 mJ

Το πρώτο από τα τρία σκέλη του πειράματος που πραγματοποιήθηκε πάνω στο υμένιο από Mo, αφορά την ακτινοβολήση με Laser ενέργειας 3 mJ (για λόγους που αναφέρθηκαν στην Υποενότητα 6.7., δεν κατέστη εφικτή η εφαρμογή μεγαλύτερης ενέργειας δέσμης πάνω στο δοκίμιο). Έπειτα από την παρέλευση δύο παλμών Laser διάρκειας 10 ns, καθένας από τους οποίους προσέπεσε σε διαφορετικό σημείο (spot) πάνω στο δοκίμιο, ελήφθησαν δύο εικόνες των επιφανειών που προσβλήθηκαν, και οι οποίες απεικονίζονται στο παρακάτω Σχήμα 6.28.[α]. Το Σχήμα 6.28.[β], το οποίο βρίσκεται ακριβώς δίπλα, εστιάζει (σε μεγαλύτερη μεγέθυνση από ό,τι στην περίπτωση [α]) και δίνει έμφαση στο ένα από τα δύο – σχεδόν πανομοιότυπα – ακτινοβοληθέντα χωρία, και μπορεί να μας δώσει πιο εμπεριστατωμένες λεπτομέρειες που σχετίζονται με τις συνέπειες της εφαρμογής της ακτινοβολίας.

Αξίζει εδώ να σημειωθεί ότι, όπως και στην περίπτωση των εικόνων του μικροσκοπίου για το Mo, οι οποίες εξετάστηκαν στην Υποενότητα 6.7., κρίνεται απαραίτητη η εστίαση μόνο στο ένα από τα δύο Spots που ακτινοβολήθηκαν με τη συγκεκριμένη ενέργεια, καθώς οι συνθήκες ακτινοβολήσης είναι ίδιες ή παραπλήσιες και για τα δύο Spots, με αποτέλεσμα οι προκύπτουσες μορφές των ακτινοβολημένων επιφανειών να μοιάζουν αισθητά μεταξύ τους.

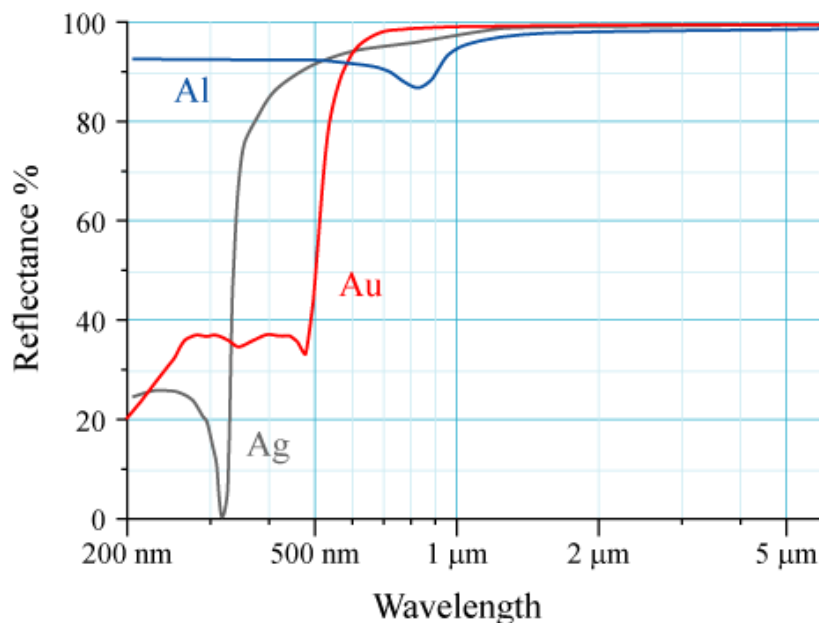


Σχήμα 6.28. Απεικονίσεις των ακτινοβοληθεισών περιοχών (spots) πάνω στο λεπτό υμένιο από Al, με nanosecond παλμούς Laser ενέργειας 3 mJ. [α] Και τα δύο spots που ακτινοβολήθηκαν, [β] Το ένα από τα δύο προαναφερθέντα spots, σε μεγαλύτερη μεγέθυνση.

Παρατηρώντας αρχικά το παραπάνω Σχήμα, μπορούμε να διαπιστώσουμε πολύ σημαντικές διαφορές ανάμεσα στα αποτελέσματα που επιφέρει η ακτινοβολήση με Laser στο Mo και στο Al:

- Καταρχήν, ο χρωματισμός της επιφάνειας του Al είναι πολύ διαφορετικός σε σχέση με αυτόν του Mo, κάτι που μπορεί να δικαιολογηθεί ικανοποιητικά κάνοντας τη σύγκριση του Σχήματος 6.28. με τα Σχήματα 6.13. και 6.15. έως 6.23. που αναφέρονται στην επιφάνεια του Mo. Η διαπίστωση αυτή είναι ιδιαίτερα προφανής, αλλά μπορεί να μας βοηθήσει να ξεχωρίσουμε με ιδιαίτερη ευκολία τα δύο υλικά – με άλλα λόγια, ο χρωματισμός της επιφάνειας παίζει πολύ σημαντικό ρόλο στο να διαπιστώσουμε αν το υλικό που επιβάλλεται σε ακτινοβολήση και εγχάραξη είναι το Mo ή το Al.
- Η κυρίως επιφάνεια του Al χαρακτηρίζεται από ανοιχτό καφέ χρώμα, ενώ η σκουρόχρωμη περιφέρειά της μπορεί να μας βοηθήσει να ξεχωρίσουμε την περιοχή που προσεβλήθη από μεγαλύτερες τιμές έντασης Laser και έχει υποστεί φωτοαποδόμηση σε κάποιο βαθμό, από τη θερμικά επηρεασμένη ζώνη (HAZ), η οποία βρίσκεται σε εξώτερα χωρία και εμφανίζεται στο Σχήμα 6.28. με πράσινο χρώμα. Το χρώμα της περιοχής που ακτινοβολήθηκε δικαιολογεί την έκφραση «σε κάποιο βαθμό» όταν αναφερόμαστε στο πόσο έντονη είναι η φωτοαποδόμηση που υπέστη η επιφάνεια. Πράγματι, σε αντίθεση με το έντονο γκριζό χρώμα που χαρακτηρίζει εν γένει όλα τα ακτινοβοληθέντα χωρία του υμενίου από Mo, κάτι που υποδηλώνει πλήρη φωτοαποδόμηση, το πιο ανοιχτό καφέ χρώμα, που προσεγγίζει το λευκό, μας δίνει μια πρώτη ιδέα σχετικά με την ελλιπή φωτοαποδόμηση που λαμβάνει χώρα στο Al, κυρίως στις επιφάνειες που βρίσκονται γύρω από την κεντρική της θέση, όπου

επενέργησε η μέγιστη ενέργεια του Laser λόγω του Gaussian προφίλ της δέσμης. Αυτό που μπορούμε να διαπιστώσουμε είναι ότι οι διαφορές στο βαθμό φωτοαποδόμησης των δύο υλικών οφείλονται σε πολύ σημαντικό βαθμό σε αποκλίσεις στις τιμές της ανακλαστικότητας (reflectance) που αυτά παρουσιάζουν. Έχουμε ήδη αναφέρει στο Κεφάλαιο 5, ότι μία τυπική τιμή για την ανακλαστικότητα του Mo, σε ένα μεγάλο εύρος μηκών κύματος και θερμοκρασιών, είναι το 42.86%. Αυτό σημαίνει ότι το 57.14% της ακτινοβολίας Laser που προσπίπτει πάνω σε ένα τεμάχιο από Mo τελικώς απορροφάται από αυτό. Η τιμή της ανακλαστικότητας για το Al διαφέρει πολύ σημαντικά, σε σύγκριση με την αντίστοιχη του Mo, όπως τονίζεται από τους Bass και Van Stryland στη βιβλιογραφία [167] και παρουσιάζεται στο παρακάτω Σχήμα 6.29.:



Σχήμα 6.29. Μεταβολή της ανακλαστικότητας (reflectance, R) τριών μεταλλικών στοιχείων συναρτήσει του μήκους κύματος [167]. Εδώ θα δοθεί έμφαση στο αλουμίνιο (Al), για το οποίο $R = 92\%$, για το μήκος κύματος (waveform) των 355 nm με το οποίο ακτινοβολήθηκε το υμένιο από Al στο Εργαστήριο του ΕΙΕ.

Όπως παρατηρούμε για την καμπύλη που αναφέρεται στο Al, και εστιάζοντας στο μήκος κύματος των 355 nm, που αντιστοιχεί στις ακτίνες της Gaussian δέσμης Laser που προσέπεσε πάνω στο υμένιο, στα πλαίσια του πειράματος, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η ανακλαστικότητα του Al ανέρχεται σε μία πάρα πολύ υψηλή τιμή, 92%. Αυτό δηλαδή συνεπάγεται ότι μόνο το 8% της ακτινοβολίας Laser απορροφάται τελικά από το υλικό, ενώ η υπόλοιπη ποσότητα ανακλάται και εκτρέπεται μακριά από αυτό. Ακόμα και στην περίπτωση της μέγιστης ενέργειας Laser από αυτές που χρησιμοποιούνται στο πείραμα, δηλαδή τα 3 mJ, βλέπουμε ότι μόνο τα 0.24 mJ τελικά απορροφώνται από την επιφάνεια, σε αντίθεση με τα 1.8 mJ που απορροφώνται στην περίπτωση του Mo. Οι παραπάνω διαφορές τελικώς κρίνονται

ιδιαίτερα σημαντικές όσον αφορά το βαθμό στον οποίο κάθε επιφάνεια προσβάλλεται, αλλά και διάφορα άλλα φαινόμενα που παρουσιάζονται ως άμεση συνέπεια, όπως η ανύψωση της θερμοκρασίας (η οποία είναι μεγαλύτερη για αυξημένες τιμές απορροφούμενης ακτινοβολίας) και, κατά συνέπεια, ο αριθμός των αποδομούμενων ατόμων και η έκταση της επιφάνειας από την οποία τελικώς αφαιρείται υλικό. Η χαμηλή θερμοκρασιακή ανύψωση, στην περίπτωση του Al, συνεπάγεται ότι ενδεχομένως ένα μέρος από τα άτομα που προσβάλλονται να περιέλθει στην υγρή φάση (λαμβάνοντας υπόψη και το σημείο τήξης των 933.47 K), αλλά να απαιτείται από εκεί και πέρα πολύ έντονη πρόσδοση ενέργειας ώστε η θερμοκρασία να ανυψωθεί, στην απαιτούμενη έκταση, πάνω από το σημείο βρασμού των 2740.15 K. Προφανώς, εάν δεν περιέλθει στην αέρια φάση ένα άτομο του υλικού, θα συνεχίσει να ταλαντώνεται με αυξημένη ταχύτητα αλλά δεν πρόκειται να φτάσει στο βαθμό εκείνο που θα εξασφαλίσει απομάκρυνση από τον κρύσταλλο. Τα παραπάνω συντελούν στο να διαπιστώσουμε εντέλει ότι πρακτικά το Al δε φωτοαποδομείται (ή υφίσταται αποδόμηση σε μερικό βαθμό), αλλά απλά προσβάλλεται από την ακτινοβολία. Για τον παραπάνω λόγο άλλωστε δεν εμφανίζονται *οπές* στο Σχήμα 6.28., σε αντίθεση με την περίπτωση του μολυβδαινίου. Κάτι τέτοιο θα συνέβαινε εάν επενεργούσαν, πάνω στο υπόψη spot, *περισσότεροι του ενός παλμοί* αντί για ένας, που εφαρμόστηκε στο παρόν πείραμα.

Ένα κοινό στοιχείο που παρουσιάζουν οι περιπτώσεις του Al και του Mo έχει να κάνει με την εμφάνιση απολήξεων, υπό μορφή «αυτιών», στη δεξιά πλευρά της προσβεβλημένης από το Laser (ή μερικώς φωτοαποδομημένης) επιφάνειας. Αυτές οι απολήξεις, όπως έχουμε δει και προηγουμένως, οφείλονται κατά βάση σε δύο παράγοντες – παρατηρήσεις:

- Η δέσμη Laser παρουσιάζει ένα Gaussian προφίλ κατά το επίπεδο XY, κάτι που επηρεάζει την ποσότητα της ακτινοβολίας που προσπίπτει σε περιοχές που βρίσκονται γειτονικά του «κέντρου» της ακτινοβολημένης περιοχής.
- Η δέσμη δεν είναι πλήρως ευθυγραμμισμένη (aligned), με αποτέλεσμα η ακτίνα που αντιστοιχεί στη μέγιστη τιμή της να μην είναι εντελώς παράλληλη με τον άξονα των Z, επηρεάζοντας συνακόλουθα και τα διανύσματα μετατόπισης των υπολοίπων ακτίνων των οποίων η ένταση ικανοποιεί την κατανομή Gauss. Δημιουργείται λοιπόν *παραμόρφωση* της δέσμης, η οποία παίζει και αυτή σημαντικό ρόλο στο σχηματισμό «αυτιών».

Και στην περίπτωση των απολήξεων, ταυτόχρονα με ό,τι έχει να κάνει με την κυρίως ακτινοβολημένη επιφάνεια, μπορούμε να διαπιστώσουμε, έπειτα από τις οπτικές παρατηρήσεις του Σχήματος 6.26., ότι αυτές οι απολήξεις δεν απορροφούν τόσο μεγάλη τιμή ενέργειας όσο τα αντίστοιχα «αυτάκια» πάνω στο υμένιο από Mo, με το βασικό λόγο να είναι η πολύ υψηλή ανακλαστικότητα του Al συγκριτικά με το Mo. Αυτή η παρατήρηση μπορεί να δικαιολογήσει και το γιατί οι διαστάσεις και το εμβαδό των

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

προσβεβλημένων και μερικώς φωτοαποδομημένων χωρίων λαμβάνουν σαφώς χαμηλότερες τιμές από ό,τι στην περίπτωση του – εμφανώς πιο απορροφητικού – Mo.

Επίσης, κατ'αντιστοιχία με την περίπτωση του Mo, την οποία εξετάσαμε στην Υποενότητα 6.7., μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η απόληξη – «αυτί» που σχηματίζεται στο δεξί τμήμα του ακτινοβοληθέντος δοκιμίου έχει διαχωριστεί από την κυρίως επιφάνεια, χωρίς να ενώνεται, δείγμα του ότι ορισμένες από τις ακτίνες μεγαλύτερης έντασης από άλλες έχουν εκτραπεί από την ιδανική κατεύθυνση που θα πρέπει να έχουν, ώστε η Gaussian μορφή του προφίλ της δέσμης, κατά το επίπεδο XY, να ικανοποιείται πλήρως. Όπως συμβαίνει και με την κυρίως περιοχή, έτσι και στην απόληξη δεν παρατηρείται η ύπαρξη κάποιας οπής, δείγμα της *ελλιπούς* φωτοαποδόμησης που έχει συντελεστεί.

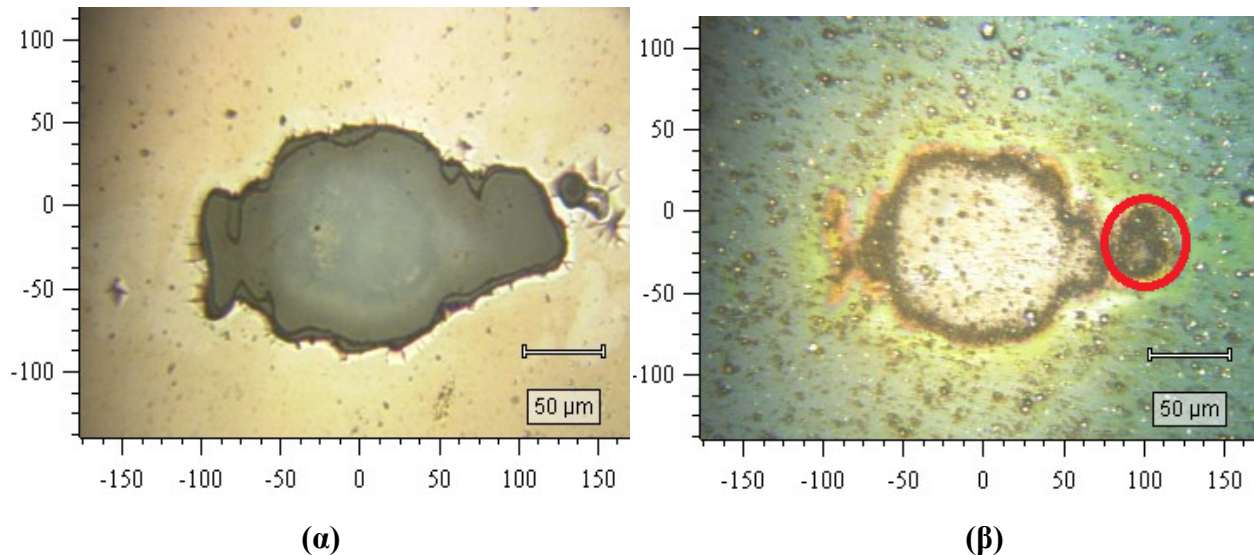
Παρά το γεγονός ότι το Al έχει υποστεί μερική φωτοαποδόμηση, εντούτοις μπορούμε να ξεχωρίσουμε (οπτικά) το τμήμα που όντως την υπέστη (υπό μορφή *τμηματικής αποβολής υλικού*) με την περιοχή που απλώς εμφανίζει κάποια θερμοκρασιακή ανύψωση, ως κομμάτι της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ), αντιπαραβάλλοντας τα αντίστοιχα καφέ (ανοιχτό – σκούρο) και πράσινα χρώματα από τα οποία χαρακτηρίζονται οι υπό εξέταση περιοχές. Επίσης, έχουμε τη δυνατότητα, όπως και στην Υποενότητα 6.7., να μετρήσουμε την οριζόντια και κατακόρυφη διάσταση της περιοχής που προσεβλήθη στο μέγιστο βαθμό από τη δέσμη Laser, και, ακολούθως, να υπολογίσουμε το εμβαδό της αντίστοιχης επιφάνειας, ως άθροισμα του εμβαδού της κυρίως περιοχής και της κυκλικής – σφαιρικής απόληξης. Εφαρμόζουμε την επιθυμητή εστίαση στο Σχήμα 6.28.[β], το οποίο αντιστοιχεί στο ένα spot, μέσα από το *Microsoft Office Picture Manager*. Φτάνουμε σε ένα βαθμό Zoom τέτοιο, ώστε τα 50 μm που αναγράφονται στην κλίμακα να αντιστοιχούν σε 2.35 cm στο υποδεκάμετρο, κάτι που σημαίνει, όπως έχουμε παρατηρήσει επανειλημμένα σε προηγούμενα εδάφια, ότι το 1 cm του υποδεκάμετρου αντικατοπτρίζει μήκος 21.277 μm πάνω στην εικόνα του υμενίου. Λαμβάνοντας τώρα την οριζόντια και την κατακόρυφη διάσταση τέτοια, ώστε να αντιστοιχούν στις ευθείες γραμμές που διέρχονται από το κέντρο της ακτινοβοληθείσας επιφάνειας (με $x_{\text{κέντρου}} \approx 0$, $y_{\text{κέντρου}} \approx -25\mu\text{m}$), τις μετράμε με το υποδεκάμετρο, με τα αντίστοιχα αριθμητικά αποτελέσματα α και β να εμφανίζονται παρακάτω. Στον υπολογισμό της οριζόντιας διάστασης συμπεριλαμβάνεται και το τμήμα που αντιστοιχεί στην απόληξη – «αυτί», για την οποία έχει ήδη γίνει λόγος, ενώ το κενό που σχηματίζεται μεταξύ της κυρίως επιφάνειας και της απόληξης, προφανώς και δε λαμβάνεται υπόψη στους υπολογισμούς.

- $\alpha = 21.277 \cdot 8.8 = 187.2376\mu\text{m}$
- $\beta = 21.277 \cdot 5.3 = 112.7681\mu\text{m}$

Ανατρέχοντας στον Πίνακα 6.1., που παρουσιάζει τις τιμές της οριζόντιας και κατακόρυφης διάστασης για κάθε ένα από τα ακτινοβοληθέντα spots του Mo, μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι οι σχηματιζόμενες περιοχές πάνω στο Al χαρακτηρίζονται από αρκετά μικρότερες διαστάσεις.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

νου μας ότι η διάμετρος (το μέγεθος) του διαφράγματος ορίζεται στα 1.5 μm για κάθε ένα από τα πειράματα που έχουν διεξαχθεί στην επιφάνεια του Al, αξίζει να κάνουμε τις απαραίτητες συγκρίσεις μεταξύ των διαστάσεων που αφορούν τα spots για τα οποία έγινε λόγος στα εδάφια 6.7.4. και 6.8.1.. Αυτές μπορούν καταρχήν να γίνουν οπτικά, με τη βοήθεια του ακόλουθου Σχήματος 6.30.:



Σχήμα 6.30. Παράθεση και σύγκριση ακτινοβοληθεισών περιοχών από τα δύο λεπτά υμένια από Mo [α] και Al [β], τα οποία χρησιμοποιήθηκαν κατά τη διάρκεια των πειραμάτων στο EIE, για ενέργεια δέσμης Laser 3 mJ, μέγεθος διαφράγματος 1.5 μm και κλίμακα μεγέθυνσης στο μικροσκόπιο 50 μm . Σημείωση: Η απόληξη – «αυτί» που υπάρχει στο δεξί Σχήμα έχει περικυκλωθεί σε κόκκινο πλαίσιο.

Είναι εμφανές, από την παράθεση των δύο Σχημάτων γειτονικά το ένα με το άλλο, ότι οι διαστάσεις της ακτινοβολημένης / προσβεβλημένης από το Laser (και μερικώς φωτοαποδομημένης) περιοχής που αφορά το Al, είναι αρκετά μικρότερες από ό,τι στην περίπτωση του Mo, κάτι που οφείλεται στη μεγάλη διαφορά απορροφητικότητας των δύο υλικών (το Al είναι σαφώς πιο ανακλαστικό) και αντικατοπτρίζεται στις διαφορές μεταξύ των ενεργειών που τελικώς απορροφούνται από τα δύο δοκίμια. Εάν τώρα εστιάσουμε στις ποσοτικές διαφορές των διαστάσεων μεταξύ Mo και Al, θα δούμε ότι η αλλαγή του υλικού επιφέρει ελάττωση της οριζόντιας διάστασης κατά $\frac{225.536-187.238}{225.536} \cdot 100\% = 16.98\%$ και της κατακόρυφης κατά $\frac{123.407-112.768}{123.407} \cdot 100\% = 8.62\%$. Οι διαφορές αυτές δεν είναι πάρα πολύ μεγάλες αλλά σίγουρα παρατηρήσιμες, υπολογίσιμες και αρκετά ικανοποιητικές ώστε να δικαιολογηθούν πλήρως και αξιόπιστα τα συμπεράσματά μας σχετικά με την επίδραση της ανακλαστικότητας κάθε υλικού κατά τη φωτοαποδόμηση.

Ο γενικός τύπος για το εμβαδό, $A = \frac{\pi\alpha\beta}{4}$, που χρησιμοποιήθηκε και στην Υποενότητα 6.7., θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί και επί του παρόντος, χωρίς βλάβη της γενικότητας, από τη στιγμή που η γεωμετρική μορφή της επιφάνειας τον κάνει αξιόπιστο. Όμως, είναι σημαντικό να αναφέρουμε ότι ο παραπάνω τύπος, για τη μέγιστη ακρίβεια στους υπολογισμούς μας, θα αφορά ξεχωριστά την κυρίως περιοχή της ακτινοβοληθείσας επιφάνειας, με το εμβαδό της απόληξης, η οποία, στο παραπάνω Σχήμα 6.30.[β], έχει περικυκλωθεί σε κόκκινο πλαίσιο, ώστε να διακρίνεται ευκολότερα, να υπολογίζεται ως μία ανεξάρτητη «συνιστώσα», με διαστάσεις $1.4 \cdot 21.277 = 29.788\mu\text{m}$ οριζόντια και $2.3 \cdot 21.277 = 48.937\mu\text{m}$ κατακόρυφα. Η συνιστάμενη τιμή του εμβαδού, προφανώς θα προκύψει με απλή άθροιση των δύο «συνιστωσών», κάτι που μπορεί να φανεί και μαθηματικά, με τη βοήθεια της παρακάτω Σχέσης (6.15):

$$A = \frac{\pi}{4} [(187.238 - 29.788) \cdot 112.768 + 29.788 \cdot 48.937] = 15089.8996\mu\text{m}^2 = 1.5089 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2 \quad (6.15)$$

κάτι που δείχνει εμφανέστατα ότι έχει ελαττωθεί σημαντικά το εμβαδό της φωτοαποδομημένης περιοχής, λόγω προφανώς της υψηλής ανακλαστικότητας του Al. Η ροή ακτινοβολίας Laser υπολογίζεται ακολούθως:

$$F = \frac{E_{LASER}}{A} = \frac{3 \cdot 10^{-3} [J]}{1.5089 \cdot 10^{-4} [cm^2]} = 19.882033 J/cm^2 \quad (6.16)$$

Το συγκεκριμένο αποτέλεσμα, όσο κι αν δείχνει εντονότερη πρόσπτωση Laser ανά μονάδα επιφάνειας (καθώς το μέγεθος της ροής / fluence ουσιαστικά αντικατοπτρίζει ένταση), αναμένεται να υποδηλώνει ιδιαίτερα χαμηλή απόδοση φωτοαποδόμησης, όπως και τελικά συμβαίνει, συγκρίνοντας τα Σχήματα 6.30. [α] και [β] μεταξύ τους. Διαπιστώνουμε δηλαδή ότι, η αύξηση της έντασης (ροής) κατά $\frac{19.882033 - 13.719993}{13.719993} \cdot 100\% = 44.91\%$ επιφέρει ελλιπέστερη φωτοαποδόμηση και δεν ικανοποιεί τον

αρχικό μας στόχο, ο οποίος αφορά την πλήρη αφαίρεση υλικού από την ακτινοβολημένη περιοχή του υμενίου. Η διαπίστωσή μας σχετικά με την ελάττωση του βαθμού φωτοαποδόμησης επιβεβαιώνεται, εάν τη δούμε σε συνδυασμό με το Σχήμα 6.24., που περιγράφει την εξέλιξη της απόδοσης φωτοαποδόμησης συναρτήσει της ροής ακτινοβολίας (έστω και αν πρόκειται για το Mo). Συγκεκριμένα, είμαι προφανές ότι η διαδικασία κρίνεται σαφώς μη αποδοτική για τόσο υψηλές εντάσεις, κάτι που αντικατοπτρίζεται και στα οπτικά αποτελέσματα που αφορούν το Al.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει και ο υπολογισμός της περιοχής που βρίσκεται εκτός της επιφάνειας που περικλείεται από το σκούρο καφέ πλαίσιο, αλλά έχει υποστεί αλλοίωση στο χρώμα λόγω θερμοκρασιακής ανύψωσης από της ακτίνες Laser, με αποτέλεσμα να τοποθετείται στη θερμικά επηρεασμένη ζώνη (HAZ). Στο Σχήμα 6.28.[β] ή στο 6.30.[β], μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι το

γαλαζωπό (ή τρκουάζ) χρώμα που χαρακτηρίζει τα άκρα της εικόνας που ελήφθη από το μικροσκόπιο αρχίζει και γίνεται πιο πράσινο καθώς προχωράμε προς το κέντρο της φωτογραφίας – αυτή η αλλαγή του χρώματος σηματοδοτεί την έναρξη της HAZ. Αντίστοιχα με την Υποενότητα 6.7., στο οποίο υπολογίσαμε, μεταξύ άλλων, το εμβαδό της HAZ για κάθε ένα από τα ακτινοβοληθέντα Spots από μολυβδαίνιο (Mo), μπορούμε να εφαρμόσουμε την εξής στρατηγική προκειμένου να υπολογίσουμε, με τη μέγιστη δυνατή ακρίβεια το ζητούμενο μέγεθος. Αρχικά, μετράμε τις οριζόντιες και κατακόρυφες αποστάσεις μεταξύ των άκρων στα οποία αντίστοιχα αρχίζει και σταματά η εμφάνιση αλλοίωσης του φυσικού τρκουάζ χρώματος της επιφάνειας. Η μαθηματική σχέση $E = \frac{\pi \alpha' \beta'}{4}$, όπου α' και β' οι

διαστάσεις που έχουν υπολογιστεί από το προηγούμενο βήμα, θα μας δώσει μία ικανοποιητική προσέγγιση για το εμβαδό της υπόψη έκτασης. Αυτή όμως περικλείει και την κυρίως ακτινοβολημένη (και όχι πλήρως φωτοαποδομημένη, για τους λόγους που εξηγήθηκαν παραπάνω εντός της τρέχουσας Υποενότητας) περιοχή, η οποία οριοθετείται από το σκούρο καφέ κύκλο (βλ. Σχήμα 6.26.[β]). Αφαιρώντας το ακτινοβολημένο χωρίο από εκείνο του οποίου το εμβαδό υπολογίσαμε, προκύπτει η έκταση της HAZ, έστω και αν ο υπολογισμός οδηγεί σε κάποια μικρά σφάλματα. Για τις ανάγκες της ανάλυσής μας όμως, η αλληλουχία των βημάτων υπολογισμού και ο τρόπος με τον οποίο αυτός γίνεται, κρίνονται επαρκείς και μπορούν να μας οδηγήσουν σε σχετικά ασφαλή συμπεράσματα.

Διατηρώντας την εστίαση του δοκιμίου σταθερή, κατά τέτοιον τρόπο ώστε το 1 cm του υποδεκάμετρου να αντιστοιχεί σε 21.277 μm της κλίμακας της εικόνας (2.35 cm του υποδεκάμετρου για 50 μm της εικόνας, όπως έχουμε ήδη δει και σε προηγούμενες περιπτώσεις), μετράμε τις επιθυμητές αποστάσεις α' και β' και τις βρίσκουμε ίσες με τις ακόλουθες τιμές:

- $\alpha' = 13.35 \cdot 21.277 = 284.048 \mu\text{m}$ ή $\alpha' = 13 \cdot 21.277 = 276.601 \mu\text{m}$, αν υποθέσουμε ότι η περιοχή οριζόντιου μήκους 7.5 μm στο δεξί τμήμα της εικόνας, και της οποίας το χρώμα δεν έχει αλλοιωθεί, δεν μπορεί να λογιστεί ως τμήμα της HAZ.
- $\beta' = 8.4 \cdot 21.277 = 178.727 \mu\text{m}$.

Το εμβαδό της περιοχής που έχει διαστάσεις τις α' και β' , λαμβάνοντας υπόψη τη δεύτερη θεώρηση σχετικά με την τιμή της διάστασης α' , υπολογίζεται ίσο με

$$A' = \frac{\pi \cdot 276.601 \cdot 178.727}{4} = 38826.9962 \mu\text{m}^2 = 3.8827 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2, \text{ κάτι που σημαίνει ότι η έκταση της HAZ}$$

υπολογίζεται ως η διαφορά $A' - A = (3.8827 - 1.5089) \cdot 10^{-4} \text{cm}^2 = 2.3738 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$. Συγκριτικά με την αντίστοιχη τιμή που αφορά την ακτινοβολήση υμενίου Mo με παλμό Laser ίδιας έντασης (3 mJ) διερχόμενο από διάφραγμα ίδιας διαμέτρου (1.5 μm), και η οποία έχει βρεθεί ίση με $1.11061 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$, παρατηρείται μία υπερδιπλάσια διαφορά τιμής προς τα πάνω, με την αύξηση να ορίζεται ποσοστιαία στο

$\frac{2.3738-1.11061}{1.11061} \cdot 100\% = 113.74\%$. Κάτι τέτοιο δίνει την πρώτη εντύπωση ότι η ακτινοβολία του Al

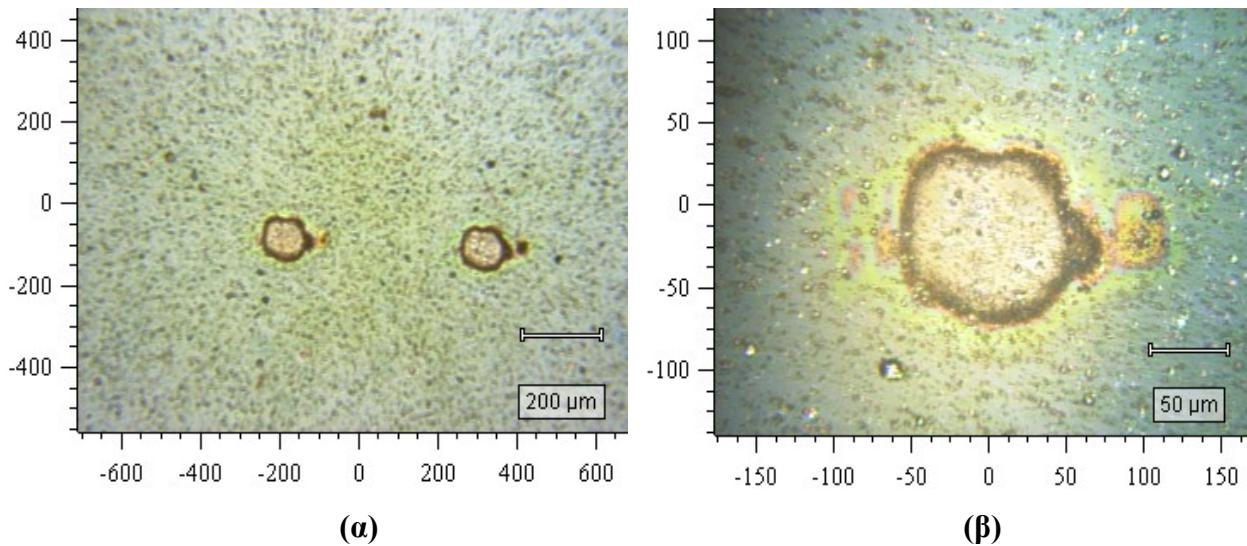
με Laser ιδίων χαρακτηριστικών δημιουργεί μία περιοχή που περιλαμβάνει μία ιδιαίτερα εκτεταμένη HAZ, μεγαλύτερη ακόμα και από την περιοχή που έχει υποστεί κάποιας μορφής μερική φωτοαποδόμηση, καθώς, όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε και από το Σχήμα 6.28.[β], το χρώμα της κεντρικής επιφάνειας δεν υποδηλώνει πλήρη αφαίρεση υλικού, όσο λεπτό κι αν είναι το υμένιο. Η ιδιαίτερα αυξημένη HAZ σημαίνει ότι λαμβάνει μεν χώρα θερμοκρασιακή ανύψωση, που όμως δεν είναι τόσο έντονη ώστε να οδηγήσει στη μετάβαση τμημάτων του υλικού στην αέρια φάση, κάτι που σημαίνει και απομάκρυνσή τους. Η επίδραση κάθε ακτίνας της δέσμης Laser πάνω στο υλικό, είτε είναι ισχυρής είτε ασθενούς, με δεδομένο και το Gaussian προφίλ της δέσμης κατά το επίπεδο XY, είναι εμφανής και δεδομένη, καθώς, στην πιο ήπια περίπτωση, προκαλεί την αύξηση της θερμοκρασίας σε τέτοιο βαθμό ώστε να γίνει αντιληπτή μέσω αλλαγής χρώματος της επιφάνειας. Περιοχές που έχουν υπερβεί τη θερμοκρασία των 933.45K (σημείο τήξης του Al) τήκονται, ενώ εξάτμιση λαμβάνει χώρα σε θέσεις όπου η τοπική θερμοκρασία ξεπερνά τους 2792 K (σημείο βρασμού του Al). Η χαμηλή απορροφητικότητα του Al (μόλις 8%) μπορεί μεν να μην δημιουργεί προβλήματα αναφορικά με την αύξηση της θερμοκρασίας στο υλικό, δεν την εμποδίζει όμως. Μόνο η απομάκρυνση υλικού δυσκολεύεται ιδιαίτερα συγκριτικά με το Mo. Οι παραπάνω προτάσεις δικαιολογούν το γεγονός ότι η HAZ είναι τόσο εκτεταμένη, αλλά η μερικώς φωτοαποδομημένη περιοχή δεν παρουσιάζει το ίδιο εμβαδό, αλλά σαφώς χαμηλότερο. Σε μελλοντικές μελέτες θα ήταν άξια ενδιαφέροντος η ακτινοβολία λεπτών υμενίων από Al με Laser έντασης άνω των 3 mJ, χωρίς όμως να σημαίνει ότι κάτι τέτοιο μπορεί να επιφέρει ταχύτερη και ευκολότερη φωτοαποδόμηση. Σε μία τέτοια μελέτη, θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί ως αφετηρία το Σχήμα 6.22., στο οποίο φαίνεται ότι η απόδοση της φωτοαποδόμησης, τουλάχιστον για το Mo, ελαττώνεται καθώς η ροή ακτινοβολίας αυξάνεται (ένα μέγεθος ανάλογο της έντασης του παλμού και αντιστρόφως ανάλογο της επιφάνειας από την οποία έχει αφαιρεθεί έστω και λίγο υλικό). Βέβαια, τη συνέχεια της τρέχουσας Υποενότητας, θα παρατεθεί και το αντίστοιχο διάγραμμα εξάρτησης των δύο μεγεθών για το Al, που μπορεί να χρησιμεύσει ως ένα περισσότερο αντιπροσωπευτικό δείγμα που θα βοηθήσει σημαντικά στη διεξαγωγή ακριβέστερων συμπερασμάτων αλλά και μελλοντικό προβλέψεων στο πώς η μεταβολή της έντασης του Laser, σε συνδυασμό με τη φύση του υλικού Al, επηρεάζει τα αποτελέσματα της κατεργασίας.

6.8.2. Spot δοκιμίου Al ακτινοβολημένο με παλμό nanosecond Laser ενέργειας 2 mJ

Στη συνέχεια του πειράματός μας με το Nd:YAG Laser και το λεπτό υμένιο από Al που έχουμε στη διάθεσή μας, επιλέγουμε δύο spots που μέχρι πρότινος έχουν μείνει ανέπαφα, και τα ακτινοβολούμε με

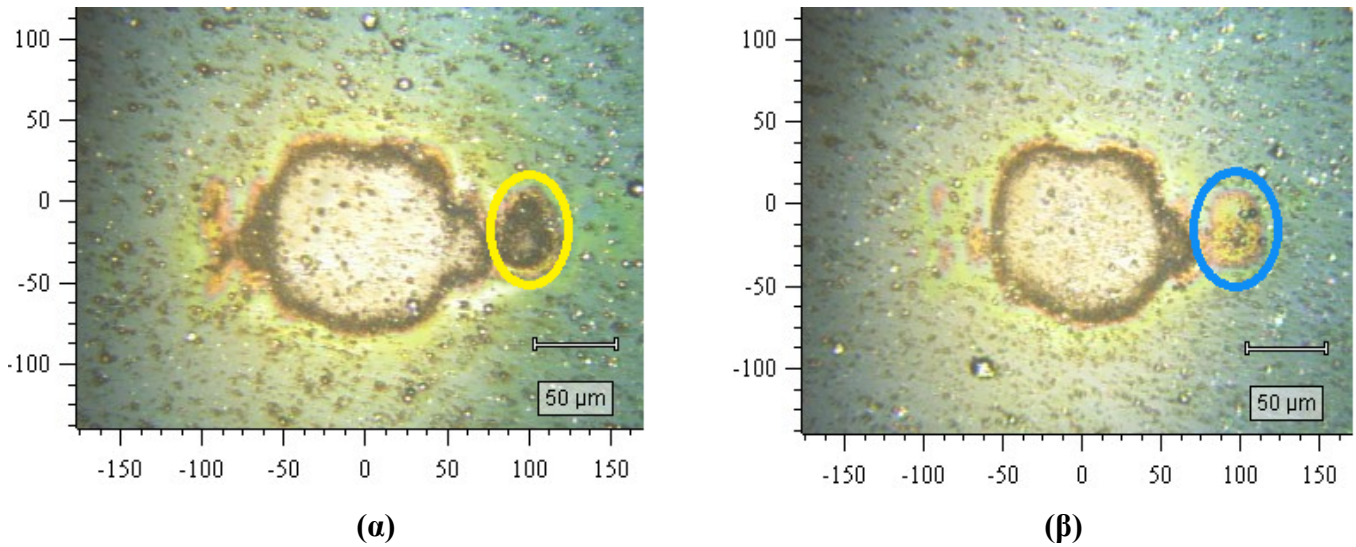
ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

δέσμη Laser ενέργειας 2 mJ, την οποία έχουμε καθορίσει (αφότου την έχουμε μειώσει από τα 3 mJ, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν στα πλαίσια του πειραματικού σκέλους που περιγράφηκε στο Εδάφιο 6.8.1.). Τα οπτικά αποτελέσματα από την ακτινοβολήση, όπως αυτά κατέστησαν παρατηρήσιμα με τη βοήθεια του μικροσκοπίου Raman που είχαμε στη διάθεσή μας, εμφανίζονται στο παρακάτω Σχήμα 6.31.:



Σχήμα 6.31. Απεικονίσεις των ακτινοβοληθεισών περιοχών (spots) πάνω στο λεπτό υμένιο από Al, με nanosecond παλμούς Laser ενέργειας 2 mJ. [α] Και τα δύο spots που ακτινοβολήθηκαν, [β] Το ένα από τα δύο προαναφερθέντα spots, σε μεγαλύτερη μεγέθυνση.

Είναι εμφανές, από το παραπάνω Σχήμα, ότι τόσο η υψηλή ανακλαστικότητα του Al, όσο και η ελάττωση της έντασης του Laser, παίζουν το ρόλο τους στην τελική διαμόρφωση των επιφανειών. Καταρχήν, παρατηρούμε και πάλι ότι η περιοχή που ακτινοβολήθηκε δεν έχει αποδομηθεί πλήρως, με τη μέγιστη εκδήλωση του φαινομένου να εμφανίζεται κοντά στο κέντρο της ακτινοβολημένης επιφάνειας, όπου προσπίπτει, λόγω Gaussian προφίλ της δέσμης, η μέγιστη τιμή της ακτινοβολίας. Η σύγκριση με την περίπτωση της ακτινοβολήσης με Laser ενέργειας 3 mJ, η οποία θα παρουσιαστεί στο ακόλουθο Σχήμα 6.32., μπορεί να μας βοηθήσει στην εξαγωγή βαθύτερων συμπερασμάτων σχετικά με τις συνέπειες από τη μείωση της ενέργειας Laser:



Σχήμα 6.30. Οπτική σύγκριση μεταξύ δύο περιοχών πάνω στο λεπτό υμένιο από Al που διαθέτει το EIE, οι οποίες ακτινοβολήθηκαν με nanosecond παλμούς Laser έντασης [α] 3 mJ και [β] 2 mJ. Το μέγεθος διαφράγματος, και για τις δύο περιπτώσεις ακτινοβολήσης, ορίζεται στο 1.5 μm.

Η αρχική μας παρατήρηση και διαπίστωση έχει να κάνει με το γεγονός ότι η επιφάνεια που επηρεάζεται σε τέτοιο βαθμό από την ακτινοβολία, ώστε να μπορούμε να πούμε ότι λαμβάνει χώρα φωτοαποδόμηση εν μέρει, ελαττώνεται, έστω και σε μικρό βαθμό, καθώς μειώνεται η ενέργεια του προσπίπτοντος παλμού Laser. Κάτι τέτοιο προφανώς και είναι φυσικό, όμως μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η μεγάλη κηλίδα που αντικατοπτρίζει την επιφάνεια δεν ελαττώνεται αναλογικά με την ενέργεια. Αυτή η τάση στη μεταβολή της προσβεβλημένης επιφάνειας ενδεχομένως να οφείλεται στην παραμόρφωση και ελλιπή ευθυγράμμιση της δέσμης, εξαιτίας της οποίας ορισμένες από τις ακτίνες Laser υπολογίσιμης ενέργειας, εντός του Gaussian προφίλ, να έχουν κατεύθυνση περιοχές του επιπέδου XY αρκετά μακριά από την κεντρική θέση.

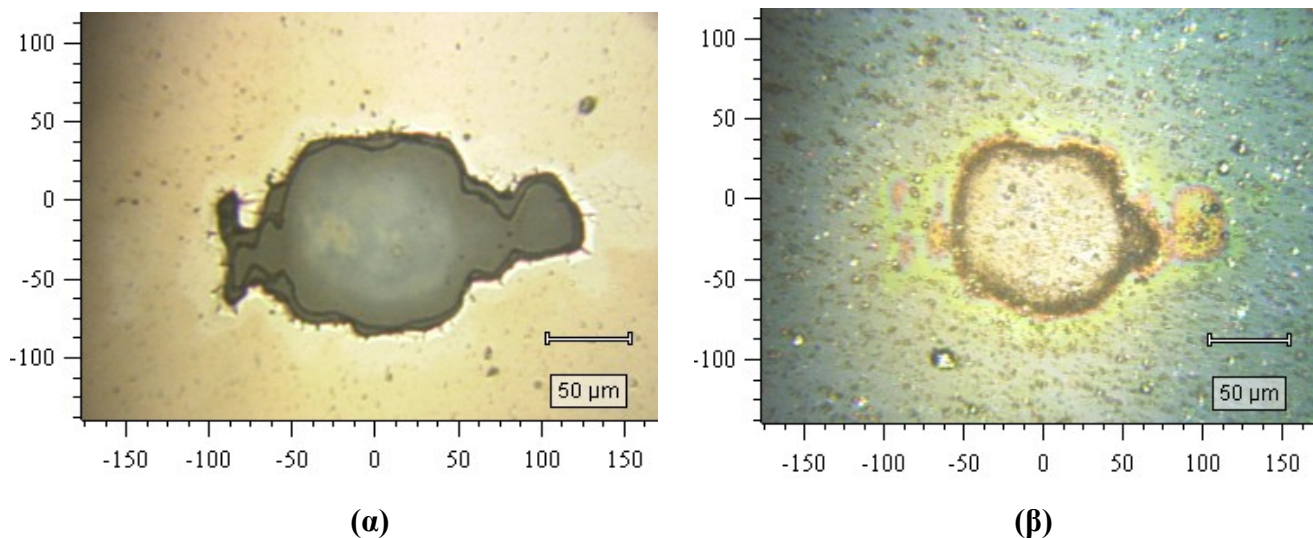
Η επόμενη παρατήρηση αφορά την ύπαρξη και μορφή των απολήξεων στην επιφάνεια που εμφανίζεται στο Σχήμα 6.32.[β]. Βλέπουμε, στο δεξί τμήμα της κυρίως (μεγάλης) επιφάνειας, μία απόληξη που είναι μικρή, καθώς είναι ενδεικτική της χαμηλότερης έντασης του Laser που προσέπεσε αλλά και απορροφήθηκε από το δοκίμιο (0.16 mJ από τα 2 της πλήρους έντασης, καθότι ο συντελεστής απορρόφησης του Al, όπως έχουμε δει και προηγουμένως, ορίζεται στο 8%). Η κυκλική επιφάνεια που βρίσκεται, στο Σχήμα [α], δεξιότερα της κύριας, και φαίνεται να έχει αποδομηθεί ως ένα σημείο, παύει να υφίσταται στην περίπτωση της διπλανής εικόνας. Με άλλα λόγια, η ελάττωση της έντασης κατά 1 mJ οδηγεί σε μία μικρή κυκλική κηλίδα που έχει απλά υποστεί έντονη αύξηση θερμοκρασίας λόγω των προσπιπτούσων ακτίνων κατά τη διάρκεια του παλμού, χωρίς όμως να φαίνεται κάποιο δείγμα φωτοαποδόμησης, όπως μπορούμε κάλλιστα να διαπιστώσουμε συγκρίνοντας τις δύο κηλίδες που έχουν

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

σημανθεί με κίτρινο και μπλε χρώμα, στις δύο εικόνες που περιλαμβάνονται στο Σχήμα 6.32.. Συγκεκριμένα, το κίτρινο πλαίσιο αφορά κηλίδα από την οποία έχει λάβει χώρα μερική αφαίρεση υλικού, ενώ μέσα στο μπλε πλαίσιο παρατηρούμε ότι η ίδια κηλίδα ανήκει απλά στη *θερμικά επηρεασμένη ζώνη*, ταυτόχρονα με τις περιοχές που παρουσιάζουν κίτρινη και πράσινη απόχρωση (έξω από την καφέ περιφέρεια).

Μπορούμε πάντως να αναφέρουμε, ως κοινό στοιχείο με την περίπτωση του Mo (καθώς η ενέργεια ελαττώνεται από τα 3 στα 2 mJ), ότι η μείωση της ενέργειας οδηγεί σε τελικές επιφάνειες που λαμβάνουν πιο ομοιογενές σχήμα, που φαίνεται τόσο από το στρογγύλευμα των άκρων της περιφέρειας και τη λιγότερο έντονη ύπαρξη ακανόνιστων διαβαθμίσεων στην περιφέρεια, όσο και από το γεγονός ότι οι εμφανιζόμενες απολήξεις καταλαμβάνουν μικρότερο τμήμα της συνολικά προσβεβλημένης επιφάνειας.

Σε αυτό το σημείο, μπορεί να παίξει σημαντικότατο ρόλο στην ανάλυσή μας μία πιθανή σύγκριση των εξαχθέντων αποτελεσμάτων για το Mo και το Al, λαμβάνοντας υπόψη ίδιες τιμές ενέργειας παλμού Laser (2 mJ) και μεγέθους διαφράγματος (1.5 μm). Αυτή μπορεί να γίνει, σε οπτικό επίπεδο, με τη βοήθεια του παρακάτω Σχήματος 6.33., όπου τα Σχήματα 6.32.[β] και 6.20.[β] παρατίθενται το ένα δίπλα στο άλλο και συγκρίνονται μεταξύ τους:



Σχήμα 6.33. Παράθεση και σύγκριση ακτινοβοληθεισών περιοχών από τα δύο λεπτά υμένια από Mo [a] και Al [β], τα οποία χρησιμοποιήθηκαν κατά τη διάρκεια των πειραμάτων στο EIE, για ενέργεια δέσμης Laser 2 mJ, μέγεθος διαφράγματος 1.5 μm και κλίμακα μεγέθυνσης στο μικροσκόπιο 50 μm.

Και σε αυτή την περίπτωση, είναι εμφανές το πολύ χαμηλότερο εμβαδό της προσβεβλημένης και (μερικώς) φωτοαποδομημένης επιφάνειας του υμενίου από Al, σε σχέση με αυτό που αποτελείται από Mo, λόγω προφανώς της ανακλαστικής φύσης του Al. Αυτή η διαπίστωση μπορεί να γίνει και σε ποσοτικό επίπεδο, μέσω της παράθεσης των διαστάσεων της επιφάνειας που δημιουργήθηκε από τον

Gaussian παλμό στο υμένιο από Al. Ο προσδιορισμός τους είναι απλός και βασίζεται στην ίδια διαδικασία που ακολουθήθηκε τόσο στην Υποενότητα 6.7., όσο και στα προηγούμενα Εδάφια της τρέχουσας Υποενότητας (6.8.). Εστιάζουμε, λοιπόν, το Σχήμα 6.33.[β] σε έναν υψηλό βαθμό μεγέθυνσης, μέσα από το Microsoft Office Picture Manager, και φτάνουμε σε ένα σημείο όπου τα 50 μm της αναγραφόμενης κλίμακας (σύμφωνα με την απεικόνιση στο μικροσκόπιο) αντιστοιχούν στο ίδιο μήκος των 2.35 cm πάνω στο υποδεκάμετρο, όπως και στην πλειονότητα των περιπτώσεων που έχουμε ήδη εξετάσει. Μετράμε λοιπόν την οριζόντια και κατακόρυφη διάσταση του χωρίου που περικλείεται από το σκούρο καφέ πλαίσιο, φέροντας παράλληλες γραμμές προς τους δύο άξονες από τα οριζόντια και κατακόρυφα μέσα της περιφέρειας (αριστερά και πάνω, αντίστοιχα). Η οριζόντια διάσταση a και η κατακόρυφη b υπολογίζονται ως εξής:

- $a = 6.1 \cdot 21.277 = 129.7897 \mu m$
- $b = 4.9 \cdot 21.277 = 104.2573 \mu m$

Εάν συγκρίνουμε τις παραπάνω τιμές με τις αντίστοιχες διαστάσεις των $187.2376 \mu m$ και $112.7681 \mu m$ που αφορούν την περιοχή του υμενίου από Al που ακτινοβολήθηκε με το nanosecond παλμό έντασης 3 mJ, θα διαπιστώσουμε ότι η κατακόρυφη διάσταση έχει μειωθεί ελαφρώς και η οριζόντια δραματικά. Αυτή η μεγάλη μείωση της τιμής της οριζόντιας διάστασης δεν οφείλεται τόσο πολύ στην τιμή της ακτινοβολίας αυτή καθ'αυτή, όσο στο γεγονός ότι η συγκεκριμένη τιμή, σε συνδυασμό με την υψηλή ανακλαστικότητα του Al, δεν είναι αρκετή στο να προκαλέσει αφαίρεση υλικού, έστω και μερική, στην κηλίδα που βρίσκεται δεξιά της κυρίως ακτινοβολημένης επιφάνειας, με αποτέλεσμα αυτή η κηλίδα να αποτελεί τμήμα της *θερμικά επηρεασμένης ζώνης* και όχι της κυρίως προσβεβλημένης περιοχής.

Επίσης, εάν κάνουμε τη σύγκριση με τις τιμές $217.0254 \mu m$ και $127.662 \mu m$ που αφορούν τις διαστάσεις της επιφάνειας από Mo που ακτινοβολήθηκε και αποδομήθηκε (πλήρως) από Laser ίδιων συνθηκών (ενέργεια, διάμετρος διαφράγματος) με αυτές που εξετάστηκαν, μπορούμε να παρατηρήσουμε μία αρκετά σημαντική μείωση στις διαστάσεις (επηρεάζοντας ανάλογα και το εμβαδό, προφανώς), κάτι που οφείλεται τόσο στους παράγοντες που εξετάστηκαν στην προηγούμενη παράγραφο όσο και στην ιδιαίτερα υψηλή ανακλαστικότητα του Mo σε σχέση με το Al. Ποσοτικά, μπορούμε να πούμε ότι η αλλαγή του υλικού από Mo σε Al επιφέρει ελάττωση της οριζόντιας διάστασης κατά $\frac{217.0254 - 129.7897}{217.0254} \cdot 100\% = 40.2\%$ και της κατακόρυφης κατά $\frac{127.662 - 104.2573}{127.662} \cdot 100\% = 18.33\%$.

Από τη στιγμή που, στα πλαίσια της περίπτωσης που εξετάζουμε, η προσβεβλημένη επιφάνεια (με τη μερική φωτοαποδόμηση που υπέστη, προφανώς χωρίς σχηματισμό διακριτών οπών, όπως έχουμε δει και στο προηγούμενο Εδάφιο) αποτελείται από μία ακέραια ενότητα (δεν υπάρχει π.χ. κάποια χωριστή

κηλίδα υπολογίσιμου εμβαδού), η σχέση υπολογισμού του εμβαδού $A = \frac{\pi\alpha\beta}{4}$ μπορεί να χρησιμοποιηθεί αυτούσια, χωρίς επιπλέον παρατηρήσεις, δίνοντάς μας τελικά, για το τρέχον δοκίμιο από Al, ότι:

$$A = \frac{\pi \cdot 129.7897 \cdot 104.2573}{4} = 10627.6339 \mu\text{m}^2 = 1.06276 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2 \quad (6.17)$$

που οδηγεί σε μία τιμή της ροής (έντασης) ακτινοβολίας Laser που θα υπολογιστεί ακολούθως:

$$F = \frac{E_{LASER}}{A} = \frac{2 \cdot 10^{-3} [J]}{1.06276 \cdot 10^{-4} [cm^2]} = 18.818924 J/cm^2 \quad (6.18)$$

Συγκριτικά με την τιμή $19.882033 J/cm^2$ που αντιστοιχεί στη ροή (fluence) ακτινοβολίας για ενέργεια παλμού 3 mJ, είναι εύκολο να διαπιστωθεί ότι η ελάττωση της ενέργειας στα 2 mJ επιφέρει ελάχιστη μεταβολή στην εξεταζόμενη τιμή, μειώνοντάς την κατά ένα μικρό ποσοστό, $\frac{19.882033 - 18.818924}{19.882033} = 5.35\%$. Καθότι η ροή ακτινοβολίας είναι ένα μέγεθος που ουσιαστικά

αναπαριστά την έντασή της, μπορούμε να πούμε ότι αυτή μειώνεται λίγο, κάτι που αναμένεται, εφόσον οι γραφικοί συσχετισμοί του Σχήματος 6.24. ικανοποιούνται, να οδηγήσει το μέγεθος της απόδοσης φωτοαποδόμησης σε μικρή άνοδο. Κάτι τέτοιο θα χρειαστεί να αποδειχθεί (ή να διαψευσθεί) παραθέτοντας ποσοτικά αποτελέσματα για το υπόψη μέγεθος, κάτι που θα γίνει σε επόμενο εδάφιο.

Το σίγουρο είναι ότι η υπολογισθείσα ροή ακτινοβολίας είναι σαφέστατα υψηλότερη, έως και λίγο παραπάνω από 2 φορές, σε σχέση με την αντίστοιχη τιμή που υπολογίστηκε για ακτινοβολία Mo κάτω από τις ίδιες ακριβώς συνθήκες ($9.188516 J/cm^2$, όπως αναφέρει χαρακτηριστικά και ο Πίνακας 6.1. για την περίπτωση 5). Το αντίστοιχο ποσοστό αύξησης είναι $\frac{18.818924 - 9.188516}{9.188516} = 104.81\%$ και είναι

άμεση συνέπεια της δραστηκής ελάττωσης της ακτινοβολημένης και μερικώς φωτοαποδομημένης περιοχής, η οποία, όπως έχουμε δει σε όλες τις προηγούμενες περιπτώσεις των Υποενοτήτων 6.7. και 6.8., βρίσκεται στον παρονομαστή του λόγου υπολογισμού της ροής (έντασης) ακτινοβολίας.

Με τον ίδιο τρόπο που υπολογίστηκε η έκταση της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ) στο προηγούμενο Εδάφιο, θα την υπολογίσουμε και τώρα. Είναι ιδιαίτερα ενδιαφέρον να δούμε το πώς η ελάττωση της έντασης από τα 3 στα 2 mJ, με δεδομένη την υψηλή ανακλαστικότητα του Al, μπορεί να παίζει το ρόλο της στη διαμόρφωση της περιοχής που ναι μεν έχει υποστεί θερμοκρασιακή ανύψωση είτε λόγω της προσπίπτουσας ακτινοβολίας είτε έχοντας τη διάχυση θερμότητας εντός του υλικού ως αιτία, αλλά δε χαρακτηρίζεται από την αφαίρεση μέρους του υλικού που περιλαμβάνει. Αρχικά, υπολογίζουμε τις διαστάσεις α' και β' , τις οποίες έχουμε ορίσει, όπως ακριβώς και στο Εδάφιο 6.8.1., ως τις οριζόντιες και κατακόρυφες αποστάσεις μεταξύ των δύο απέναντι άκρων της HAZ. Το εμβαδό της έκτασης που

περιλαμβάνει τόσο τη HAZ όσο και τη μερικώς φωτοαποδομημένη περιοχή θα υπολογιστεί με την ήδη γνωστή γενικευμένη σχέση $A' = \frac{\pi \alpha' \beta'}{4}$, ενώ το εμβαδό της HAZ θα είναι η διαφορά $A' - A$ (όπου A το εμβαδό της ακτινοβολημένης περιοχής). Η εστίαση (zoom) στην οποία περιέρχεται η εικόνα του Σχήματος 6.33.[β] θα είναι, όπως και παραπάνω, ίση με 21.277 μm ανά 1 cm του υποδεκάμετρου. Έχουμε λοιπόν τα εξής:

- $\alpha' = 10.4 \cdot 21.277 = 221.281 \mu\text{m}$
- $\beta' = 6.8 \cdot 21.277 = 144.684 \mu\text{m}$

Πριν προχωρήσουμε στον υπολογισμό των εμβαδών, είναι άξια προσοχής η κηλίδα του Σχήματος 6.30. που έχει κλειστεί σε μπλε ελλειπτικό πλαίσιο. Το χρώμα που έχει αποκτήσει είναι ενδεικτικό του ότι έχει επηρεαστεί θερμικά από την ακτινοβολία, όχι όμως σε τέτοιο βαθμό ώστε να οδηγήσει σε αποδόμηση της επιφάνειας. Για αυτό το λόγο, θεωρούμε ότι αυτή η ελλειπτική περιοχή ανήκει στη HAZ. Επίσης, περιμετρικά της περιοχής αυτής εμφανίζεται ένας ελαφρύς αποχρωματισμός που είναι και αυτός ενδεικτικός της εμφάνισης HAZ. Για αυτό το λόγο, θεωρήσαμε ότι θα μας έδινε πιο ακριβή αποτελέσματα ο υπολογισμός ενός ενιαίου εμβαδού, λαμβάνοντας υπόψη τις διαστάσεις α' και β' , από ό,τι η θεώρηση μίας περιοχής ξεχωριστής από την κηλίδα, για την οποία η αριθμητική τιμή του εμβαδού της HAZ θα μπορούσε να βρεθεί ξεχωριστά.

Με βάση τα παραπάνω, υπολογίζουμε το εμβαδό $A' = \frac{\pi \cdot 221.281 \cdot 144.684}{4} = 25145.1664 \mu\text{m}^2 = 2.51452 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$, αλλά και την έκταση της HAZ:

$HAZ = A' - A = (2.51452 - 1.06276) \cdot 10^{-4} = 1.45176 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$. Σε σύγκριση με την τιμή $1.1392 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$ που αναφέρεται στην αντίστοιχη HAZ για το Mo (όπου ο παλμός Laser που χρησιμοποιήθηκε για την ακτινοβολήση έχει ίδια ένταση και διέρχεται από διάφραγμα ίδιας διαμέτρου),

η παρούσα HAZ είναι μεγαλύτερη κατά $\frac{1.45176 - 1.1392}{1.1392} = 27.44\%$ σε έκταση, πράγμα που είναι

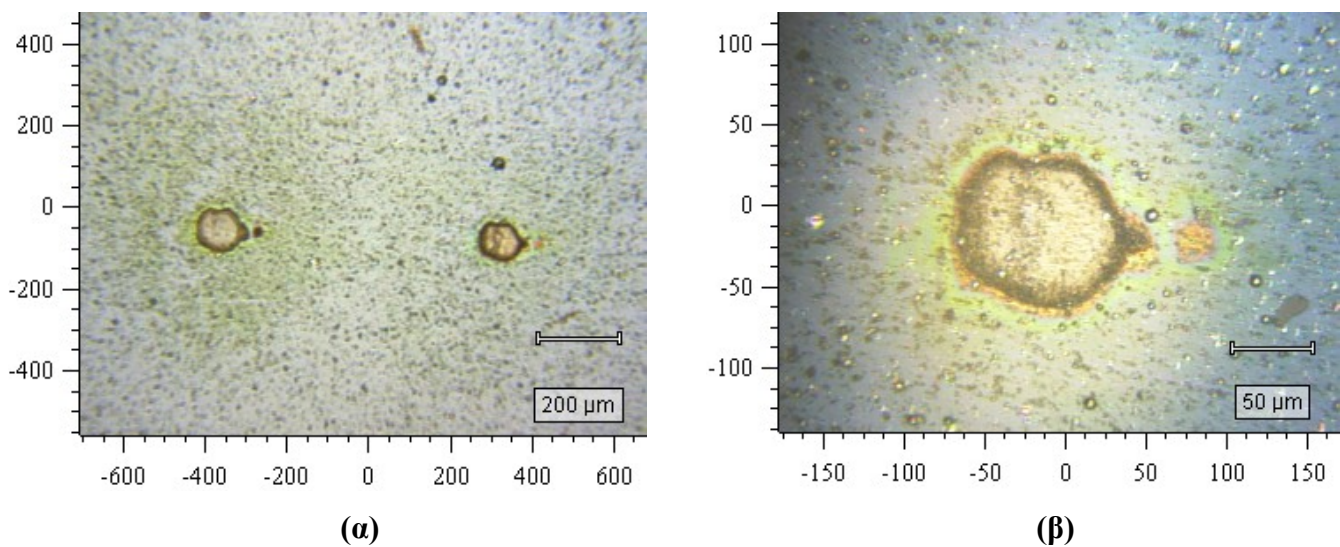
ενδεικτικό του γεγονότος ότι η περιοχή φωτοαποδόμησης περιορίζεται σημαντικά στο Al, κυρίως λόγω της σαφώς μειωμένης απορροφητικότητάς του. Εξακολουθεί πάντως η δέσμη Laser να οδηγεί στη δημιουργία θερμικά επηρεασμένων ζωνών σημαντικής έκτασης, όπως και στην περίπτωση του Εδαφίου 6.8.1.. Πάντως, εάν γίνει η σύγκριση με την τιμή $2.3738 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2$ για τη HAZ που σχηματίζεται περιμετρικά του Spot στο αλουμινένιο υμένιο, που ακτινοβολήθηκε με παλμό έντασης 3 mJ, θα διαπιστώσουμε ότι, επί του παρόντος, αυτή μειώνεται σημαντικά, λίγο λιγότερο από ό,τι στο μισό. Η

ποσοστιαία μείωση είναι της τάξης του $\frac{2.3738 - 1.45176}{2.3738} \cdot 100\% = 38.84\%$, πράγμα που σημαίνει ότι η

ένταση των 2 mJ, που μεταφράζεται σε εκμεταλλεύσιμη ένταση 0.16 mJ για το Al (συντελεστής απορρόφησης = 8%), οδηγεί σε λιγότερο εκτεταμένη HAZ και όχι μόνο στενότερη περιοχή φωτοαποδόμησης.

6.8.3. Spot δοκιμίου Al ακτινοβολημένο με παλμό nanosecond Laser ενέργειας 1 mJ

Ενδιαφέρον έχει να δούμε το πώς η πρόσπτωση Gaussian δέσμης Laser αποτελούμενης από nanosecond παλμούς (διάρκειας 10 ns, όπως έχουμε δει και στα πλαίσια της περιγραφής της πειραματικής διάταξης) ενέργειας 1 mJ, που είναι η μικρότερη από τις τρεις ενέργειες που ρυθμίστηκαν στη συσκευή Nd:YAG Laser μέσα στο ΕΙΕ. Το ενδιαφέρον εντοπίζεται καταρχήν στο γεγονός ότι, επειδή ο συντελεστής απορρόφησης του Al είναι μόλις 8%, μόνο 0.08 mJ από την ολική αυτή ενέργεια θα απορροφηθούν από το υλικό, πράγμα που επηρεάζει προφανώς και τον αριθμό των απορροφούμενων φωτονίων. Αναμένουμε οι ενδείξεις φωτοαποδόμησης πάνω στο υλικό να είναι ιδιαίτερα περιορισμένες, κάτι όμως που θα πρέπει να διαπιστωθεί παραθέτοντας τα οπτικά αποτελέσματα για την εγχάραξη (scribing) που έλαβε χώρα με αυτά τα δεδομένα. Αυτά παρατίθενται ακολούθως, στο Σχήμα 6.34.:



Σχήμα 6.34. Απεικονίσεις των ακτινοβοληθεισών περιοχών (spots) πάνω στο λεπτό υμένιο από Al, με nanosecond παλμούς Laser ενέργειας 1 mJ. [α] Και τα δύο spots που ακτινοβολήθηκαν, [β] Το ένα από τα δύο προαναφερθέντα spots, σε μεγαλύτερη μεγέθυνση.

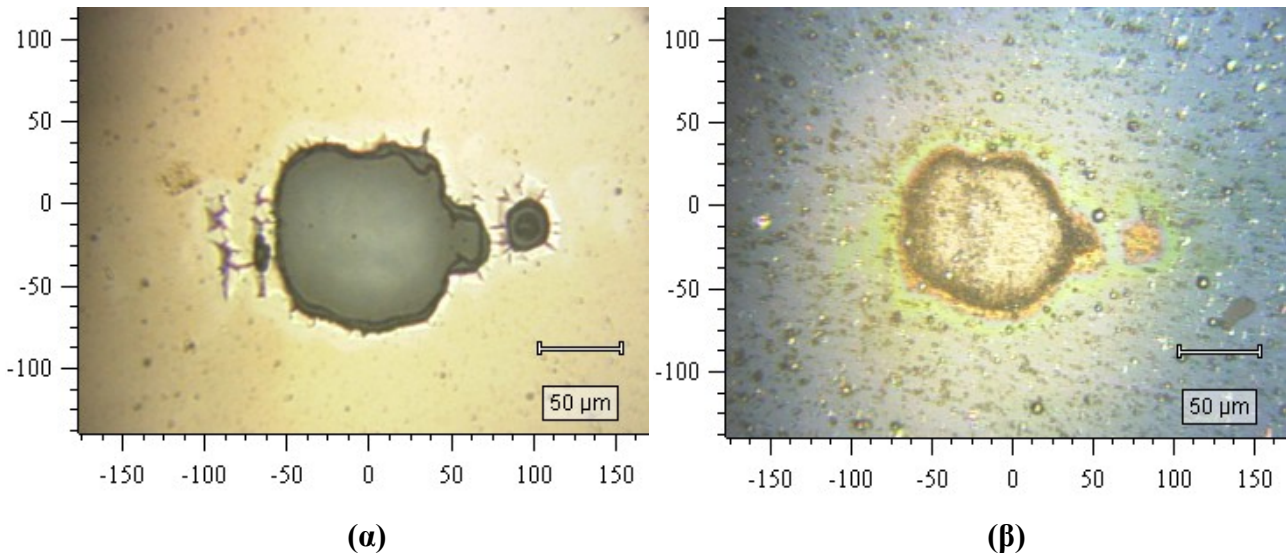
Είναι αρχικά ιδιαίτερα εμφανές το γεγονός ότι η ακτινοβολία ενέργειας 1 mJ είναι πάρα πολύ ασθενής ώστε να μπορέσει να έχει ιδιαίτερα υψηλή επίδραση στην ακτινοβολούμενη επιφάνεια, πέρα από την ανύψωση της θερμοκρασίας της, την τήξη ορισμένων τμημάτων και την απομάκρυνση κάποιων ατόμων, χωρίς ωστόσο να αποδομείται πλήρως η υπόψη περιοχή. Το αποτέλεσμα της ακτινοβολήσης των δύο spots είναι ισάριθμες επιφάνειες που είναι ιδιαίτερα μικρές σε έκταση, συγκριτικά τόσο με αυτές του Mo

όσο και με εκείνες που, ανεξαρτήτως υλικού, προέκυψαν από ακτινοβολήση με Laser ενέργειας 3 και 2 mJ.

Είναι επίσης σημαντικό να δούμε ότι οι τελικές επιφάνειες στο Al είναι ακόμα πιο ομοιόμορφες σε σχέση με τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν στα δύο προηγούμενα Εδάφια, κάτι που οφείλεται τόσο στη χαμηλότερη ενέργεια Laser, τόσο στο κέντρο όσο και στις γειτονικές θέσεις επί του επιπέδου XY (λόγω ικανοποίησης του Gaussian προφίλ της δέσμης Laser), όσο και σε μικρότερη παραμόρφωση της δέσμης. Αυτή η παραμόρφωση δεν παύει βέβαια να υφίσταται, λόγω ατελούς ευθυγράμμισης, με την τέλεια να είναι πολύ δύσκολο να επιτευχθεί ακόμα και από τον πιο έμπειρο και εξειδικευμένο χειριστή. Κάτι τέτοιο δικαιολογείται από τη μικρή καφέ κηλίδα που εμφανίζεται στο Σχήμα 6.34.[α], λόγω εκτροπής κάποιων ακτίνων της δέσμης από την ιδανική θέση που θα είχαν στο πλήρως ευθυγραμμισμένο (δηλαδή, με μηδενική παραμόρφωση) προφίλ Gauss.

Πάντως, στο δεξιότερο από τα δύο spots, εμφανίζεται μία πολύ μικρή κηλίδα με σκούρο καφέ χρώμα, η οποία έχει προσκολληθεί στην κυρίως επιφάνεια του υμενίου και παίζει το ρόλο της *απόληξης*, ή του «*αυτιού*». Είναι μία περιοχή στην οποία δε συντελείται έντονη απορρόφηση ενέργειας, κάτι που μπορεί να εξαχθεί λαμβάνοντας υπόψη το ιδιαίτερα μικρό μέγεθος της απόληξης. Επιπρόσθετα, είναι εύκολο να παρατηρήσουμε, όπως είδαμε και στο Σχήμα 6.33.[β], ότι εμφανίζεται μία καφέ κυκλική κηλίδα ακόμα δεξιότερα, της οποίας η απόχρωση δεν είναι έντονη (σκούρα), με το χρώμα να φέρνει λίγο προς πορτοκαλί ή κόκκινο, ενδεικτικό του γεγονότος ότι ουσιαστικά δεν έχει λάβει χώρα φωτοαποδόμηση, παρά μόνο σε πολύ μικρό βαθμό, αλλά θερμικός επηρεασμός. Με βάση τις παραπάνω παραδοχές, είναι φυσικό και δικαιολογημένο ότι αυτή η κηλίδα δε θα ληφθεί υπόψη στο μετέπειτα υπολογισμό τόσο της προσβεβλημένης και (εν μέρει) φωτοαποδομημένης επιφάνειας, ταυτόχρονα με την ένταση ή ροή της ακτινοβολίας Laser που θα εξαχθεί ως τελικό αποτέλεσμα.

Συγκρίνουμε τώρα, με τη βοήθεια του Σχήματος 6.35., τις ακτινοβοληθείσες επιφάνειες από Mo και Al που αφορούν προσβολή αυτών με Laser ενέργειας 1 mJ και διάμετρο διαφράγματος 1.5 μm, ώστε και εδώ να παρατηρήσουμε το πώς η αλλαγή του υλικού επιφέρει μεταβολές στο φαινόμενο της φωτοαποδόμησης και στις συνέπειες που αυτό προκαλεί πάνω στα υμένια:



Σχήμα 6.35. Παράθεση και σύγκριση ακτινοβοληθεισών περιοχών από τα δύο λεπτά υμένια από Mo [α] και Al [β], τα οποία χρησιμοποιήθηκαν κατά τη διάρκεια των πειραμάτων στο EIE, για ενέργεια δέσμης Laser 1 mJ, μέγεθος διαφράγματος 1.5 μm και κλίμακα μεγέθυνσης στο μικροσκόπιο 50 μm.

Είναι εμφανές, από την παραπάνω σύγκριση, ότι οι σχηματιζόμενες επιφάνειες είναι ιδιαίτερα μικρές και στις δύο περιπτώσεις, με αυτή που αντιστοιχεί στο Al να είναι κάπως μικρότερη λόγω της ανακλαστικότητας του υμενίου. Αυτός ο παράγοντας (δηλαδή η ανακλαστικότητα) επηρεάζει και την έκταση της HAZ, η οποία είναι και αυτή μικρότερη στο Al από ό,τι στο Mo.

Σημειώνεται επίσης ότι, σε διάφορα σημεία πάνω στη HAZ και περιμετρικά αυτής, στο Σχήμα 6.35.[β], ορισμένες μικροσκοπικές κηλίδες που εμφανίζονται (π.χ. με άσπρο χρώμα) είναι ενδεικτικές της εκτίναξης υλικού, είτε σε μορφή στερεών υπολειμμάτων (debris) είτε στερεοποιημένου τήγματος. Τέτοιες κηλίδες παρουσιάζονται με γκρι χρώμα σε ακραίες περιοχές του Σχήματος 6.35.[α], υποδηλώνοντας και σε αυτή την περίπτωση τα παραπάνω (δηλαδή την εκτίναξη υλικού στερεάς ή υγρής φάσης).

Στην περίπτωση του Al, υπολογίζουμε τις οριζόντιες και κατακόρυφες διαστάσεις με τον ίδιο τρόπο που αυτές βρέθηκαν σε όλες τις περιπτώσεις που έχουν ήδη εξεταστεί. Η εστίαση (zoom) πάνω στο Σχήμα 6.35.[β] θα είναι η ίδια με προηγούμενες περιπτώσεις, δηλαδή 21.277 μm για κάθε cm πάνω στο υποδεκάμετρο. Σε αυτή την περίπτωση, οι διαστάσεις a και b θα λάβουν τις εξής τιμές:

- $a = 5.35 \cdot 21.277 = 113.8320 \mu\text{m}$
- $b = 4.2 \cdot 21.277 = 89.3634 \mu\text{m}$

Καταρχήν, παρατηρούμε για πρώτη φορά στις δύο Υποενότητες 6.7. και 6.8., ότι μία διάσταση της ακτινοβοληθείσας επιφάνειας είναι χαμηλότερη από τα 100 μm, κάτι που συμβαίνει κατά πάσα πιθανότητα τόσο λόγω της χαμηλής τιμής της προσπίπτουσας ακτινοβολίας, όσο και λόγω του

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

συντελεστή απορρόφησης 8% στο Al. Η ποσοστιαία μείωση σε κάθε μία από τις διαστάσεις είναι, σε σχέση με την περιοχή του υμενίου από Al που ακτινοβολήθηκε με Laser 2 mJ, ίση με $\frac{129.7897-113.8320}{129.7897}=12.3\%$ για την οριζόντια διάσταση και $\frac{104.2573-89.3634}{104.2573}=14.29\%$,

υποδηλώνοντας ουσιαστικά μείωση σε εύλογο ποσοστό καθώς ελαττώνουμε την ενέργεια. Συγκριτικά τώρα με την περίπτωση της επιφάνειας 6.27.[α], που αντιστοιχεί σε ίδιες συνθήκες φωτοαποδόμησης αλλά με το Mo υλικό στόχου (βλέπε A/A Spot 6 στον Πίνακα 6.1.), τα αντίστοιχα ποσοστά ελάττωσης

υπολογίζονται σε $\frac{150.008-113.832}{150.008}=24.12\%$ για την οριζόντια διάσταση και $\frac{110.64-89.3634}{110.64}=19.23\%$ για την κατακόρυφη. Τα παραπάνω υποδηλώνουν ότι η αλλαγή του υλικού,

κυρίως από άποψη ανακλαστικότητας, παίζει πολύ σημαντικότερο ρόλο από τη μεταβολή της ενέργειας του Laser κρατώντας το υλικό ίδιο.

Και εδώ, η επιφάνεια που αναπαριστάται οπτικά στο Σχήμα 6.35.. και οριοθετείται από την καφέ σχεδόν κυκλική περιφέρεια (εκτός της οποίας απλά εμφανίζεται θερμικός επηρεασμός), έχει εμβαδό που μπορεί να υπολογιστεί από τη γενικευμένη σχέση $A = \frac{\pi \alpha \beta}{4}$, λαμβάνοντας υπόψη τις ήδη γνωστές διαστάσεις του συγκεκριμένου χωρίου. Έχουμε επομένως τα εξής:

$$A = \frac{\pi \cdot 113.832 \cdot 89.3634}{4} = 7989,3957 \mu\text{m}^2 = 7.9894 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \quad (6.19)$$

με την ένταση (ροή / fluence) ακτινοβολίας Laser να λαμβάνει την παρακάτω τιμή:

$$F = \frac{E_{\text{LASER}}}{A} = \frac{1 \cdot 10^{-3} [\text{J}]}{7.9894 \cdot 10^{-5} [\text{cm}^2]} = 12.516584 \text{ J/cm}^2 \quad (6.20)$$

Μπορούμε λοιπόν να διαπιστώσουμε ότι η ροή της ακτινοβολίας είναι αισθητά μειωμένη σε σχέση με τις περιπτώσεις ακτινοβολίας με παλμούς Laser ενέργειας 3 και 2 mJ. Ειδικά αν γίνει η σύγκριση με την τελευταία κατάσταση (ενέργεια 2 mJ), μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η τιμή του fluence δε μένει σταθερή, απλά γιατί ο βαθμός μείωσης της ακτινοβολημένης (και μερικώς φωτοαποδομημένης) επιφάνειας είναι αρκετά μικρότερος σε σχέση με τον αντίστοιχο βαθμό ελάττωσης της ενέργειας του

Laser. Η ενέργεια του Laser μειώνεται κατά 50% και το εμβαδό κατά $\frac{10.6276-7.9894}{10.6276}=12.52\%$, με

αποτέλεσμα η σχετικά αυξημένη ποσότητα στον παρονομαστή της (6.20) να μειώνει την αριθμητική τιμή του τελικού αποτελέσματος. Για λόγους πληρότητας, αναφέρουμε ότι η ροή της ακτινοβολίας Laser

υφίσταται ελάττωση σε βαθμό $\frac{18.818924-12.516584}{18.818924}=33.49\%$, σε σχέση με το σκέλος του πειράματος

που εξετάσαμε στο Εδάφιο 6.8.2.. Αρχικά μπορούμε να υποθέσουμε, με βάση και το διάγραμμα που εμφανίζεται στο Σχήμα 6.22. (έστω και αν αυτό αναφέρεται στο Mo), ότι αυτή η μείωση στην ένταση μπορεί παρ'όλα αυτά να κάνει τη διαδικασία φωτοαποδόμησης περισσότερο αποδοτική, μέσω του αντιπροσωπευτικού μεγέθους της απόδοσης φωτοαποδόμησης. Λαμβάνοντας όμως υπόψη ότι οι συνθήκες αλλάζουν σημαντικά, καθώς πλέον το υλικό μας δεν είναι το Mo αλλά το Al, μένει να δούμε, στη συνέχεια της ανάλυσης μας, εάν αυτή η υπόθεση που μπορούμε να κάνουμε είναι βάσιμη.

Τέλος, αξίζει να σημειωθεί ότι η αλλαγή του υλικού από Mo σε Al, διατηρώντας όλες τις υπόλοιπες συνθήκες του πειράματός μας σταθερές και αμετάβλητες, έχει τη δυνατότητα να επιφέρει μείωση κατά $\frac{12.516584 - 10.06257}{10.06257} = 24.39\%$ στην ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας (ροή ακτινοβολίας), πράγμα που αξίζει να προσεχθεί στη συνέχεια της ανάλυσης μας, αναφορικά με την αποδοτικότητα που μπορεί να έχει το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης.

Η πτώση της ενέργειας του παλμού Laser στο 1 mJ, με δεδομένο και το γεγονός ότι το Al είναι πολύ ανακλαστικό περιεχόμενο, δίνουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον στον υπολογισμό της έκτασης της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ) για την παρούσα περίπτωση ακτινοβολήσης. Ο τρόπος υπολογισμού της δε διαφέρει από αυτά που αναφέρθηκαν στα προηγούμενα Εδάφια 6.8.1. και 6.8.2., και λαμβάνοντας υπόψη ότι μπορεί να οδηγήσει σε αποτελέσματα ρεαλιστικά και σχετικά ακριβή, μπορεί να χρησιμοποιηθεί και επί του παρόντος. Λαμβάνοντας υπόψη μία σταθερή αντιστοιχία σε μήκη και πλάτη πάνω στο Σχήμα 6.35.[β], έχοντας εφαρμόσει εστίαση (zoom) σε τέτοιο βαθμό, ώστε το 1 cm του υποδεκάμετρου να αντιστοιχεί σε 21.277 μm της κλίμακας της εικόνας, μπορούμε να υπολογίσουμε την οριζόντια και κατακόρυφη απόσταση μεταξύ των άκρων της HAZ ως εξής: (τις συμβολίζουμε, όπως και παραπάνω, με α' και β' αντίστοιχα)

- $\alpha' = 9.1 \cdot 21.277 = 193.621 \mu m$
- $\beta' = 6 \cdot 21.277 = 127.662 \mu m$

Μπορούμε να θεωρήσουμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, ότι όλη η περιοχή που περικλείεται από την πράσινη κλειστή καμπύλη, στο Σχήμα 6.35.[β], ανήκει στη θερμικά επηρεασμένη ζώνη (HAZ). Κάτι τέτοιο δεν αποκλίνει από την πραγματικότητα, καθώς και η κηλίδα ανοικτού καφέ χρώματος φαίνεται ότι απλά έχει θερμανθεί σημαντικά, χωρίς ωστόσο να έχει συντελεστή απομάκρυνση υλικού, ενώ και η μικρή περιοχή αριστερά της έχει υποστεί έναν ελαφρύ αποχρωματισμό, με την απόχρωση του μπλε που εμφανίζεται να είναι αρκετά ανοικτή και να προσεγγίζει, σε κάποιο βαθμό, το λευκό χρώμα.

Το εμβαδό A' , από το οποίο θα υπολογιστεί τελικώς η HAZ, είναι ίσο με $A' = \frac{\pi \cdot 193.621 \cdot 127.662}{4} = 19413.5064 \mu m^2 = 1.94135 \cdot 10^{-4} cm^2$, με αποτέλεσμα η έκταση της HAZ να

ισούται με $A' - A = (1.94135 - 0.79894) \cdot 10^{-4} = 1.14241 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2$. Διεξάγοντας τη σύγκριση με την περίπτωση ακτινοβολήσης ενός Spot πάνω στο υμένιο από Mo, λαμβάνοντας υπόψη τα ίδια χαρακτηριστικά για τη δέσμη (ένταση 1 mJ) και το διάφραγμα (μέγεθος 1.5 μm), παρατηρούμε ότι η σχηματιζόμενη HAZ στο Al είναι μικρότερη από ό,τι στο Mo (1.3977 cm^2), κατά ένα ποσοστό $\frac{1.3977 - 1.14241}{1.3977} \cdot 100\% = 18.27\%$. Αυτή η διαπίστωση έρχεται σε πλήρη αντίθεση με τις περιπτώσεις

ακτινοβολήσης με Laser μεγαλύτερης έντασης, στα οποία εμφανίζεται εκτεταμένη HAZ στο Al από ό,τι στο Mo. Αυτή η διαφορά έχει να κάνει κατά κύριο λόγο με το γεγονός ότι η ένταση του παλμού Laser που εφαρμόζεται είναι πολύ χαμηλή για το Al. Καθώς τα 0.92 mJ αυτής της έντασης ανακλώνται και τα υπόλοιπα 0.08 μόνο απορροφώνται, είναι πολύ λογικό ότι η θερμοκρασιακή ανύψωση, αλλά και η θερμική διάχυση κατά το επίπεδο XY, θα είναι φαινόμενα ιδιαίτερα περιορισμένα. Ενδεχομένως αυτές οι παρατηρήσεις, σε συνδυασμό με το χαμηλό εμβαδό της μερικώς (πολύ σημαντικό!) φωτοαποδομημένης επιφάνειας, να μας οδηγήσουν μέχρι και στην απόρριψη των χρησιμοποιηθέντων χαρακτηριστικών αν θέλουμε να τα εφαρμόσουμε σε μία τυπική κατεργασία εγχάραξης υμενίου για επαγγελματικές εφαρμογές. Ενδεχομένως μόνο αν θα επιθυμούσαμε να εφαρμόσουμε έναν απλό καθαρισμό της επιφάνειας από ανεπιθύμητες ακαθαρσίες, θα μπορούσαμε να τροποποιήσουμε την πειραματική μας διάταξη με έναν τέτοιο τρόπο. Το θετικό πάντως είναι το γεγονός ότι η περιορισμένη HAZ μπορεί και αυτή να αποτελέσει ένα δείγμα περισσότερο ομοιόμορφης και ποιοτικής φωτοαποδόμησης από ό,τι στις περιπτώσεις πρόσπτωσης εντονότερων παλμών Laser στην επιφάνεια του Al. Πάντως, ο μερικός βαθμός αυτής της φωτοαποδόμησης γενικά δεν κάνει το Al ένα ιδανικό υλικό για εφαρμογές scribing, με αποτέλεσμα να προτιμάται το Mo ή άλλα παρεμφερή υλικά, που έχουν ως βασικό γνώρισμα την υψηλότερη απορροφητικότητα.

6.8.4. Συγκεντρωτική παράθεση πειραματικών μετρήσεων και αποτελεσμάτων, για όλα τα spots από Al που έχουν ακτινοβοληθεί. Σύγκριση με τις περιπτώσεις ακτινοβολήσης spots από Mo. Εξαγωγή συμπερασμάτων.

Δύο είναι οι βασικοί σκοποί που επιδιώκουμε να επιτύχουμε στο παρόν Εδάφιο, και οι οποίοι μπορούν να εμπλουτίσουν και να ενισχύσουν τις διαπιστώσεις μας σχετικά με την επίδραση που ασκεί η διαδικασία της φωτοαποδόμησης σε λεπτά υμένια από Al και Mo, όταν αυτά ακτινοβοληθούν από μεμονωμένους nanosecond παλμούς Laser μεταβλητής ενέργειας (μεταξύ 1 και 3 mJ):

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

- Ο προσδιορισμός των μεταβολών της έκτασης της ακτινοβολημένης και μερικώς φωτοαποδομημένης περιοχής, της θερμικά επηρεασμένης ζώνης και της ροής (πυκνότητας ενέργειας) ακτινοβολίας Laser, στα spots του υμενίου από Al, συναρτήσει της ενέργειας του παλμού.
- Ο προσδιορισμός και ο σχολιασμός της επίδρασης του υλικού (Mo έναντι Al) στα υπολογισθέντα μεγέθη που αναφέρθηκαν παραπάνω, δίνοντάς μας με αυτό τον τρόπο μία πληρέστερη εικόνα για το πώς το υλικό επηρεάζει την εξέλιξη της φωτοαποδόμησης.

Η εκπλήρωση των παραπάνω σκοπών, η οποία θα γίνει ευκολότερα εφικτή παραθέτοντας τα συγκεντρωτικά αποτελέσματα από την ακτινοβολήση των δοκιμίων, έχει τη δυνατότητα να μας δώσει επαρκείς ενδείξεις σχετικά με την ποιότητα της φωτοαποδόμησης αλλά και την απόδοσή της, δηλαδή το λόγο του ακτινοβοληθέντος όγκου προς την ενέργεια του παλμού. Αξίζει πάντως να σημειωθεί ότι το τελευταίο μέγεθος θα μετρηθεί και ποσοτικά στη συνέχεια της Υποενότητας.

Αρχικά θα δώσουμε ιδιαίτερη προσοχή στον ακόλουθο Πίνακα 6.5., στον οποίο παρατίθενται ορισμένα σημαντικά αποτελέσματα που εξήχθησαν από την κατεργασία των spots από Al με τους παλμούς Laser, λαμβάνοντας την *ενέργεια παλμού* ως παράμετρο σύγκρισης. Αυτά περιλαμβάνουν την οριζόντια και κατακόρυφη διάσταση των ακτινοβοληθεισών περιοχών, το λόγο των δύο διαστάσεων, τα εμβαδά των περιοχών αυτών και τη ροή ακτινοβολίας Laser, ως λόγο της ενέργειας παλμού προς κάθε ένα από τα αντίστοιχα εμβαδά που αναφέρθηκαν προηγουμένως. Όπως και στην Υποενότητα 6.7., έτσι και εδώ οι τιμές των εκτάσεων της HAZ θα εξεταστούν σε ξεχωριστό Πίνακα.

A/A Spot	Ενέργεια Laser (mJ)	Οριζόντια διάσταση (μm)	Κατακόρυφη διάσταση (μm)	Λόγος διαστάσεων, D:E	Εμβαδό φωτοαποδομημένης επιφάνειας (μm ²)	Εμβαδό φωτοαποδομημένης επιφάνειας (nm ²)	Ροή ακτινοβολίας Laser (J/cm ²)
1	3	187.2376	112.7681	1.6604	1.50890E-04	150.890	19.882033
2	2	129.7897	104.2573	1.2449	1.06276E-04	106.276	18.818924
3	1	113.832	89.3634	1.2738	7.98940E-05	79.894	12.516591

Πίνακας 6.5. Παράθεση και σύγκριση μετρήσεων και αποτελεσμάτων που προέκυψαν από την πειραματική διαδικασία ακτινοβολήσης τριών διαφορετικών spots πάνω σε ένα λεπτό υμένιο από Mo, για διαφορετικές τιμές ενέργειας Laser και μέγεθος διαφράγματος 1.5 μm.

Το πρώτο πράγμα που μπορούμε να προσέξουμε, κοιτάζοντας τον παραπάνω Πίνακα, έχει να κάνει με το γεγονός ότι τόσο η οριζόντια όσο και η κατακόρυφη διάσταση του κυρίως ακτινοβολημένου (και μερικώς φωτοαποδομημένου) χωρίου ελαττώνεται με την ένταση του Laser. Δεν μπορούμε να πούμε γενικά ότι αυτή η εξάρτηση είναι αναλογική. Για να αποφανθούμε σχετικά με το αν είναι ή όχι, θα πρέπει

να επιστήσουμε την προσοχή μας στη στήλη του λόγου διαστάσεων, ο οποίος θα πρέπει να μένει πρακτικά σταθερός αν θέλουμε να μιλάμε για αναλογική σχέση. Η διαφορά της τιμής αυτής μεταξύ των περιπτώσεων 2 και 3 είναι πάρα πολύ μικρή, αλλά οι τιμές που αντιστοιχούν στα υπόψη Spot αποκλίνουν σημαντικά από αυτά που έχουμε δει και διαπιστώσει για το πρώτο (1). Σε αυτό, ο λόγος διαστάσεων είναι ίσος με 1.6604, δηλαδή $\frac{1.6604-1.2449}{1.2449} \cdot 100\% = 33.38\%$ σε σχέση με το 2^ο Spot και

$\frac{1.6604-1.2738}{1.2738} \cdot 100\% = 30.35\%$ συγκριτικά με το 3^ο. Άρα, μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η

επιφάνεια υπ' αριθμόν 1 είναι σημαντικά φαρδύτερη κατά τον άξονα X. Κάτι τέτοιο ενδέχεται να οφείλεται σε εντονότερη μεταφορά θερμότητας κατά μήκος του συγκεκριμένου άξονα, όπως επίσης και στο γεγονός ότι η δέσμη του Laser έχει παραμορφωθεί κυρίως κατά τον ίδιο άξονα, με αποτέλεσμα να προσπίπτουν ακτίνες των οποίων η κατεύθυνση αποκλίνει σημαντικά από το κεντρικό σημείο εφαρμογής της ακτινοβολίας.

Παρατηρώντας επίσης την εξέλιξη της έκτασης της φωτοαποδομημένης (σε μερικό βαθμό) επιφάνειας συναρτήσεως της ενέργειας του Laser, βλέπουμε ότι αυτή μειώνεται, κάτι που αποδεικνύεται πλήρως φυσιολογικό και ενδεικτικό του γεγονότος ότι τόσο οι θερμικές επιδράσεις όσο και οι περιπτώσεις αποβολής υλικού κατά τόπους γίνονται λιγότερο έντονες όσο μικρότερη ενέργεια, άρα και μικρότερο αριθμό φωτονίων, εμπεριέχει ο παλμός της ακτινοβολίας Laser. Η ελάττωση αυτή διαπιστώνεται και εξετάζοντας το μέγεθος της ροής ακτινοβολίας ή ενέργειας ακτινοβολίας ανά μονάδα επιφάνειας. Η μείωση είναι πάρα πολύ μικρή καθώς μεταβαίνουμε από την ενέργεια των 3 mJ στα 2, αλλά η διαφορά μεταξύ των περιπτώσεων 2 και 3 (2 και 1 mJ ενέργειας παλμού) είναι σημαντική και ίση με $\frac{18.818924-12.516591}{18.818924} \cdot 100\% = 33.49\%$ σε ποσοστιαίο επίπεδο, που ουσιαστικά σημαίνει μείωση κατά

το 1/3. Φαίνεται δηλαδή ξεκάθαρα ότι τόσο η ενέργεια παλμού όσο και το εμβαδό της επιφάνειας που έχει ακτινοβοληθεί επηρεάζουν προς τα κάτω τη ροή (fluence). Στη συνέχεια της Υποενότητας θα δούμε το πώς αυτή η μεταβολή μπορεί να μας βοηθήσει να συμπεράνουμε το αν η αποδοτικότητα και η ποιότητα της φωτοαποδόμησης βελτιώνεται ή όχι.

Πάντως, μία επιπλέον πληροφορία που μπορεί να παρατεθεί εδώ και παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει να κάνει με το γεγονός ότι, παρά το ότι η φωτοαποδόμηση δεν εξελίσσεται σε πλήρη βαθμό, εντούτοις η ακτινοβολία του δοκιμίου και μόνο προκαλεί κάποιας έκτασης «ζημιές» στην αρχική επιφάνεια (*damage*, όπως οι *Guo et al.* ορίζουν στη βιβλιογραφία [181]). Από πειραματικές μελέτες που εξελίχθηκαν στα πλαίσια αυτής της βιβλιογραφίας, προσδιορίστηκε για το Al το κατώφλι με την ονομασία *damage threshold*, που ουσιαστικά παριστάνει μία τιμή της ροής ακτινοβολίας πάνω από

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

την οποία αρχίζουν να εμφανίζονται «ζημιές», υπό τη μορφή ανομοιομορφιών, μετακινήσεων υλικού από την κρυσταλλική δομή και μεταβολής της τραχύτητας πέρα από τη μηδενική τιμή. Είναι προφανές ότι το κατώφλι αυτό έχει ξεπεραστεί σε πάρα πολύ μεγάλο βαθμό, εάν κρίνουμε από την τιμή $340 \text{ J/m}^2 = 0.34 \text{ J/cm}^2$ που υπολογίζεται στην υπόψη μελέτη. Η εμφάνιση αυτού του είδους των «ζημιών» προφανώς και εμφανίζεται και στο Mo, ήδη από την έναρξη της ακτινοβολήσης. Η βιβλιογραφία [170], η οποία βασίζεται σε μία σειρά από διεξαχθέντα πειράματα πάνω σε Mo, δίνει μία τιμή για το damage threshold ίση με $6.46 \text{ J/m}^2 = 6.46 \times 10^{-4} \text{ J/cm}^2$, κάτι που πρακτικά σημαίνει ότι παρατηρούνται «ζημιές» και μικρο-καταστροφές επί του υμενίου άπαξ και αυτό ακτινοβοληθεί.

Ένας άλλος πολύ χρήσιμος Πίνακας, ενδεχομένως περισσότερο από ό,τι ο 6.5., είναι ο 6.6. που παρατίθεται παρακάτω, και στον οποίο συγκρίνονται τα αποτελέσματα που έχουν ληφθεί από την πειραματική εφαρμογή της κατεργασίας της εγχάραξης, αλλά και της διεργασίας της φωτοαποδόμησης, τόσο στο Mo όσο και στο Al. Με αυτό τον τρόπο, μπορούμε να αποκτήσουμε μία πληρέστερη εικόνα για το πώς το υλικό παρεμβαίνει στην κατεργασία και την επηρεάζει θετικά ή αρνητικά. Και εδώ, θα πρέπει να εστιάσουμε στη διαφορά μεταξύ των συντελεστών απορρόφησης για τα δύο υλικά, όπως τους έχουμε βρει παραπάνω (57.14% για το Mo, 8% για το Al) και να σχολιάσουμε την κρισιμότητά τους στην εξέλιξη της κατεργασίας.

A/A Spot	Υλικό	Ενέργεια Laser (mJ)	Οριζόντια διάσταση (μm)	Κατακόρυφη διάσταση (μm)	Λόγος διαστάσεων, D:E	Εμβαδό φωτοαποδομημένης επιφάνειας (cm ²)	Ροή ακτινοβολίας Laser (J/cm ²)
1	Al	3	187.2376	112.7681	1.6604	1.50890E-04	19.882033
2	Al	2	129.7897	104.2573	1.2449	1.06276E-04	18.818924
3	Al	1	113.832	89.3634	1.2738	7.98940E-05	12.516591
4	Mo	3	225.536	123.407	1.8276	2.18598E-04	13.723822
5	Mo	2	217.0254	127.662	1.7000	2.17663E-04	9.188516
6	Mo	1	150.006	110.64	1.3558	9.93782E-05	10.06257

Πίνακας 6.6. Παράθεση και σύγκριση μετρήσεων και αποτελεσμάτων για έξι Spots που ακτινοβολήθηκαν με παλμούς Laser μεταβλητών ενεργειών, διερχόμενους από διάφραγμα μεγέθους 1.5 μm. Τα τρία πρώτα Spots ανήκουν στο λεπτό υμένιο από Al, ενώ τα επόμενα τρία σε αυτό που έχει το Mo ως υλικό.

Εστιάζουμε αρχικά στα ζεύγη αποτελεσμάτων 1-4, 2-5 και 3-6, στα οποία το υλικό διαφέρει αλλά η ενέργεια παλμού είναι ίδια. Οι τιμές των διαστάσεων στο Mo είναι μεγαλύτερες, κάτι που είναι ιδιαίτερα

φυσικό λόγω του γεγονότος ότι η απορροφητικότητα του Mo είναι σαφώς υψηλότερη από αυτή του Al, επιτρέποντας με αυτό τον τρόπο στα φωτόνια να διεισδύσουν σε βάθος μέσα στο δοκίμιο, αλλά και να επεκταθούν σε θέσεις με συντεταγμένες x και y πέραν του σημείου εφαρμογής της ακτινοβολίας. Κάτι τέτοιο φαίνεται να οφείλεται περισσότερο στη διαφορά ανακλαστικότητας των δύο υλικών και λιγότερο σε παράγοντες όπως η θερμική διαχυσιμότητα (thermal diffusivity) ή η θερμική αγωγιμότητα (thermal conductivity), ποσότητες που είναι μεγαλύτερες στο Al από ό,τι στο Mo (ως ενδεικτικό παράδειγμα, η πηγή [168] αναφέρει ότι η θερμική αγωγιμότητα του Al στους 293 K είναι ίση με 237 W/mK, μία τιμή σαφώς μεγαλύτερη από τα 142 W/mK του Mo στην ίδια θερμοκρασία, ενώ η πηγή [169] δίνει τιμές 84.18 και 54.3 mm²/s αντίστοιχα για τις θερμικές διαχυσιμότητες του Al και του Mo).

Κάτι ακόμα που μπορούμε να διαπιστώσουμε είναι ότι η ακτινοβολία των spots από Mo έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία και το σχηματισμό πιο *φαρδιών* επιφανειών, από την άποψη ότι είναι περισσότερο εκτεταμένες πάνω στον άξονα X από ό,τι στον Y. Η συγκεκριμένη παρατήρηση δικαιολογείται από τις αριθμητικές τιμές που έχουν εξαχθεί για το λόγο οριζόντιας προς κατακόρυφη διάσταση, και τις οποίες μελετάμε πάλι ανά τα ίδια ζεύγη. Άξιο προσοχής είναι το γεγονός ότι είναι αρκετά μεγαλύτερος ο λόγος διαστάσεων στην περίπτωση 5 από ό,τι στη 2, σε ποσοστό $\frac{1.7-1.2738}{1.2738} \cdot 100\% = 33.46\%$, με το αυξημένο αυτό ποσοστό να οφείλεται στο σχηματισμό απολήξεων

στην αριστερή και δεξιά πλευρά της περιοχής φωτοαποδόμησης, όπως αυτή απεικονίζεται στο Σχήμα 6.17.[β] (ή 6.18.[β]). Ενδέχεται πάντως και οι απολήξεις (ως «αυτιά», ειδικά στη δεξιά πλευρά του εκάστοτε αποδομημένου χωρίου) που είναι πιο εύκολα διακριτές στο Mo από ό,τι στο Al να παίζουν και αυτές το ρόλο τους στην αύξηση της οριζόντιας διάστασης του κάθε δοκιμίου. Ακόμα και οι διαφορές στους λόγους διαστάσεων μεταξύ των Spots 4 & 1 (σε ποσοστό $\frac{1.8276-1.6604}{1.6604} = 10.07\%$) ή των Spots 6

& 3 (σε ποσοστό $\frac{1.3558-1.2738}{1.2738} = 6.44\%$) μπορούν να δικαιολογήσουν τα λεγόμενά μας, έστω και σε λιγότερο έντονο βαθμό). Τονίζουμε εδώ, όπως και πριν, ότι η ελλειπής ευθυγράμμιση της δέσμης και η παραμόρφωσή της, λόγω πιθανών ανθρώπινων λαθών κατά τη ρύθμιση και βαθμονόμηση (configuration & calibration) της πειραματικής διάταξης, έχουν οδηγήσει στο σχηματισμό αυτών των απολήξεων, οι οποίες εμφανίζονται σε σαφώς μεγαλύτερο βαθμό στο σαφώς πιο απορροφητικό Mo.

Το γεγονός ότι οι διαστάσεις των φωτοαποδομημένων περιοχών είναι υψηλότερες στην περίπτωση του Mo από ό,τι σε αυτή του Al αντικατοπτρίζεται και αξιολογώντας τα εμβαδά, τα οποία έχουν υπολογιστεί, στη συντριπτική πλειοψηφία τους, χρησιμοποιώντας τη γενικευμένη και ικανοποιητικά αξιόπιστη σχέση $A = \frac{\alpha\beta}{4}$, όπου α η οριζόντια διάσταση και β η κατακόρυφη. Πάντως, ο λόγος που

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

αυτή η σχέση κρίνεται ικανοποιητική, και το οποίο παραλείψαμε να αναφέρουμε σε προηγούμενα εδάφια αλλά αναφέρουμε συγκεντρωτικά επί του παρόντος, προκειμένου να δικαιολογήσουμε πλήρως την εγκυρότητα των αποτελεσμάτων μας, έχει να κάνει με το ότι όλες οι επιφάνειες των οποίων τα εμβαδά υπολογίστηκαν έχουν διατομή που βρίσκεται μεταξύ της ορθογωνικής και της κυκλικής, με το ορθογώνιο να έχει εμβαδό $A_{rect} = \alpha\beta$ και τον κύκλο να έχει $\alpha = \beta$ και εμβαδό $A_{circle} = \pi r^2 = \frac{\pi\alpha^2}{4}$ (r η ακτίνα του

κύκλου). Άρα, μπορούμε να δεχτούμε την $A = \frac{\pi\alpha\beta}{4}$ ως μία «ενδιάμεση» σχέση, ικανή να χρησιμοποιηθεί

σε διάφορες περιπτώσεις. Επιστρέφοντας τώρα στο θέμα μας, είναι εμφανές το γεγονός ότι τα εμβαδά των φωτοαποδομημένων επιφανειών είναι εν γένει μεγαλύτερα στο Mo από ό,τι στο Al, κάτι που είναι φυσική απόρροια των διαφορών στις διαστάσεις. Ειδικά συγκρίνοντας τις περιπτώσεις 2 και 5, παρατηρούμε ότι η τελευταία αντιστοιχεί σε λίγο παραπάνω από το διπλάσιο εμβαδό, με την ιδιαίτερα αυξημένη οριζόντια διάσταση σε σχέση με την κατακόρυφη να παίζει κυρίαρχο ρόλο. Μπορούμε, επί του παρόντος, να παραθέσουμε συγκεντρωτικά τις ποσοστιαίες αυξήσεις των εμβαδών των χωρίων φωτοαποδόμησης στο Mo σε σχέση με το Al, μεταξύ των ζευγών Spots 4-1, 5-2 και 6-3:

- Για τα Spots 4-1: $\frac{2.18598 - 1.5089}{1.5089} = 44.87\%$.
- Για τα Spots 5-2: $\frac{2.17663 - 1.06276}{1.06276} = 104.81\%$.
- Για τα Spots 6-3: $\frac{9.93782 - 7.9894}{7.9894} = 24.39\%$.

Το γεγονός ότι τα εμβαδά των φωτοαποδομημένων επιφανειών στο Mo είναι μεγαλύτερα από ό,τι στο Al, επιφέρει την ακριβώς αντίθετη συσχέτιση μεταξύ των ροών ακτινοβολίας (εντάσεων ανά μονάδα επιφάνειας / fluences). Ο ορισμός του fluence ως μέγεθος μας δίνει τη δυνατότητα να κατανοήσουμε ότι πρόκειται για μία ποσότητα αντιστρόφως ανάλογη της έκτασης της αποδομημένης περιοχής, με τη σχέση της ποσότητας με την ενέργεια του παλμού να είναι ευθέως ανάλογη. Έχοντας όμως παρατηρήσει ότι, ειδικά στις περιπτώσεις 2 και 5, τα εμβαδά που αντιστοιχούν στο Mo είναι σημαντικά μεγαλύτερα από αυτά του Al, καταλαβαίνουμε ότι οι τιμές αυτές ασκούν μεγαλύτερη επιρροή στο μέγεθος του fluence (F) από ό,τι η ενέργεια της ακτινοβολίας, σπρώχνοντας με αυτό τον τρόπο την τιμή F προς τα πάνω όσο ελαττώνεται το εμβαδό. Με αυτό τον τρόπο εξηγούνται οι διψήφιες τιμές του F (σε J/cm^2) για όλα τα ακτινοβοληθέντα Spots από Al, τη στιγμή που οι αντίστοιχες τιμές για το Mo είναι μονοψήφιες (εκτός των περίπου $10 J/cm^2$ για το Spot υπ' αριθμόν 6). Και εδώ η υψηλή απορροφητικότητα του Mo σε σχέση με αυτή του Al, όπως επίσης και πιθανά θέματα ελλιπούς ευθυγράμμισης των οπτικών αλλά και της δέσμης Laser, επηρεάζουν το υπό συζήτηση μέγεθος, όπως έχει γίνει και με τα εμβαδά των

φωτοαποδομημένων επιφανειών (από τα οποία το F παρουσιάζει εξάρτηση). Άρα, γενικά, μπορούμε να πούμε με απλούστερα λόγια ότι προσπίπτει μεγαλύτερη ποσότητα ακτινοβολίας Laser ανά cm^2 στα υμένια από Al από ό,τι σε αυτά από Mo. Δεν είναι σίγουρο ότι κάτι τέτοιο επιφέρει θετικές συνέπειες στην ποιότητα της φωτοαποδόμησης, για αυτό το λόγο και θα κάνουμε μία επιπλέον ανάλυση στο επόμενο Εδάφιο 6.8.5., ώστε είτε να επιβεβαιώσουμε είτε να αντικρούσουμε τις αρχικές μας υποθέσεις, βασιζόμενοι στην πλήρη παράθεση, σύγκριση και αξιολόγηση των ήδη εξαχθέντων αριθμητικών αποτελεσμάτων.

6.8.5. Υπολογισμός της Απόδοσης Φωτοαποδόμησης και εξαγωγή συμπερασμάτων μέσω αυτής

Ο ορισμός της απόδοσης φωτοαποδόμησης έχει ήδη παρατεθεί στο Εδάφιο 6.7.9., ενώ το μέγεθος έχει υπολογιστεί για τα spots που ανήκουν στο λεπτό υμένιο από Mo. Ακολουθώντας την ίδια ακριβώς διαδικασία, η οποία έχει ήδη περιγραφεί συνοπτικά στο Εδάφιο για το οποίο έγινε αρχικά λόγος, θα διεξαγάγουμε τους επιθυμητούς υπολογισμούς μας για το Al. Καθώς στην τρέχουσα ανάλυσή μας δε μας αρκεί να μείνουμε μόνο στην παράθεση αποτελεσμάτων για ένα μόνο υλικό, αλλά ενδιαφερόμαστε να δούμε και να σχολιάσουμε το πώς το υλικό επηρεάζει την αποδοτικότητα της διαδικασίας, ένα επιπρόσθετο στοιχείο το οποίο δε θα πρέπει να παραλείψουμε είναι η παράθεση της μεταβολής του υπό υπολογισμού μεγέθους συναρτήσει της ροής ακτινοβολίας Laser, και για τα δύο υλικά, στο ίδιο δισδιάστατο ορθογωνικό σύστημα αξόνων. Μία τέτοια παράθεση αποκτά πάρα πολύ μεγάλη και σημαντική πρακτική σημασία, από τη στιγμή που μπορεί να βοηθήσει ένα Μηχανικό, ερευνητή ή γενικά μελλοντικό επαγγελματία κατεργασιών να επιλέξει ποιο από τα δύο υλικά είναι καταλληλότερο για την πραγματοποίηση επιτυχημένων κατεργασιών εγχάραξης ή φωτοαποδόμησης με Laser γενικά, καθώς επίσης και να του δώσει τη δυνατότητα να προχωρήσει σε έρευνες βελτιστοποίησης της απόδοσης ακόμα και με άλλα υλικά πέραν του Mo ή του Al.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

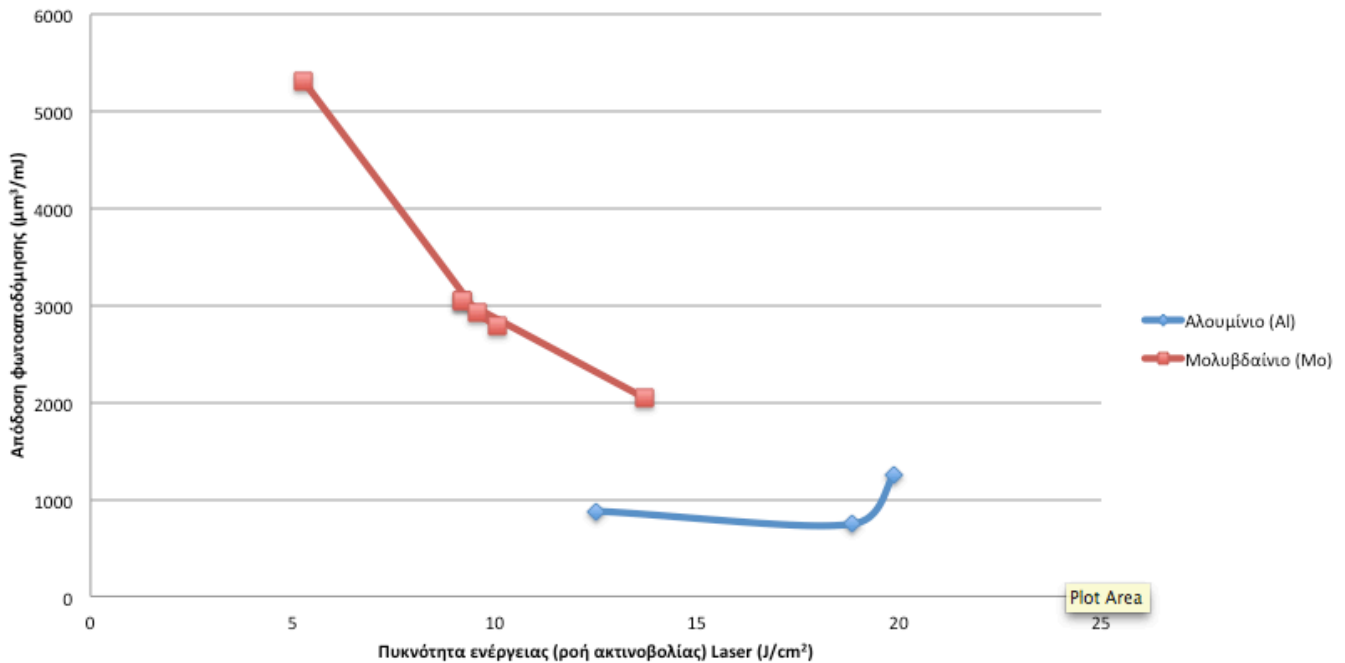
A/A Spot	Υλικό	Ένταση Laser (mJ)	Εμβαδό φωτοαποδομημένης επιφάνειας (cm ²)	Εμβαδό φωτοαποδομημένης επιφάνειας (μm ²)	Ροή ακτινοβολίας Laser (J/cm ²)	Όγκος φωτοαποδομημένης επιφάνειας (μm ³)	Απόδοση φωτοαποδόμησης (μm ³ /mJ)
1	Al	3	1.50890E-04	15089	19.882033	3772.25	1257.416667
2	Al	2	1.06276E-04	10627.6	18.818924	1487.864	743.932
3	Al	1	7.98940E-05	7989.4	12.516591	878.8335272	878.8335272
4	Mo	3	2.18598E-04	21859.8	13.723822	6120.744	2040.248
5	Mo	2	2.17663E-04	21766.3	9.188516	6094.564	3047.282
6	Mo	1	9.93782E-05	9937.8	10.06257	2782.5896	2782.59

Πίνακας 6.7. Παράθεση και σύγκριση των αποδόσεων φωτοαποδόμησης που προέκυψαν από υπολογισμούς βασιζόμενους σε μετρήσεις που εξήχθησαν από την πειραματική διαδικασία ακτινοβολήσης έξι διαφορετικών spots πάνω σε δύο λεπτά υμένια από Mo και Al (3 πειράματα ανά υλικό), για διαφορετικές τιμές έντασης Laser και μέγεθος διαφράγματος 1.5 μm.

Παρατηρώντας τόσο τον παραπάνω Πίνακα, όσο και το Σχήμα 6.22., που αφορά τη μεταβολή του βαθμού φωτοαποδόμησης συναρτήσει της ροής ακτινοβολίας στο Mo, διαπιστώνουμε ότι και εδώ επιβεβαιώνεται το γεγονός ότι η απόδοση της φωτοαποδόμησης ελαττώνεται όσο αυξάνεται η ροή της ακτινοβολίας Laser. Βλέπουμε εδώ ότι δεν υπάρχει σχέση αντίστροφης αναλογίας μεταξύ της απόδοσης φωτοαποδόμησης και της ροής ακτινοβολίας Laser (για το Al). Κάτι τέτοιο μπορεί να επιβεβαιωθεί από τις μετρήσεις του βάθους φωτοαποδόμησης που θα εμφανιστούν στο παρακάτω Εδάφιο 6.8.6., σύμφωνα με τις οποίες το βάθος κατά το οποίο αφαιρείται υλικό δεν είναι το ίδιο πάνω στην επιφάνεια. Μπορούμε, παρατηρώντας τα αντίστοιχα Σχήματα (6.38. έως 6.40.), να προσδιορίσουμε νοητές μέσες τιμές για το βάθος φωτοαποδόμησης, που θα βρεθούν περίπου ίσες με 250, 140 και 110 nm για κάθε διαφορετική τιμή ροής ακτινοβολίας Laser, από τη μεγαλύτερη στη μικρότερη αντίστοιχα.

Έχουμε εδώ τη δυνατότητα, με τη βοήθεια του ακόλουθου Σχήματος 6.36. να αναπαραστήσουμε στο ίδιο σύστημα αξόνων, σε διαγραμματική μορφή, την εξέλιξη της απόδοσης φωτοαποδόμησης συναρτήσει της ροής ακτινοβολίας και για τα δύο υλικά, προκειμένου τόσο να επιβεβαιώσουμε την αρχική μας διαπίστωση αναφορικά με την αντίστροφη αναλογία, όσο και να παρατηρήσουμε το πώς η φύση του εκάστοτε υλικού έχει τη δική της επίδραση στην αποδοτικότητα της κατεργασίας.

Εξέλιξη της απόδοσης φωτοαποδόμησης συναρτήσει της πυκνότητας ενέργειας Laser, για τα υλικά Mo και Al (με βάση τη διεξαχθείσα στο ΕΙΕ πειραματική διαδικασία)



Σχήμα 6.36. Εξάρτηση της απόδοσης φωτοαποδόμησης από τη ροή ακτινοβολίας (πυκνότητα ενέργειας) Laser, για τα δύο υλικά Mo και Al που εξετάστηκαν κατά τη διάρκεια των πειραμάτων.

Κατά τη διάρκεια της ανάλυσής μας στην Υποενότητα 8, η οποία αναφέρεται στο Al, διαπιστώσαμε ότι πρακτικά δε λαμβάνει χώρα φωτοαποδόμηση της επιφάνειας, παρά μόνο κάποια αφαίρεση υλικού σε τοπικό επίπεδο. Παρατηρούμε ότι κάτι τέτοιο επιβεβαιώνεται και από τις τιμές που λαμβάνει η απόδοση της κατεργασίας, ειδικά όσο αυξάνεται η ροή ακτινοβολίας (γαλάζια καμπύλη). Η μέγιστη τιμή της καμπύλης, που τοποθετείται στα περίπου $950 \mu\text{m}^3/\text{mJ}$, αποκτάται για πυκνότητα ενέργειας περίπου 12.5 J/cm^2 , με την αντίστοιχη τιμή της απόδοσης φωτοαποδόμησης για την ίδια πυκνότητα ενέργειας και υλικό Mo να βρίσκεται περίπου $1200 \mu\text{m}^3/\text{mJ}$ υψηλότερα. Το γεγονός ότι η τιμή για το Al βρίσκεται χαμηλότερα, και μάλιστα σε ένα σημαντικό βαθμό, είναι ενδεικτικό του γεγονότος ότι η υψηλή ανακλαστικότητα του Al δεν επιτρέπει στην ακτινοβολία να διεισδύσει σε τέτοιο βαθμό ώστε να αποδομήσει ικανοποιητικά του υλικό και να κάνει ιδιαίτερα αποδοτική τη διεργασία.

Σε γενικές γραμμές πάντως, το γεγονός ότι η καμπύλη της απόδοσης για το Al βρίσκεται, σε όλη την έκτασή της, κάτω από την αντίστοιχη του Mo, δείχνει ότι η εγχάραξη (scribing) δε θα μπορούσε να θεωρηθεί μία αποτελεσματική κατεργασία εάν επρόκειτο να εφαρμοστεί πάνω σε υμένια από Al. Όλοι οι παράγοντες που έχουμε αναφέρει σε προηγούμενα Εδάφια, και οι οποίοι θα μπορούσαν να συσχετιστούν άμεσα με το γεγονός ότι το Al είναι ένα υλικό με έναν ελαφρώς μη-μεταλλικό χαρακτήρα, που

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

προσομοιάζει κατά κάποιον τρόπο σε ημιαγωγό, σε αντίθεση με το Mo, το οποίο ανήκει στα μέταλλα μετάπτωσης (όπως φαίνεται και στην ακόλουθη αναπαράσταση του Περιοδικού Πίνακα, στο Σχήμα 6.37.).

hydrogen 1 H 1.0079																	helium 2 He 4.0026	
lithium 3 Li 6.941	beryllium 4 Be 9.0122											boron 5 B 10.811	carbon 6 C 12.011	nitrogen 7 N 14.007	oxygen 8 O 15.999	fluorine 9 F 18.998	neon 10 Ne 20.180	
sodium 11 Na 22.990	magnesium 12 Mg 24.305											aluminum 13 Al 26.982	silicon 14 Si 28.086	phosphorus 15 P 30.974	sulfur 16 S 32.065	chlorine 17 Cl 35.453	argon 18 Ar 39.948	
potassium 19 K 39.098	calcium 20 Ca 40.078	scandium 21 Sc 44.956	titanium 22 Ti 47.867	vanadium 23 V 50.942	chromium 24 Cr 51.996	manganese 25 Mn 54.938	iron 26 Fe 55.845	cobalt 27 Co 58.933	nickel 28 Ni 58.693	copper 29 Cu 63.546	zinc 30 Zn 65.39	gallium 31 Ga 69.723	germanium 32 Ge 72.61	arsenic 33 As 74.922	selenium 34 Se 78.96	bromine 35 Br 79.904	krypton 36 Kr 83.80	
rubidium 37 Rb 85.468	strontium 38 Sr 87.62	yttrium 39 Y 88.906	zirconium 40 Zr 91.224	niobium 41 Nb 92.906	molybdenum 42 Mo 95.94	technetium 43 Tc [98]	ruthenium 44 Ru 101.07	rhodium 45 Rh 102.91	palladium 46 Pd 106.42	silver 47 Ag 107.87	cadmium 48 Cd 112.41	indium 49 In 114.82	tin 50 Sn 118.71	antimony 51 Sb 121.76	tellurium 52 Te 127.60	iodine 53 I 126.90	xenon 54 Xe 131.29	
caesium 55 Cs 132.91	barium 56 Ba 137.33	* 57-70	lutetium 71 Lu 174.97	hafnium 72 Hf 178.49	tantalum 73 Ta 180.95	wolfram 74 W 183.84	rhenium 75 Re 186.21	osmium 76 Os 190.23	iridium 77 Ir 192.22	platinum 78 Pt 195.08	gold 79 Au 196.97	mercury 80 Hg 200.59	thallium 81 Tl 204.38	lead 82 Pb 207.2	bismuth 83 Bi 208.98	polonium 84 Po [209]	astatine 85 At [210]	radon 86 Rn [222]
francium 87 Fr [223]	radium 88 Ra [226]	* 89-102	lawrencium 103 Lr [262]	rutherfordium 104 Rf [261]	dubnium 105 Db [262]	seaborgium 106 Sg [266]	bohrium 107 Bh [264]	hassium 108 Hs [269]	meitnerium 109 Mt [268]	ununilium 110 Uun [271]	unununium 111 Uuu [272]	unubium 112 Uub [277]	ununquadium 114 Uuq [289]					

* Lanthanide series													
lanthanum 57 La 138.91	cerium 58 Ce 140.12	praseodymium 59 Pr 140.91	neodymium 60 Nd 144.24	promethium 61 Pm [145]	samarium 62 Sm 150.36	europium 63 Eu 151.96	gadolinium 64 Gd 157.25	terbium 65 Tb 158.93	dysprosium 66 Dy 162.50	holmium 67 Ho 164.93	erbium 68 Er 167.26	thulium 69 Tm 168.93	ytterbium 70 Yb 173.04
** Actinide series													
actinium 89 Ac [227]	thorium 90 Th 232.04	protactinium 91 Pa 231.04	uranium 92 U 238.03	neptunium 93 Np [237]	plutonium 94 Pu [244]	americium 95 Am [243]	curium 96 Cm [247]	berkelium 97 Bk [247]	californium 98 Cf [251]	einsteinium 99 Es [252]	fermium 100 Fm [257]	mendeleevium 101 Md [258]	nobelium 102 No [259]

Σχήμα 6.37. Παράθεση του Περιοδικού Πίνακα χημικών στοιχείων, όπου το μολυβδαίνιο (Mo) έχει κυκλωθεί με κόκκινο χρώμα και το αλουμίνιο (Al) με γαλάζιο. Η κύκλωση των δύο στοιχείων αποσκοπεί στο να δώσει έμφαση στο πώς οι διαφορετικές ομάδες στις οποίες ανήκουν επιδρούν στη διαφοροποίηση των ιδιοτήτων τους, ειδικά αυτών που σχετίζονται με τη φωτοαποδόμηση που πρόκειται να υποστούν.

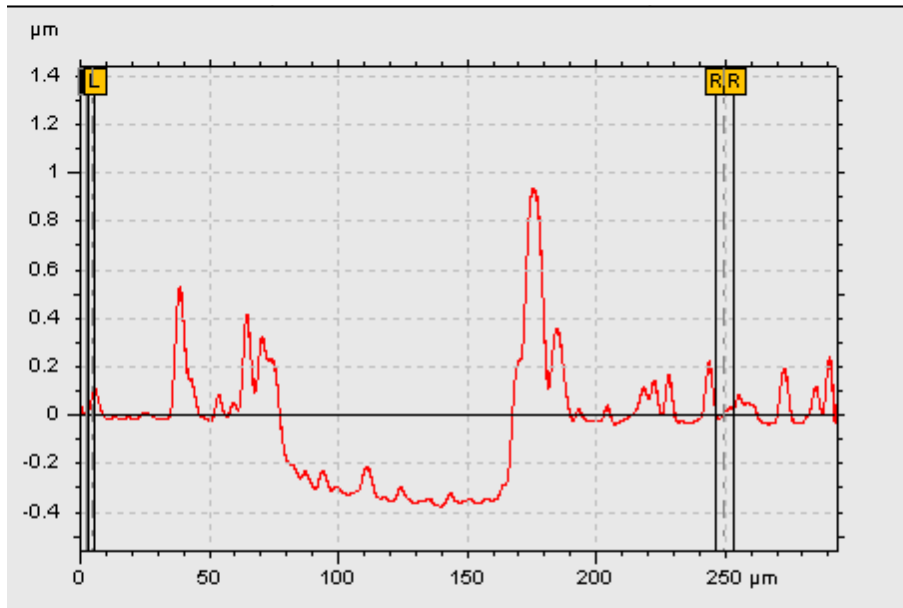
Γενικότερα, μπορούμε να πούμε με απλά λόγια ότι η κατεργασία και μερική φωτοαποδόμηση του αλουμινένιου υμενίου κρίνεται μη αποδοτική για το εύρος ενεργειών Laser που εξετάζεται επί του παρόντος, ειδικά όσο αυξάνεται η πυκνότητα ενέργειας της ακτινοβολίας. Λαμβάνοντας υπόψη ότι την ίδια μονοτονία ακολουθεί και η καμπύλη που αφορά το Mo, θα μπορούσαμε να πούμε ότι χρειάζεται να γίνουν προσπάθειες για την εύρεση μεθόδων που θα μπορούσαν να οδηγήσουν σε χαμηλές ροές ακτινοβολίας Laser, εάν πρόκειται να πετύχουμε επαρκή και επιτυχημένη φωτοαποδόμηση χρησιμοποιώντας το Al σαν υλικό-στόχο.

6.8.6. Μετρήσεις βάθους φωτοαποδόμησης και τραχύτητας επιφάνειας

Ένα ακόμη ιδιαίτερα αντιπροσωπευτικό μέγεθος, η μέτρηση του οποίου θα μας οδηγήσει σε ασφαλή συμπεράσματα σχετικά με το πόσο αποτελεσματική είναι η διαδικασία της φωτοαποδόμησης στο Al και το πόσο μεγάλη είναι η έκταση στην οποία αυτή λαμβάνει χώρα, είναι το *βάθος φωτοαποδόμησης*, το οποίο εξετάστηκε ήδη και στο Mo, στα πλαίσια του Εδαφίου 6.7.10.. Το προφιλόμετρο Alpha-Step IQ που χρησιμοποιήθηκε και παραπάνω, μας δίνει μία ιδιαίτερα περιγραφική και αξιόπιστη εικόνα χάρη στην οποία θα καταστεί εφικτός ο προσδιορισμός του υπόψη μεγέθους, όπως και αυτού της *τραχύτητας επιφάνειας*, τουλάχιστον όσον αφορά τη *μέγιστη*. Με αφορμή την παραπάνω πρόταση, επισημαίνουμε, όπως κάναμε και στην περίπτωση του Mo, ότι ο υπολογισμός της μέσης τραχύτητας καθίσταται σχετικά δύσκολος, καθώς η γεωμετρία του προφίλ τραχύτητας δεν είναι καθορισμένη αλλά έχει ένα διαρκώς μεταβλητό σχήμα, καθιστώντας έτσι δύσκολο τον υπολογισμό των εμβαδών που βρίσκονται εκατέρωθεν μίας κεντρικής γραμμής που θα πρέπει και αυτή να προσδιοριστεί μέσω δοκιμών ή περίπλοκων υπολογιστικών σχέσεων.

Πάνω στο λεπτό υμένιο από Al που ακτινοβολήθηκε, ελήφθησαν τρεις εικόνες από το προφιλόμετρο, με κάθε εικόνα να αντιστοιχεί σε μία διαφορετική ακτινοβολημένη περιοχή τη φορά. Εμείς θα παραθέσουμε μία-μία τις εικόνες αυτές, με σκοπό να εξαγάγουμε χρήσιμα συμπεράσματα τόσο για τα μετρούμενα μεγέθη όσο και για τα αποτελέσματα που φέρει η φωτοαποδόμηση γενικότερα. Αναμένουμε πάντως, λόγω του πολύ μικρού πάχους του υμενίου, ότι παρά την υψηλή ανακλαστικότητα του Al, επιτρέποντας μόνο στο 8% της ενέργειας παλμού να διεισδύσει στο υλικό και να το αποδομήσει, θα υπάρχουν έστω και μερικές περιοχές στις οποίες θα είναι επιτεύξιμη η τιμή που αντιπροσωπεύει το (μέγιστο) πάχος του υμενίου από Al.

Για το Spot που ακτινοβολήθηκε με παλμό Laser ενέργειας 3 mJ, το Σχήμα 6.38. μας δίνει την αντίστοιχη εικόνα από το προφιλόμετρο:



Σχήμα 6.38. Απεικόνιση του προφίλ τραχύτητας και προσδιορισμός του βάθους φωτοαποδόμησης, όπως τη δίνει το προφιλόμετρο Alpha-Step IQ, για το Spot του λεπτού υμενίου από Al που ακτινοβολήθηκε με παλμό Laser ενέργειας 3 mJ (το μέγεθος του διαφράγματος από το οποίο διέρχεται η δέσμη είναι 1.5 μm).

Παρατηρώντας το Σχήμα αυτό, και κάνοντας την αντίστοιχη σύγκριση με τα προφίλ τραχύτητας και βάθους αποδόμησης που παριστάνονται για το Mo, στα Σχήματα 6.25. έως 6.27., μπορούμε να διαπιστώσουμε αρχικά ότι το προφίλ του Al δεν είναι τόσο ομοιόμορφο αλλά παρουσιάζει πολλές διαβαθμίσεις σε όλη τη μετρούμενη έκταση, κάτι που θα μπορούσε να διαπιστωθεί από την εμφάνιση πολλών «λόφων» κυρίως μικρού ύψους (έως 0.55 μm, γιατί η μεγάλη κορυφή των 0.95 μm περίπου σχετίζεται, όπως και στο προηγούμενο Εδάφιο, με τη φωτοαποδόμηση). Αρκετοί λόγοι μπορούν να συντελούν στο να συμβαίνει αυτό. Ο πρώτος, προφανέστερος και ευκολότερος να διαπιστωθεί, είναι η πιθανότητα να περιλαμβάνονται κάποιοι μικροσκοπικοί κόκκοι από Al (σπανιότερα από άλλα στοιχεία που παίζουν το ρόλο προσμίξεων), που τοπικά μειώνουν την επιπεδότητα της επιφάνειας και την ισοτροπία του υλικού. Ο δεύτερος λόγος έχει να κάνει με την πιθανότητα να εκτοπίζονται τμήματα του αποβιβλημένου από την κυρίως επιφάνεια ή γενικότερα προσβεβλημένου από την ακτινοβολία Laser υλικού, σε τμήματα που βρίσκονται εκατέρωθεν της περιοχής φωτοαποδόμησης κατά το επίπεδο XY. Αυτά τα τμήματα συνήθως απαντώνται είτε σε στερεή μορφή είτε ως στερεοποιημένο τήγμα. Οι λόφοι που παρατηρούνται, ειδικότερα αυτοί με τις υψηλότερες κορυφές, θα μπορούσαν να αναπαραστήσουν περιοχές της θερμικά επηρεασμένης ζώνης, στις οποίες το υλικό έχει υποστεί επιφανειακή αλλοίωση λόγω της ακτινοβολίας (ακόμα και υπό τη μορφή τοπικής αλλαγής φάσης από στερεό σε υγρό), αλλά δεν έχει αποβληθεί επειδή πιθανώς να έχει περιέλθει στην αέρια κατάσταση. Ο τρίτος λόγος σχετίζεται με το δεύτερο, και έχει να κάνει με το γεγονός ότι η έντονη ανάκλαση πολλών από τις ακτίνες Laser της

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

δέσμης προκαλεί την πρόσπτωσή τους σε άλλα σημεία που βρίσκονται αρκετά μακριά από την κυρίως φωτοαποδομημένη περιοχή, με το απορροφούμενο ποσοστό του 8% ανά ακτίνα να είναι αρκετό ώστε τουλάχιστον να συντελέσει σε έναν τοπικό θερμικό επηρεασμό.

Προχωράμε στον προσδιορισμό του βάθους φωτοαποδόμησης, με τη βοήθεια του Σχήματος 6.38.. Όλες οι περιοχές που χαρακτηρίζονται από τεταγμένη μικρότερη του 0 αντιστοιχούν σε φωτοαποδομημένες περιοχές, για τις οποίες ο βαθμός φωτοαποδόμησης είναι τόσο μεγαλύτερος όσο χαμηλότερη αλγεβρικά είναι η τεταγμένη (με άλλα λόγια: όσο υψηλότερη κατ'απόλυτη τιμή είναι η αλγεβρικά αρνητική τεταγμένη) του προφίλ. Το μέγιστο βάθος βρίσκεται στην οριζόντια θέση 140 nm, όπως ορίζεται από τη βαθμονόμηση του προφιλόμετρου, και είναι ίσο με 390 nm περίπου, όσο δηλαδή είναι και το μέγιστο πάχος του υμενίου. Είναι πάντως παράδοξο το γεγονός ότι μπορούμε να πετύχουμε μεγαλύτερο βάθος φωτοαποδόμησης σε σχέση με το λεπτό υμένιο από Mo (280 nm), με δεδομένη την πολύ σημαντική διαφορά στις απορροφητικότητες του Mo και του Al (με τους αντίστοιχους συντελεστές, όπως έχουμε δει επανειλημμένα, να ορίζονται στους 57.14% και 8%). Κάτι τέτοιο, εάν προσέξουμε, δεν έχει να κάνει με κάθε ένα από τα υλικά, αλλά έρχεται να επιβεβαιώσει το γεγονός ότι ένα λεπτό υμένιο, του οποίου η διάσταση z είναι τουλάχιστον τρεις τάξεις μεγέθους χαμηλότερη από τις άλλες δύο, έχει γενικά τόσο μικρό πάχος ώστε, ανεξάρτητα από το υλικό από το οποίο αποτελείται ή από την ενέργεια παλμού Laser που προσπίπτει, εφόσον βέβαια αυτή δεν είναι πολύ μικρή, να είναι εφικτή, έστω και σε τοπικό επίπεδο, η αποδόμηση του υμενίου μέχρι τη βαθύτερη θέση του μόνο με ένα παλμό. Εδώ βέβαια, το γεγονός ότι το Al είναι έντονα ανακλαστικό δεν επιτρέπει σε όλη την ακτινοβολημένη επιφάνεια να αποκτήσει, σε όλη την οριζόντια έκταση των περίπου 90 μm (80-170), τη μέγιστη τιμή του βάθους φωτοαποδόμησης. Περιοχές που έχουν προσβληθεί με ακτίνες ενέργειας μικρότερης των 3 mJ (με δεδομένο το *Gaussian* προφίλ της δέσμης κατά το επίπεδο XY) είναι λογικό να εμφανίζουν μικρότερο βάθος φωτοαποδόμησης, το οποίο ελαττώνεται όσο απομακρυνόμαστε από το σημείο εφαρμογής της δέσμης, το οποίο συμπίπτει με τη θέση στην οποία το μέγιστο βάθος φωτοαποδόμησης έχει επιτευχθεί.

Η μέτρηση της μέγιστης τραχύτητας μπορεί να γίνει είτε με βάση τον ορισμό της, σύμφωνα με τον οποίο υπολογίζουμε την κατακόρυφη απόσταση μεταξύ της υψηλότερης κορυφής και της βαθύτερης κοιλίας πάνω στο προφίλ τραχύτητας που απεικονίζεται στο Σχήμα 6.38., είτε εφιστώντας την προσοχή μας στην ένδειξη *TIR*

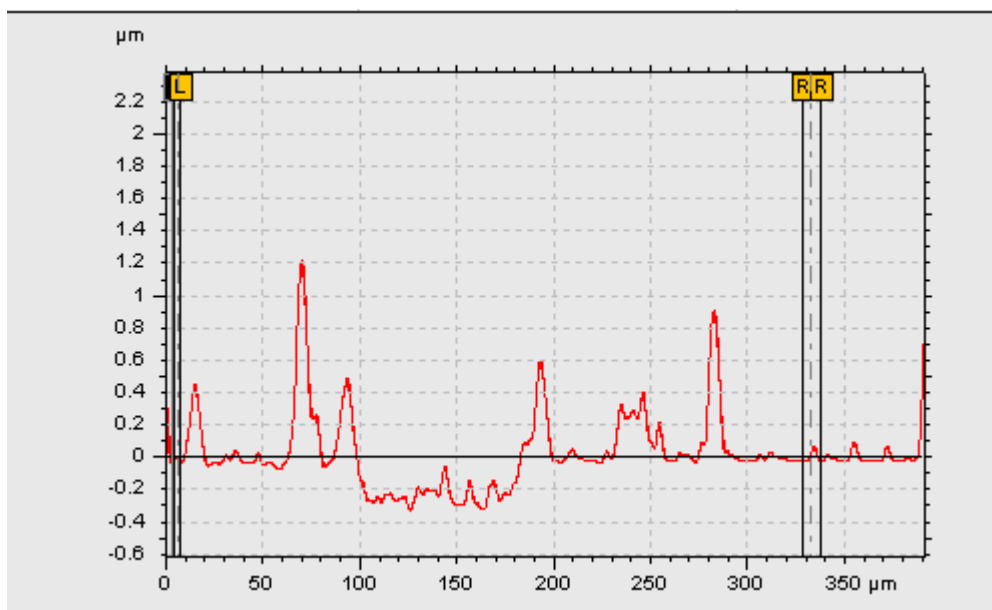
TIR	1.3135 μm
-----	----------------------

 που περιλαμβάνεται στο αρχείο JPG που περικλείει μέσα του το δισδιάστατο προφίλ τραχύτητας. Άρα, θα ισχύει ότι $R_z = 1.3135 \mu\text{m}$. Πρόκειται για μία τιμή τραχύτητας που είναι μεγαλύτερη ακόμα και από τη μέγιστη παρουσιαζόμενη τιμή για ένα από τα Spots που ακτινοβολήθηκαν πάνω στο υμένιο από Mo ($R_z = 1.2652 \mu\text{m}$). Έχοντας υπόψη μας και τις έντονες διαβαθμίσεις στο προφίλ τραχύτητας, σε αντίθεση με το Mo, όπου πέραν της φωτοαποδομημένης περιοχής και των κολλητών σε αυτή χωρίων της HAZ, το προφίλ είναι ομοιόμορφο και σχεδόν κείται επί

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

της ευθείας $z = 0$ ή ταλαντεύεται γύρω από αυτή ελάχιστα, διαπιστώνουμε ότι η προσπάθεια πραγματοποίησης μίας επιτυχημένης κατεργασίας εγχάραξης πάνω στο υμένιο από Al συντελεί στο σχηματισμό μίας ιδιαίτερα τραχείας επιφάνειας που αναμένεται να έχει αυξημένη τιμή (συγκριτικά με το Mo) και στη μέση τραχύτητα R_a , κάτι που μπορεί να διαπιστωθεί με ασφάλεια ακόμα και περιορίζοντας τους εαυτούς μας σε ποιοτικές παρατηρήσεις, με τους ποσοτικούς υπολογισμούς, όπως έχουμε αναφέρει παραπάνω, να παρουσιάζουν κάποιο βαθμό δυσκολίας.

Το επόμενο Σχήμα 6.39. αφορά την περιοχή που ακτινοβολήθηκε με παλμό Laser ενέργειας 2 mJ. Αξίζει να παρατηρήσουμε το κατά πόσο η ελάττωση της ενέργειας επηρεάζει το βάθος φωτοαποδόμησης και τι ρόλο παίζει στη διαμόρφωση της τραχύτητας στην εξεταζόμενη τοπική περιοχή. Το πρώτο από τα δύο μεγέθη (βάθος φωτοαποδόμησης) αναμένεται να μας ενδιαφέρει σε πολύ σημαντικό βαθμό, εάν λάβουμε υπόψη το πολύ μικρό ποσό εκμεταλλεύσιμης ενέργειας (0.16 mJ) στην προσπάθεια αποδόμησης της επιφάνειας ενός υλικού σαφώς διαφορετικής φύσης από το Mo.



Σχήμα 6.39. Απεικόνιση του προφίλ τραχύτητας και προσδιορισμός του βάθους φωτοαποδόμησης, όπως τη δίνει το προφιλόμετρο Alpha-Step IQ, για το Spot του λεπτού υμενίου από Al που ακτινοβολήθηκε με παλμό Laser ενέργειας 2 mJ (το μέγεθος του διαφράγματος από το οποίο διέρχεται η δέσμη είναι 1.5 μm).

Παρατηρώντας προσεκτικά το μέγιστο βάθος (κατά τον κατακόρυφο άξονα του πάχους/βάθους, έστω z) στο οποίο φτάνει το προφίλ της τραχύτητας, διαπιστώνουμε ότι, δεν είναι τόσο μεγάλο κατ' απόλυτη τιμή όσο στην περίπτωση ακτινοβολήσης με Laser ενέργειας 3 mJ. Δηλαδή, με λίγα λόγια, η ελάττωση της ενέργειας του παλμού δημιουργεί την απαίτηση εφαρμογής περισσότερων του ενός παλμού για να φωτοαποδομηθεί πλήρως το υμένιο κατά το βάθος του, έστω και τοπικά, όπως έγινε και στην περίπτωση

που εξετάστηκε στα πλαίσια του Σχήματος 6.38.. Επανερχόμενοι σε αυτά που μας δίνει το Σχήμα, βλέπουμε ότι ο ένας παλμός Laser με τα περιγραφέντα χαρακτηριστικά οδηγεί σε ένα μέγιστο βάθος φωτοαποδόμησης της τάξης των 350 nm, το οποίο δε διαφέρει μεν παρά ελάχιστα από ό,τι στην προηγούμενη περίπτωση, αλλά οδηγεί σε φωτοαποδόμηση κατά το βάθος της οποίας το ποσοστό δεν αγγίζει το 100%, κάτι που έρχεται σε αντίθεση με το Mo, όπου, όποια ενέργεια Laser και να εφαρμόσουμε, ο παλμός του Laser έχει τη δυνατότητα διείσδυσης σε όλο το βάθος. Πέραν των ήδη αναφερθέντων παραγόντων, όπως αυτού της υψηλής ανακλαστικότητας του Al ή της φύσης του υλικού γενικότερα, θα πρέπει να λάβουμε υπόψη και τις συνθήκες κάτω από τις οποίες λαμβάνει χώρα η εισροή της ακτινοβολίας μέσα στο υλικό. Είναι γνωστό, από παραπάνω περιγραφές και αναλύσεις μας, ότι η δέσμη που εισέρχεται μέσα στο υλικό εξασθενεί όχι μόνο κατά τις διαστάσεις x και y (λόγω της Gaussian κατανομής που ακολουθεί η ενέργεια), αλλά και κατά του βάθους (διάσταση z), σύμφωνα με το νόμο Beer-Lambert, σύμφωνα με τον οποίο η ενέργεια στην επιφάνεια του υμενίου πολλαπλασιάζεται με την ποσότητα $\exp(-\beta z)$ (z το βάθος, β θετική πραγματική σταθερά) και, ως εκ τούτου, ελαττώνεται καθώς η διείσδυση εντός του υλικού γίνεται μεγαλύτερη. Ο συνδυασμός των παραπάνω παραγόντων οδηγεί στο συμπέρασμα ότι, ακόμα και στο σημείο εφαρμογής της δέσμης, όπου η ενέργεια είναι μέγιστη, η τιμή της ενέργειας έχει εξασθενήσει σε βάθος 350 nm σε τέτοιο βαθμό, ώστε τα τελευταία 30 nm του υμενίου να μην μπορούν να προσβληθούν επαρκώς ώστε να οδηγήσουν σε φωτοαποδόμησή τους. Είναι προφανές ότι, λόγω της χαμηλότερης ενέργειας Laser σε άλλες θέσεις, η εξασθένιση επέρχεται σε μικρότερο βάθος, με αποτέλεσμα να ελαττώνεται τοπικά και το βάθος φωτοαποδόμησης, σε αντίθεση με το Mo όπου παραμένει πρακτικά ίδιο σε όλη την κυρίως ακτινοβολημένη έκταση. Η έκταση αυτή εμφανίζεται στο προφίλ της τραχύτητας να έχει ένα μήκος περίπου 85 μm , μία τιμή που αποκλίνει αρκετά από τα 129.8 μm περίπου που αντιπροσωπεύουν την οριζόντια διάσταση, όπως αυτή υπολογίστηκε για την παρούσα περίπτωση και παρατίθεται στον Πίνακα 6.6.. Είναι πιθανό οι περιοχές που εμφανίζονται ως μικροί λόφοι πάνω στην εικόνα του προφιλόμετρου να παριστάνουν και αυτές μερικώς αποδομημένες επιφάνειες, με αποτέλεσμα να υπάρχει αυτή η απόκλιση στις αριθμητικές μετρήσεις.

Η τραχύτητα της επιφάνειας γύρω από το ακτινοβολημένο Spot, όπως αυτή μπορεί να προσδιοριστεί μέσω του προφίλ του Σχήματος 6.39., φαίνεται να είναι ελαφρώς μεγαλύτερη σε σχέση με την περίπτωση του Σχήματος 6.38., κάτι που, όπως είδαμε και στο Mo, έρχεται σε αντίθεση με την ελάττωση της ενέργειας του Laser στα 2 mJ, άρα και του θερμικού επηρεασμού γύρω από το ακτινοβολημένο σημείο (Spot). Το γεγονός ότι δημιουργούνται εκτεταμένες θερμικά επηρεασμένες ζώνες συγκριτικά με τις περιοχές φωτοαποδόμησης, σε συνδυασμό με το γεγονός ότι τμήματα υλικού ή τήγματος εκτοπίζονται σε σημαντικό βαθμό, μπορεί να δικαιολογήσει εν μέρει την αύξηση της τραχύτητας γενικά. Άρα, αναμένουμε και η μέση τραχύτητα R_a να έχει αυξημένη τιμή, που όμως χρειάζεται διεξοδική ανάλυση

προκειμένου να υπολογιστεί επακριβώς, λαμβάνοντας υπόψη και την πολύπλοκη γεωμετρία του προφίλ. Και πάλι, η υψηλή ανακλαστικότητα αλλά και η φύση του υλικού γενικότερα είναι παράγοντες υπεύθυνοι για την εμφάνιση τόσο έντονων διαβαθμίσεων στην τραχύτητα, έστω και σε μικρότερο βαθμό από ό,τι στην κατάσταση υψηλότερης ενέργειας παλμού (3 mJ).

Πάντως, η μέγιστη τιμή της τραχύτητας υπολογίζεται με σχετική ευκολία, με έναν από τους δύο τρόπους που αναφέραμε και παραπάνω. Είναι σαφώς ευκολότερο να δανειστούμε την ένδειξη που μας δίνει το προφιλόμετρο, προκειμένου για εξοικονόμηση χρόνου και με δεδομένο ότι η ακρίβεια του μετρητικού οργάνου που δίνει την τραχύτητα είναι αρκετά ικανοποιητική. Επομένως, η ένδειξη

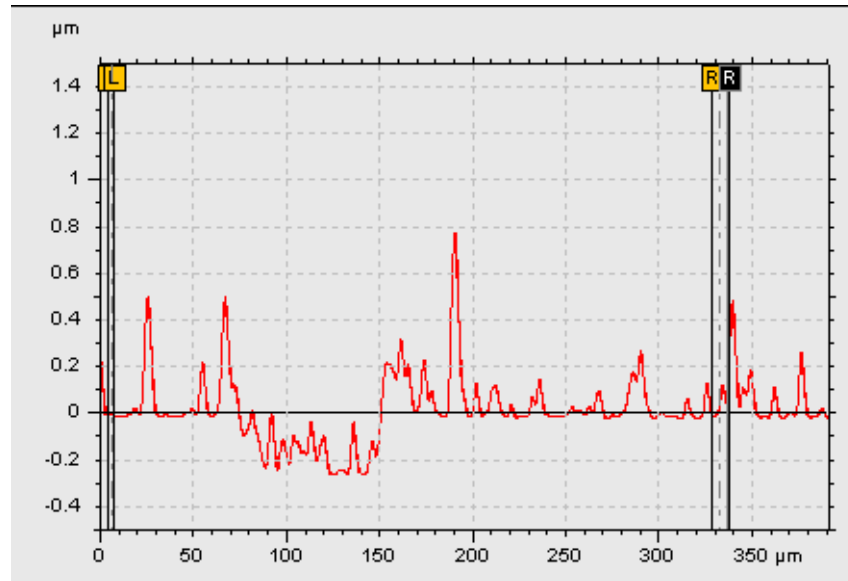
TIR	1.5463 μm
-----	----------------------

 μας οδηγεί προφανώς στο συμπέρασμα ότι η μέγιστη τραχύτητα ισούται με $R_z = 1.5463 \mu\text{m}$. Η τιμή αυτή είναι μεγαλύτερη αυτής που υπολογίστηκε παραπάνω (για μεγαλύτερη ενέργεια παλμού), κατά $\frac{1.5463 - 1.3135}{1.3135} \cdot 100\% = 17.72\%$ και έρχεται σε πλήρη συμφωνία με τις οπτικές

και ποιοτικές διαπιστώσεις που έχουμε κάνει παραπάνω για την τραχύτητα.

Οι διαπιστώσεις που έχουμε κάνει για την τραχύτητα είναι κυρίως πληροφοριακές, γιατί κατά βάση το βάθος φωτοαποδόμησης είναι το μοναδικό μέγεθος από αυτά που μπορεί να μας δώσει το προφιλόμετρο το οποίο μας ενδιαφέρει άμεσα αναφορικά με την τροποποίηση και βελτιστοποίηση των συνθηκών κάτω από τις οποίες μπορεί να λάβει χώρα η πραγματοποίηση της κατεργασίας εγχάραξης (scribing) και της συνακόλουθης φωτοαποδόμησης.

Ολοκληρώνουμε την ανάλυσή μας στο τρέχον Εδάφιο παραθέτοντας την εικόνα του προφίλ της τραχύτητας και του βάθους φωτοαποδόμησης για το αλουμινένιο Spot εκείνο που ακτινοβολήθηκε με παλμό Laser ακόμα μικρότερης ενέργειας, ήτοι 1 mJ. Η εικόνα αυτή θα εμφανιστεί παρακάτω, στο Σχήμα 6.40.:



Σχήμα 6.40. Απεικόνιση του προφίλ τραχύτητας και προσδιορισμός του βάθους φωτοαποδόμησης, όπως τη δίνει το προφιλόμετρο Alpha-Step IQ, για το Spot του λεπτού υμενίου από Al που ακτινοβολήθηκε με παλμό Laser ενέργειας 1 mJ (το μέγεθος του διαφράγματος από το οποίο διέρχεται η δέσμη είναι 1.5 μm).

Εδώ παρατηρούμε καταρχήν ότι το βάθος στο οποίο διεισδύει η δέσμη του Laser προκαλώντας φωτοαποδόμησης, είναι σαφώς ελαττωμένο από ό,τι όταν η ενέργεια έχει αυξηθεί αρχικά στα 2 mJ και κατά κύριο λόγο στα 3. Είναι αρκετά λογικό να εμφανίζονται τόσο πολύ μικρές τιμές στο βάθος αποδόμησης, σε σημείο που μπορούμε να πούμε ακόμα και ότι δε γίνεται (ουσιαστική) φωτοαποδόμηση, από τη στιγμή που οι προσπίπτουσες ακτίνες Laser με μέγιστη ένταση 1 mJ, από την οποία μόνο το 0.08 mJ απορροφάται από το υλικό, επιδρούν σε πολύ μικρό βαθμό στο Al.

Παρατηρώντας το Σχήμα πιο προσεκτικά, ψάχνουμε να βρούμε τη βαθύτερη κοιλία του προφίλ, η οποία μας δίνει μία εκτίμηση για το πόσο είναι το βάθος φωτοαποδόμησης στη συγκεκριμένη περίπτωση. Αυτό εμφανίζεται στην οριζόντια θέση 135 μm (η οποία είναι νοητή και έχει τιμή που βασίζεται σε μία μηδενική αναφορά) και έχει αριθμητική τιμή ίση με 250 nm περίπου, που ουσιαστικά αποτελεί τα 2/3 του πάχους του υμενίου, έστω και αν αυτό υφίσταται κάποιες μικρές αποκλίσεις από θέση σε θέση. Πάντως, αυτή η τιμή των 250 nm εμφανίζεται σε πολύ τοπικό επίπεδο, καθώς σε αρκετές ακόμα περιοχές της κυρίως ακτινοβολημένης επιφάνειας οι ακτίνες Laser έχουν παρεισφρήσει σε πολύ χαμηλότερο βάθος. Η περιοχή στην οποία παρουσιάζονται αρνητικές τιμές της τραχύτητας, και η οποία αποτελεί μια ένδειξη για το χωρίο από το οποίο αφαιρέθηκε υλικό, υπολογίζεται χονδρικά ότι έχει μήκος 75 μm, μία τιμή που αποκλίνει από τα 113 μm της οριζόντιας διάστασης, όπως αυτά έχουν μετρηθεί με το υποδεκάμετρο. Ενδέχεται οι περιοχές που βρίσκονται εκατέρωθεν του χωρίου μήκους 75 nm, κυρίως αυτές που εμφανίζονται ως μικροί λόφοι με αυξημένη τραχύτητα, να αντιπροσωπεύουν και αυτές περιοχές από τις

οποίες έχει αφαιρεθεί υλικό κατά την κατεργασία. Πάντως, όπως και παραπάνω, οι λόφοι που βρίσκονται πιο μακριά από το κυρίως ακτινοβολημένο (και μερικώς φωτοαποδομημένο) χωρίο ενδέχεται να αντιστοιχούν σε θερμικά επηρεασμένες ζώνες (HAZ) ή περιοχές στις οποίες έχει εκτοπιστεί αποβεβλημένο υλικό ή ποσότητα στερεοποιημένου τήγματος, το οποίο έχει σχηματιστεί ως συνέπεια της θέρμανσης του υλικού από τον παλμό Laser.

Όπως έχουμε δει και παραπάνω, η τραχύτητα – μέση και μέγιστη – της επιφάνειας που ακτινοβολήθηκε με Laser ενέργειας 2 mJ, παρουσιάζεται μεγαλύτερη από ό,τι στην περίπτωση των 3 mJ. Εντούτοις, η ίδια μονοτονία φαίνεται ότι δε διατηρείται αν ελαττώσουμε κι άλλο την ενέργεια, στο 1 mJ. Πιο συγκεκριμένα, δεν ισχύει για κάθε τιμή της ενέργειας ότι η ελάττωσή της επιφέρει αύξηση στην τραχύτητα. Μάλιστα, είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι η μέγιστη τιμή αυτής, η οποία έχει μετρηθεί από το προφιλόμετρο, παρουσιάζεται στην εικόνα ως

TIR	1.0358 μm
-----	-----------

 και υπολογίζεται κατά συνέπεια ίση με $R_z = 1.0358 \mu\text{m}$, είναι μικρότερη από ό,τι στις δύο προηγούμενες καταστάσεις (1.2652 μm για 3 mJ και 1.3135 μm για 2 mJ). Οι αντίστοιχες ποσοστιαίες μειώσεις είναι $\frac{1.2652 - 1.0358}{1.2652} = 18.13\%$ και $\frac{1.3135 - 1.0358}{1.3135} = 21.14\%$. Το γεγονός ότι η ενέργεια του Laser που προσπίπτει στο υμένιο είναι πλέον πολύ μικρή, σημαίνει ότι θα επηρεάσει τα χαρακτηριστικά μίας στενότερης περιοχής πάνω σε αυτό, κάτι που σχετίζεται και με μία προηγούμενη διαπίστωσή μας, σύμφωνα με την οποία η ομοιομορφία της επιφάνειας αυξάνεται όταν ελαττώνεται η ενέργεια του Laser (κάτι που είδαμε και στο Mo και στο Al). Η παραπάνω πρόταση από μόνη της επαρκεί για να αιτιολογήσει ικανοποιητικά αυτή την ελάττωση στην τραχύτητα. Παρατηρώντας επίσης ολόκληρο το προφίλ, βλέπουμε ότι οι τιμές της τραχύτητας μεταβάλλονται έντονα από θέση σε θέση, σε αντίθεση με το Mo, όπου οι διαβαθμίσεις είναι περισσότερο τοπικές και μικρότερες σε έκταση, κάτι που δικαιολογείται τόσο από τη φύση του Al ως υλικό όσο και από το γεγονός ότι είναι τόσο πολύ ανακλαστικό ώστε να προσπίπτει ακτινοβολία σε πολλά διαφορετικά σημεία πάνω στην επιφάνεια, επηρεάζοντας τόσο τη θερμοκρασία όσο και την τραχύτητα.

6.8.7. Παράθεση και σύγκριση υπολογισθεισών τιμών για την έκταση της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ) σε περιοχές των λεπτών υμενίων από Al και Mo που ακτινοβολήθηκαν με Laser. Εξαγωγή συμπερασμάτων.

Επί του παρόντος, έχει για εμάς ιδιαίτερη σημασία να παραθέσουμε τις αριθμητικές τιμές για τα εμβαδά της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ) που σχηματίζεται σε κάθε μία από τις ακτινοβολημένες περιοχές των υμενίων από Al και Mo. Πιο συγκεκριμένα, από τη στιγμή που η ανάλυση της Υποενότητας

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

6.8. είναι αφιερωμένη στο Al, θα παρατεθούν τα αντίστοιχα αριθμητικά αποτελέσματα πρώτα και θα ακολουθήσει η σύγκρισή τους με αυτά που αφορούν το Mo. Η βελτιστοποίηση της διαδικασίας φωτοαποδόμησης και η επιλογή του ιδανικού υλικού για την πραγματοποίησή της απαιτούν, μεταξύ άλλων, τον υπολογισμό και τη σύγκριση των HAZ, έχοντας υπόψη μας ότι θα πρέπει να υπερτερεί η φωτοαποδομημένη επιφάνεια της θερμικά επηρεασμένης ζώνης, ως ένα πρώτο (αλλά όχι απαραίτητα μοναδικό) βήμα για να κριθεί η κατεργασία επιτυχής. Προτιμάται δηλαδή ο λόγος (Φ/Α) προς HAZ να είναι όσο μεγαλύτερος γίνεται και σίγουρα μεγαλύτερος του 1.

Ο παρακάτω Πίνακας 6.9. θα μας βοηθήσει να βγάλουμε τα συμπεράσματά μας σχετικά με το πώς το υλικό και η ενέργεια παλμού επηρεάζουν τη HAZ, τόσο από μόνη της όσο και σε σύγκριση με τη φωτοαποδομημένη (μερικά ή ολικά) περιοχή. Η απαιτούμενη σύγκριση θα γίνει μεταξύ έξι Spots που ακτινοβολήθηκαν με παλμούς Laser μεταβλητής ενέργειας, που έχουν διέλθει από διάφραγμα διαμέτρου 1.5 μm (σημειώνεται εδώ ότι όλα τα πειράματα που έγιναν στο Al χρησιμοποιούσαν αυτή την τιμή διαφράγματος, σε αντίθεση με το Mo όπου έγινε χρήση δύο διαφορετικών τιμών, με τη δεύτερη να είναι τα 3 μm).

A/A Spot	Ενέργεια Laser (mJ)	Υλικό	Εμβαδό φωτοαποδομημένης επιφάνειας (cm^2)	Εμβαδό HAZ (cm^2)	Λόγος εμβαδών (Φ/Α) προς HAZ
1	3	Al	1.50890E-04	2.37380E-04	0.63565
2	2	Al	1.06276E-04	1.45176E-04	0.73205
3	1	Al	7.98940E-05	1.14241E-04	0.69935
4	3	Mo	2.18598E-04	1.11061E-04	1.96827
5	2	Mo	2.17663E-04	1.13920E-04	1.91067
6	1	Mo	9.93782E-05	1.39770E-04	0.71101

Πίνακας 6.9. Συγκεντρωτική παράθεση των εκτάσεων της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (HAZ) για κάθε ένα από τα ακτινοβοληθέντα Spots, καθώς επίσης και το λόγο εμβαδόν της φωτοαποδομημένης επιφάνειας προς τη HAZ.

Είναι χαρακτηριστικό ότι, σε κάθε περίπτωση που αφορά το Al, η θερμικά επηρεασμένη ζώνη (HAZ) είναι σημαντικά μεγαλύτερη της φωτοαποδομημένης περιοχής, όσον αφορά την έκταση. Αυτό δικαιολογείται από το γεγονός ότι οι αντίστοιχοι λόγοι φωτοαποδομημένης περιοχής προς HAZ, για κάθε ένα από τα Spots 1 έως 3 που σχετίζονται με το Al, είναι σημαντικά χαμηλότεροι της μονάδας (ταλαντεύονται γύρω από την τιμή 0.7). Αυτή η διαπίστωση σχετίζεται άμεσα με αυτά που έχουμε

αναφέρει παραπάνω, και σχετίζονται σε μεγάλο βαθμό με το πόση ενέργεια μπορεί να απορροφήσει το Al και αν αυτή είναι αρκετή να αποδομήσει το υμένιο. Όπως έχουμε πει επανειλημμένα, το Al είναι πολύ ανακλαστικό (με συντελεστή απορρόφησης μόνο 8%, τον οποίο βρήκαμε παραπάνω) με αποτέλεσμα να απορροφούνται πολύ μικρά ποσά ενέργειας. Από τη στιγμή που θα έχει απορροφηθεί έστω και λίγη από την ακτινοβολία, η θερμοκρασία του υμενίου στην περιοχή εφαρμογής της αυξάνεται. Μπορεί αυτή τη αύξηση να οδηγήσει στην τήξη περιοχών του υλικού, αλλά χρειάζεται μία σαφώς εντονότερη θερμοκρασιακή ανύψωση προκειμένου να απομακρυνθεί υλικό και να θεωρηθεί ότι έλαβε χώρα φωτοαποδόμηση. Αρχίζοντας την ανάλυσή μας, αναμέναμε οι θερμοκρασίες που προκαλούν μετάβαση στην αέρια φάση να επιτυγχάνονται πρακτικά γύρω από το σημείο εφαρμογής της δέσμης Laser, όπου η ενέργεια είναι μέγιστη (κατά το επίπεδο XY, και έχοντας στο νου μας ότι οι αριθμητικές τιμές της έντασης ακολουθούν κατανομή Gauss, όπως έχει προαναφερθεί). Κάτι τέτοιο συμπίπτει τελικά με την πραγματικότητα, καθώς σε μία πολύ μεγάλη έκταση δεν είναι επαρκής η θερμοκρασιακή ανύψωση για να οδηγήσει σε αποβολή υλικού. Από τη στιγμή όμως που η ανύψωση είναι υπαρκτή, είναι φυσική συνέπεια η εμφάνιση και ανάπτυξη εκτάσεων HAZ αρκετά μεγαλύτερο συγκριτικά με τις φωτοαποδομημένες επιφάνειες. Προφανώς κάτι τέτοιο δε μας ικανοποιεί ιδιαίτερα (ειδικά στην περίπτωση ακτινοβόλησης του Al με τη μέγιστη ενέργεια από τις τρεις χρησιμοποιηθείσες, δηλαδή τα 3 mJ), γι' αυτό το λόγο και απορρίπτουμε το Al για την κατεργασία της εγχάραξης (scribing), ενώ ταυτόχρονα δε διακείμεθα ευμενώς προς το Al ως ένα υλικό το οποίο θα μπορούσε να φωτοαποδομηθεί με κάποια άλλη μέθοδο (π.χ. διάτρηση με δημιουργία αυλακώσεων), η οποία αναμένεται να απασχολήσει μελλοντικούς μελετητές. Προφανώς θα προτιμηθεί το Mo, ενώ ταυτόχρονα αξίζει να γίνει μία προσπάθεια και σειρά από πειράματα στο μέλλον ώστε να διαπιστωθεί αν υπάρχουν άλλα υλικά εκτός του Mo που μπορούν να αποδομηθούν με καλύτερο και πληρέστερο τρόπο, αλλά και σε μεγαλύτερη έκταση, συγκριτικά με το Mo.

Η αντίθεση στους λόγους Φ/A περιοχής προς HAZ, μεταξύ των υλικών Mo και Al, είναι κάτι παραπάνω από εμφανές, καθώς ουσιαστικά δεν υπάρχει κάποιο αξιόλογο μέτρο σύγκρισης μεταξύ των τιμών που βρίσκονται στην περιοχή του 0.7 και σε αυτή του 2 (για τα Spots 4 και 5, καθώς το 6 αποτελεί εξαίρεση και θα μπορούσε να τοποθετηθεί στην ίδια «οικογένεια» με τα 1 έως 3, έστω και αν ανήκουν σε διαφορετικό υλικό από το 6). Επιστώντας την προσοχή μας στα Spots 4 και 5, παρατηρούμε όντως ότι η φωτοαποδομημένη περιοχή έχει διπλάσιο εμβαδό από τη HAZ. Αυτό καταδεικνύει το γεγονός ότι ακόμα και λιγότερο έντονες τιμές ακτινοβολίας από τη μέγιστη επιτεύξιμη ένταση κατά περίπτωση επαρκούν για να αφαιρέσουν υλικό καθ'όλο το βάθος του υμενίου, τη στιγμή που απλώς θερμικός επηρεασμός λαμβάνει χώρα μόνο σε θέσεις που θεωρούμε ότι μόλις που έχουν ακτινοβοληθεί. Σημαντικό ρόλο παίζει ο συντελεστής απόρροφησης του Mo (57.14%), χάρη στον οποίο μπορούν ιδιαίτερα υψηλά ποσά

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

ενέργειας (π.χ. έως 1.8 mJ για τη μέγιστη ενέργεια δέσμης των 3 mJ) να απορροφηθούν από τα άτομα του υλικού, συντελώντας στην ταχύτατη αύξηση θερμοκρασίας των ατόμων που αυτά περιλαμβάνουν. Αν επίσης λάβουμε υπόψη ότι τα σημεία τήξης και βρασμού του Mo χαρακτηρίζονται από μικρότερες αριθμητικές τιμές σε σχέση με αυτά του Al, αποκτά λογική η διαπίστωση ότι οι φωτοαποδομημένες επιφάνειες υπερτερούν σε σημαντικό βαθμό των HAZ.

7. ΑΝΑΛΥΣΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΚΑΙ ΠΑΡΑΘΕΣΗ ΣΥΓΚΡΙΣΕΩΝ ΜΕ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ

7.1. Σκοπός του Κεφαλαίου

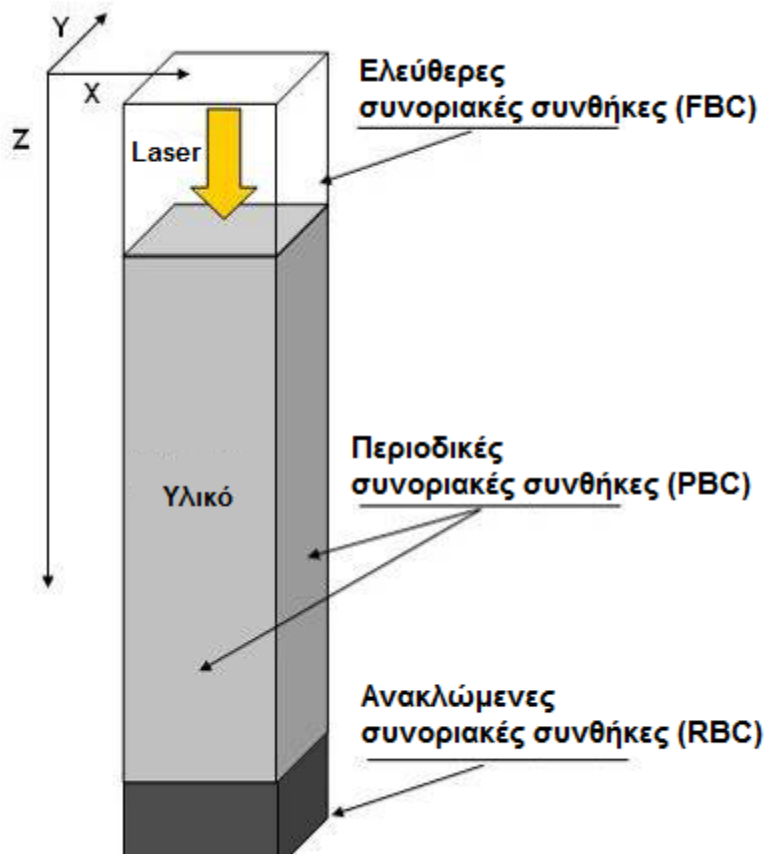
Στα προηγούμενα Κεφάλαια, έχουμε ολοκληρώσει και αναλύσει σε βάθος την ανάλυσή μας σχετικά τόσο με την ανάπτυξη του κώδικα Μοριακής Δυναμικής, σε επίπεδο μαθηματικών σχέσεων (Κεφάλαιο 4) και προγραμματισμού σε MATLAB (Κεφάλαιο 5), όσο και με την πειραματική διάταξη και διαδικασία στο Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών (ΕΙΕ) (Κεφάλαιο 6). Το παρόν Κεφάλαιο χρησιμοποιεί όλα τα σημαντικά στοιχεία που ελήφθησαν από τα προηγούμενα, με σκοπό την παρουσίαση και διερεύνηση των αποτελεσμάτων που έχουν προκύψει από την εφαρμογή του υπολογιστικού κώδικα MATLAB και των πειραμάτων, στα πλαίσια της μελέτης του φαινομένου της φωτοαποδόμησης με Laser. Στα πλαίσια της παρουσίασης αυτής, συμπεριλαμβάνονται και ορισμένα συγκριτικά στοιχεία όσον αφορά τα αποτελέσματα που έχουν εξαχθεί από το πείραμα και τον υπολογιστικό κώδικα, όπου αυτό είναι εφικτό. Καθώς στο πείραμα διερευνήσαμε τις διαφορετικές τιμές του βάθους φωτοαποδόμησης, για τις τιμές πυκνότητας ενέργειας Laser 1 mJ, 2 mJ και 3 mJ, θα χρησιμοποιήσουμε την ποσότητα αυτή (δηλαδή το βάθος φωτοαποδόμησης) ως μέτρο σύγκρισης για την ανάλυσή μας. Σε ό,τι αφορά την υπολογιστική ανάλυση, θα δοθεί ιδιαίτερη έμφαση στην κατανομή των θερμοκρασιών εντός του όγκου προσομοίωσης και, κατ'επέκταση, σε όλο το υλικό, ενώ τα παραπάνω στοιχεία θα χρησιμοποιηθούν ως βάση για την ανάλυση των διακριτών περιοχών φωτοαποδόμησης που χαρακτηρίζονται από ένα διαφορετικό μηχανισμό αφαίρεσης υλικού η καθεμία.

7.2. Χρήση της μεθόδου Μοριακής Δυναμικής στα πλαίσια της υπολογιστικής αναπαράστασης της κατεργασίας

Όπως έχουμε διαπιστώσει σε όλα τα προηγούμενα Κεφάλαια, έχει γίνει μία πολύ μεγάλη προσπάθεια, τις περισσότερες φορές επιτυχημένη, από διάφορους ερευνητές, ώστε να προσομοιώσουν τη φωτοαποδόμηση μεταλλικών υλικών με Laser με χρήση Μοριακής Δυναμικής (MD) ανάλυσης. Κάτι

τέτοιο έχει σαν σκοπό τη διεξοδικότερη μελέτη των διεργασιών που λαμβάνουν χώρα εντός του υλικού σε *μικροκλίμακα*, λόγω της επίδρασης μεταξύ ακτινοβολίας Laser και ύλης. Με το να πραγματοποιηθεί μία τέτοια ανάλυση, δίνεται το έναυσμα σε μελλοντικούς ερευνητές και μελετητές στο να προτείνουν νέες και καινοτομικές λύσεις που αποσκοπούν στη βελτιστοποίηση της διαδικασίας φωτοαποδόμησης, καθώς επίσης και στην ανάπτυξη και διάδοσή της σε ευρύτερο επίπεδο. Η ελάχιστη απαίτηση που θα πρέπει να χαρακτηρίζει εντέλει τον κώδικα MD που αναπτύχθηκε σε MATLAB ήδη από το Κεφάλαιο 5, είναι να μπορεί να εξάγει το βάθος φωτοαποδόμησης σε ένα μεταλλικό υλικό λόγω της επίδρασης του Laser, αλλά και να δίνει ικανοποιητικές και αξιόπιστες πληροφορίες για το προκύπτον θερμοκρασιακό πεδίο, μέσω των οποίων θα είναι εφικτή και η διερεύνηση των βασικών μηχανισμών φωτοαποδόμησης που λαμβάνουν χώρα καθώς η πυκνότητα ενέργειας Laser αυξάνεται, αλλά και καθώς διάφορες άλλες σημαντικές παράμετροι μεταβάλλονται.

Στα πλαίσια της υπολογιστικής μελέτης που έγινε στη MATLAB, χρησιμοποιήθηκε ως υλικό προσομοίωσης το *μολυβδαίνιο* (Mo), ώστε η θεωρητική ανάλυση να γίνει σε πλήρη συμφωνία με το υλικό του λεπτού υμενίου από Mo, που χρησιμοποιήθηκε στο ΕΙΕ κατά τη διεξαγωγή των πειραμάτων. Εκτός των άλλων, το Mo είναι ένα υλικό που βρίσκει σημαντικές εφαρμογές στους τομείς της μεταλλουργίας, της βιομηχανίας, της βιοχημείας και της ιατρικής, ενώ διάφορα κράτη όπως η Κίνα, οι ΗΠΑ και το Περού το παράγουν με ιδιαίτερη συχνότητα και το χρησιμοποιούν εξίσου συχνά σε ένα μεγάλο εύρος εφαρμογών. Η αρχική θερμοκρασία του υλικού, άρα και της προσομοίωσης, ορίζεται στους 27°C (300 K, θερμοκρασία περιβάλλοντος), ενώ το εστιακό επίπεδο της δέσμης είναι η επιφάνεια του υλικού ($Z = 0$). Η διεύθυνση διάδοσης της δέσμης Laser είναι η Z , κάτι που σημαίνει ότι η δέσμη προσπίπτει κάθετα στην επιφάνεια του υλικού και ακολουθεί την ίδια διεύθυνση καθ'όλη τη διάρκεια της εξέλιξης του φαινομένου. Το Σχήμα 7.1. παρακάτω, δείχνει ποιες οριακές συνθήκες (ελεύθερες, περιοδικές ή ανακλώμενες) θα εφαρμόζονται σε κάθε περίπτωση, ανάλογα με το τμήμα του υλικού που εξετάζεται.



Σχήμα 7.1. Σχηματική ανάλυση του προβλήματος που καλείται να επιλυθεί με χρήση Μοριακής Δυναμικής.

Οι *περιοδικές συνοριακές συνθήκες* που εφαρμόζονται εντός του όγκου προσομοίωσης υπαγορεύονται από την παραδοχή, η οποία μπορεί να γίνει χωρίς βλάβη της γενικότητας, ότι το υλικό εκτείνεται απείρως στο επίπεδο XY. Οι συνθήκες αυτές εφαρμόστηκαν και εντός του κώδικα MATLAB, χρησιμοποιώντας, όπως έχουμε αναφέρει στο Κεφάλαιο 5, τις συναρτήσεις *VWrap* και *VWrapAll*, οι οποίες έχουν οριστεί καταρχήν από το Raparort στη βιβλιογραφία [113]. Στην άνω επιφάνεια του υλικού, εφαρμόζονται *ελεύθερες συνοριακές συνθήκες*, χάρη στις οποίες επιτρέπεται η απομάκρυνση σωματιδίων ή ομάδων αυτών, κάθε φορά που απορροφώνται φωτόνια από αυτά και η συνολική ενέργεια που λαμβάνουν υπερνικά την ορισθείσα ενέργεια συνοχής στο Κεφάλαιο 4. Τέλος, στην κατώτατη επιφάνεια του όγκου, η εφαρμογή *ανακλώμενων οριακών συνθηκών* έχει ως σκοπό τη διατήρηση της ολικής ενέργειας, του όγκου και του συνολικού αριθμού σωματιδίων, χωρίς τα προαναφερθέντα μεγέθη να επηρεάζονται καθόλου από τυχόν απομακρύνσεις σωματιδίων στο υπόλοιπο του όγκου.

Για λόγους απλοποίησης της διαδικασίας, και θεωρώντας ότι κάτι τέτοιο δεν επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό τα τελικά αποτελέσματά μας, θεωρήσαμε ως *γενικευμένη οριακή συνθήκη* το γεγονός ότι οι θέσεις των ατόμων που απέχουν (κατά το επίπεδο XY) απόσταση μεγαλύτερη από την ακτίνα της δέσμης Laser στο εστιακό επίπεδο, σε σχέση με το σημείο εφαρμογής της δέσμης, παραμένουν *αμετάβλητες*. Σε αυτή

την περίπτωση, οι ταχύτητες που θα χαρακτηρίζουν τα άτομα δε θα αφορούν κίνηση από το ένα σημείο στο άλλο, αλλά *ταλάντωση* γύρω από ένα σταθερό σημείο. Επίσης, μπορούμε να παραδεχτούμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, ότι τα άτομα που απέχουν απόσταση μεγαλύτερη από την προαναφερθείσα ακτίνα (r_b ή r_{fo}) παραμένουν ανεπηρέαστα από την κατεργασία και δεν αποδομούνται, παρά μόνο παρουσιάζουν αύξηση θερμοκρασίας λόγω θερμικής επιρροής από τις ασθενέστερες ακτίνες Laser της Gaussian δέσμης. Μία τέτοια παραδοχή θα μας οδηγήσει σε έναν τελικό όγκο προσομοίωσης που θα περιλαμβάνει άτομα μόνο σε ακραίες θέσεις (δεξιά και αριστερά), τα οποία δε θα έχουν υποστεί φωτοαποδόμηση. Κάτι τέτοιο ανταποκρίνεται στην πραγματικότητα, καθώς δεν έχει λογική βάση να θεωρήσουμε ότι κάθε σωματίδιο που ακτινοβολείται από Laser θα φωτοαποδομηθεί απαραίτητα (άλλωστε παίζει ρόλο το *κριτήριο ενέργειας συνοχής* για το οποίο έχει γίνει λόγος στο Κεφάλαιο 4).

7.3. Εφαρμογή προσομοιώσεων MD για την ανάλυση της διαδικασίας φωτοαποδόμησης υλικών με Laser. Έμφαση στην εύρεση του αριθμού φωτοαποδομημένων σωματιδίων, του βάθους φωτοαποδόμησης και της θερμοκρασίας του συστήματος προσομοίωσης

Πρωταρχικός στόχος της MD ανάλυσης που διενεργείται επί του παρόντος είναι η εύρεση του βάθους εντός του υλικού στο οποίο φτάνει η αφαίρεση σωματιδίων λόγω φωτοαποδόμησης. Το φαινόμενο αυτό οφείλεται στην αύξηση της θερμοκρασίας των ηλεκτρονίων και της κρυσταλλικής δομής, ως φυσικό επακόλουθο της απορρόφησης της ενέργειας φωτονίων της δέσμης Laser από το υλικό. Η αφαίρεση τμημάτων υλικού οφείλεται στις αλλαγές φάσης που λαμβάνουν χώρα λόγω της υπόψη αύξησης της θερμοκρασίας. Όσο εξελίσσεται το φαινόμενο, λαμβάνουν χώρα σύνθετες μηχανικές και θερμικές διεργασίες που συμβάλλουν, κάθε μία από την πλευρά της, στην απομάκρυνση του υλικού. Κατά κύριο λόγο, ο ρυθμός και η έκταση απομάκρυνσης του υλικού εξαρτώνται από τη θερμοκρασία που αναπτύσσεται σε αυτό.

Το αρχικά στερεό υλικό του Mo τήκεται στην ιδιαίτερα υψηλή θερμοκρασία (συγκριτικά με το μεγαλύτερο αριθμό μεταλλικών και μεταλλοειδών υλικών) των 2896 K, ενώ υφίσταται πλήρη βρασμό στους 4912 K. Επίσης, αρχίζει να οξειδώνεται ήδη από τους 300°C (573 K). Το Nd:YAG Laser που χρησιμοποιήθηκε στα πλαίσια της μελέτης μας παράγει παλμούς διάρκειας μερικών *nanoseconds* (10 ns για την ακρίβεια), με αποτέλεσμα το υλικό να περνάει, έστω και στιγμιαία, στην υγρή φάση προτού εξαερωθεί. Βέβαια, η διάρκεια κατά την οποία το υλικό παραμένει στην υγρή φάση είναι πολύ μικρή, λόγω της ταχείας αύξησης θερμοκρασίας που λαμβάνει χώρα, και επομένως, με σκοπό την απλοποίηση της προσομοίωσής μας, μπορεί να αμεληθεί, με την προοπτική να συμπεριληφθεί σε μελλοντικές

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

αναλύσεις και προτάσεις για βελτίωση της προσομοίωσης, όπως θα αναφέρουμε χαρακτηριστικά και στο επόμενο Κεφάλαιο 8.

Είναι πάντως σημαντικό να αναφερθεί ότι οι αλλαγές φάσης που πραγματοποιούνται εντός του υλικού επηρεάζονται σημαντικά από παράγοντες όπως η αρχική τιμή της θερμοκρασίας και ο ρυθμός αύξησης αυτής.

Στον παρακάτω Πίνακα 7.1. εμφανίζονται διάφορα σημαντικά μεγέθη που χρησιμοποιούνται στα πλαίσια της προσομοίωσης MD που διεξάγεται επί του παρόντος:

	Παράμετρος	Συμβολισμός Παραμέτρου	Αριθμητική Τιμή	Μονάδα Μέτρησης
Παράμετροι υλικού	Ακτίνα ατόμου Μολυβδαινίου (Mo)	r_a	1.18	Å
	Ακμή χωροκεντρωμένου κύβου BCC	α_c	2.7252	Å
	Παράμετρος ενέργειας Morse	D	0.8032	eV
	Παράμετρος απόστασης Morse	a	1.5079	Å ⁻¹
	Απόσταση ισορροπίας	r_0	2.976	Å
	Απόσταση αποκοπής	r_c	10	Å
	Μάζα ατόμου Mo	m	95.94	amu
	Συντελεστής ανάκλασης	R	42.86%	
	Ενέργεια συνοχής (σε μακροεπίπεδο)	C	-6.82	eV
	Παράμετρος	Συμβολισμός Παραμέτρου	Αριθμητική Τιμή	Μονάδα Μέτρησης
Παράμετροι Laser	Διάρκεια παλμού	t_p	10	ns
	Νεκρός χρόνος	t_d	1	ns
	Μήκος κύματος	λ	355	nm
	Ακτίνα Laser στο εστιακό επίπεδο	r_{f0}	1	nm
	Συντελεστής ακρίβειας	a	4	
	Συντελεστής νόμου Beer-Lambert	β	10^8	Å ⁻¹

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

	Χρόνος μέγιστης ισχύος Laser	t_{MLP}	0	
	Χρόνος Full Width at Half Maximum (FWHM)	t_{FWHM}	10	ns
Παράμετροι Χρόνου	Διάρκεια χρονικού βήματος	Δt	50	ps
Παράμετροι Θερμοκρασίας	Αρχική θερμοκρασία υλικού	T_{init}	300	K
	Σημείο τήξης Mo	T_m	2896	K
	Σημείο βρασμού Mo	T_b	4912	K

Είναι σημαντικό να αναφέρουμε εδώ ότι η κρυσταλλική δομή BCC παραμένει σταθερή στο Mo ανεξάρτητα από τη θερμοκρασία στην οποία βρίσκεται το υλικό, κάτι που απλοποιεί σημαντικά την ανάλυσή μας. Πληροφοριακά, κάτι τέτοιο έρχεται σε σαφή αντίθεση με την περίπτωση υλικών όπως ο Fe, του οποίου η αρχική BCC κρυσταλλική δομή σε θερμοκρασία περιβάλλοντος μετασχηματίζεται σε FCC στους 1118 K και ξανά σε BCC στους 1663 K [E1].

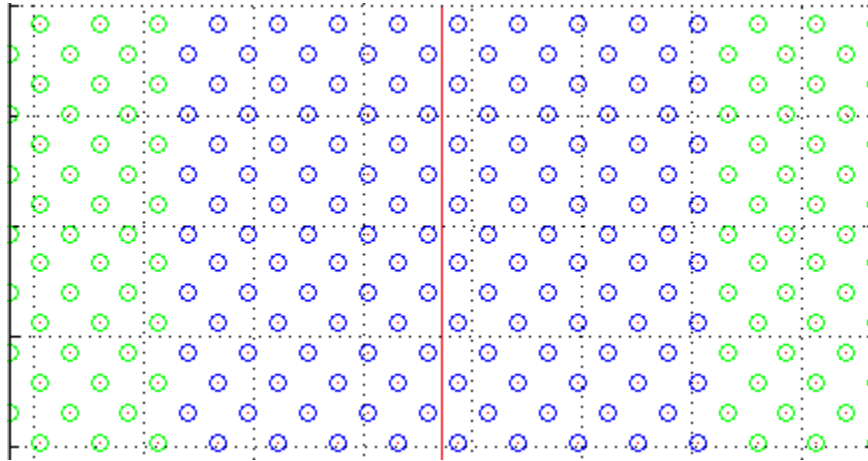
Αρχίζοντας την προσομοίωση MD, καθορίζουμε τις *αρχικές συνθήκες* που περιγράφουν το υπό κατάστρωση μοντέλο, και οι οποίες περιλαμβάνουν τη δομή του υλικού, τις θέσεις των ατόμων, τις ταχύτητές του, τις επιταχύνσεις του και τις συνοριακές συνθήκες που πρέπει να ικανοποιηθούν στον ιδανικό κρύσταλλο. Παραδεχόμαστε ότι οι αριθμητικές τιμές των ιδιοτήτων και σταθερών που περιγράφηκαν στα πλαίσια του Πίνακα 7.1. διατηρούνται σταθερές καθ'όλη τη διάρκεια εξέλιξης της προσομοίωσης. Ένα σημαντικό θετικό στοιχείο όσον αφορά την προσομοίωση σε MATLAB έχει να κάνει με το γεγονός ότι δεν υπάρχουν περιορισμοί ως προς τον αριθμό των ατόμων που μπορούν να εισαχθούν εντός του υπολογιστικού μοντέλου. Είναι πάντως σημαντικό ο αριθμός αυτός να μην εκτείνεται πέρα από κάποια καθορισμένα όρια, προκειμένου να μην αυξάνεται σε δυσθεώρητα επίπεδα ο χρόνος εκτέλεσης του κώδικα και, κατ'επέκταση, το υπολογιστικό κόστος.

Θεωρούμε ότι το προς ακτινοβολήση τεμάχιο, όπως έχει αναφερθεί και παραπάνω, είναι από το υλικό *μολυβδαίνιο* (Mo), όπως συμβαίνει και στο πείραμα. Υποθέτουμε ότι η διατομή του τεμαχίου είναι πλήρως ορθογωνική, χωρίς δηλαδή να λαμβάνονται υπόψη ορισμένες γεωμετρικές ατέλειες τις οποίες πιθανόν να έχει το πραγματικό δοκίμιο που χρησιμοποιήθηκε στα πλαίσια των πειραμάτων. Είναι πολύ σημαντικό εδώ να οριστεί ο αριθμός των ατόμων ανά διάσταση κατά τέτοιον τρόπο ώστε να ικανοποιείται η *αναλογία διαστάσεων* πάνω στο πραγματικό δοκίμιο. Σύμφωνα με μετρήσεις που έγιναν στο ΕΙΕ σχετικά με τις πραγματικές διαστάσεις του τεμαχίου από Mo, προέκυψε ότι η οριζόντια

διάσταση του μήκους είναι ίση με $x = 1.3 \text{ mm}$ και η κατακόρυφη με $z = 0.8 \text{ mm}$. Λόγω αυτής της θεώρησης θα πρέπει ο αριθμός των ατόμων που περιλαμβάνει ο όγκος προσομοίωσης, στις διαστάσεις X και Y, να επιλεγεί κατά τέτοιον τρόπο ώστε να ικανοποιείται η υπόψη αναλογία 1.3:0.8.

Όσον αφορά τις διαστάσεις στις οποίες θα γίνει η ανάλυση, το δοκίμιο θα αποτελείται από άτομα που θα εκτείνονται κατά τις τρεις διαστάσεις του χώρου, δηλαδή του μήκους (X), του πλάτους (Y) και του βάθους (Z), με την τελευταία από τις τρεις διαστάσεις να είναι πολύ σημαντική στην ανάλυσή μας, καθώς ο βαθμός αφαίρεσης ατόμων από την επιφάνεια προσομοίωσης, λόγω της αλληλεπίδρασής τους με τα φωτόνια της δέσμης Laser, καθορίζει και το ιδιαίτερα σημαντικό, για την παρούσα μελέτη, μέγεθος του βάθους φωτοαποδόμησης. Διάφορες μελέτες που έχουν διεξαχθεί, όπως η [E2], η οποία αφορά προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής για συμβατική κοπή με κοπτικό εργαλείο ορθογωνικής διατομής, περιορίζουν το μοντέλο σε δύο διαστάσεις. Είναι προφανές ότι η θεώρηση ενός δισδιάστατου (2D) συστήματος συντεταγμένων για την εκπόνηση της παρούσας μελέτης δεν αντιπροσωπεύει την περίπτωση των αληθινών κατεργασιών, οι οποίες λαμβάνουν χώρα σε χώρο τριών διαστάσεων (ακόμα και στην περίπτωση των λεπτών υμενίων, παρ'ότι η μία διάσταση είναι σαφώς μικρότερη από τις άλλες δύο δεν παύει να υπάρχει και να χαρακτηρίζεται από μία συγκεκριμένη αριθμητική τιμή). Η συγκεκριμένη θεώρηση είναι επαρκής για το επίπεδο αρκετών από τις αναλύσεις που διεξάγονται, όχι όμως και της παρούσας, καθώς είναι σημαντικό να διαπιστώσουμε πώς κινούνται τα σωματίδια του ακτινοβοληθέντος υλικού κατά το επίπεδο XY και όχι κατά μία μόνο διάσταση.

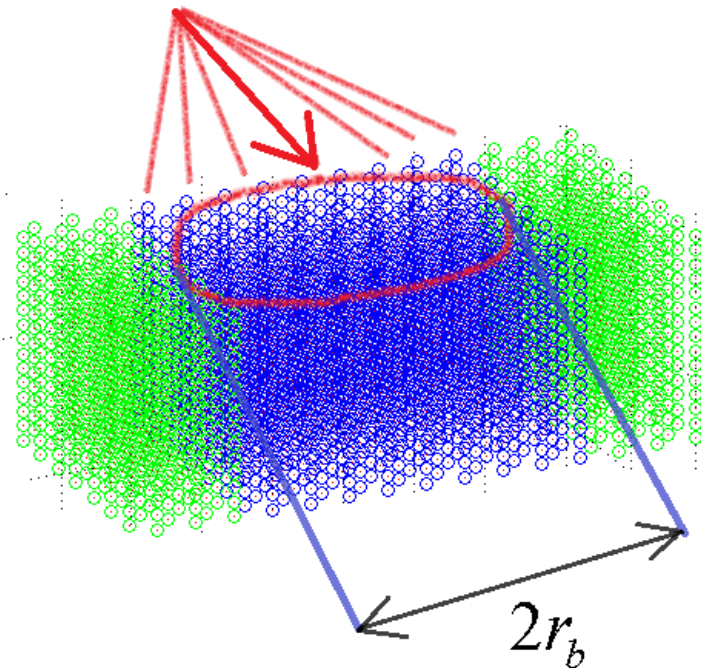
Το παρακάτω Σχήμα 7.2. απεικονίζει την επιφάνεια προσομοίωσης στην αρχική της κατάσταση, όπως αυτή έχει σχηματιστεί μέσα από τον κώδικα MATLAB που περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 5. Σημειώνεται ότι τα άτομα της επιφάνειας που βρίσκονται εκατέρωθεν του σημείου εφαρμογής του παλμού και σε απόσταση ίση με την ακτίνα του Laser στο εστιακό επίπεδο, έχουν επιλεγεί να απεικονίζονται με χρώμα μπλε. Τα υπόλοιπα άτομα, όπως θα δούμε στο παρακάτω Σχήμα, έχουμε επιλέξει να έχουν πράσινο χρώμα. Οι μικρές κόκκινες κουκκίδες που εμφανίζονται έχουν ως κορυφή το κέντρο κάθε ατόμου και εκτείνονται, υπό μορφή βέλους, προς μία τυχαία κατεύθυνση ανά άτομο, ώστε να απεικονίζονται τα διανύσματα των ταχυτήτων.



Σχήμα 7.2. Η αρχική μορφή του υπό ακτινοβολία δοκιμίου, όπως εμφανίζεται στον κώδικα MATLAB. Σε αυτό το Σχήμα, το δοκίμιο απεικονίζεται κατά τους άξονες x και y . Με κόκκινο χρώμα έχει σημειωθεί το νοητό κέντρο συμμετρίας για το υπόψη επίπεδο. Σημειώνεται ότι ο αριθμός των ατόμων που έχουμε επιλέξει να επιδρούν σημαντικά με την ακτίνα του Laser στην προσομοίωσή μας (σε αντίθεση με τα λεγόμενα «boundary atoms») είναι 9 (εννέα).

Παρακάτω, στο Σχήμα 7.3. εμφανίζεται η τρισδιάστατη απεικόνιση του δοκιμίου που πρόκειται να ακτινοβοληθεί, προσθέτοντας στις δύο διαστάσεις του Σχήματος 8.2. και το πάχος (κατά τον άξονα των z). Ακριβώς πάνω από τη φωτογραφία, έχουμε σχεδιάσει τη δέσμη Laser που προσπίπτει στο δοκίμιο, ενώ επίσης έχουμε επισημάνει και την περιοχή η οποία καταρχήν επιθυμούμε να προσβληθεί από αυτή. Καθώς ορίσαμε την ακτίνα του Laser στο εστιακό επίπεδο ίση με $1 \text{ nm} = 10 \text{ \AA}$, με δεδομένη τη διατομική απόσταση των 2.7252 \AA μεταξύ γειτονικών ατόμων Mo επιλέγουμε ότι θα υπάρχουν 4 άτομα από τη μία

και την άλλη πλευρά που ουσιαστικά θα βρίσκονται στην κύρια περιοχή επιρροής της δέσμης.



Σχήμα 7.3. Απεικόνιση του προς ακτινοβολήση δοκιμίου στο γραφικό περιβάλλον της MATLAB, σε τρεις διαστάσεις. Η δέσμη Laser, που έχει σημειωθεί με κόκκινο χρώμα, προσπίπτει κατά τον άξονα του βάθους z. Η ακτίνα της δέσμης στο εστιακό επίπεδο ισούται με $r_b = 10\text{\AA}$. Αυτό σημαίνει ότι η δέσμη πρακτικά μπορεί να παρομοιαστεί με μία έλλειψη οριζόντιας διαμέτρου $2r_b$, όπως χαρακτηριστικά έχει σημειωθεί στο Σχήμα.

Οι αρχικές ταχύτητες των σωματιδίων του κρυστάλλου, όπως αυτά απεικονίζονται εντός της επιφάνειας προσομοίωσης του υπολογιστικού κώδικα, ακολουθούν κανονική κατανομή (Gauss) στην αρχική θερμοκρασία περιβάλλοντος των 300 K (27°C). Για μεγαλύτερη ακρίβεια στους υπολογισμούς, θα μπορούσε η υπόψη κατανομή να αντικατασταθεί από την παρεμφερή Maxwell-Boltzmann, χωρίς ωστόσο τα αποτελέσματα να επηρεάζονται σε πολύ μεγάλο βαθμό, κάτι που οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η κατανομή Gauss εξακολουθεί να είναι ικανοποιητική. Η φωτοαποδόμηση του υλικού εξετάζεται για περιόδους που φτάνουν έως και την ολοκλήρωση του ενός παλμού διάρκειας 10 ns, ενώ κάθε χρονικό βήμα επιλέγεται να έχει διάρκεια το ένα 200στό του παλμού Laser, δηλαδή τα 50 ps, προκειμένου να γίνεται ικανοποιητική απεικόνιση και αναπαράσταση του φαινομένου, των μετασχηματισμών της επιφάνειας προσομοίωσης, αλλά και της εξέλιξης του βάθους φωτοαποδόμησης και των υπόλοιπων παραμέτρων που σχετίζονται με το φαινόμενο και μας ενδιαφέρουν. Αυτό σημαίνει, όπως είδαμε και στο κεφάλαιο 5, ότι ο αριθμός των χρονοβημάτων που θα απαιτηθούν για την ολοκλήρωση της κατεργασίας είναι 200. Η εφαρμογή περιοδικών συνοριακών συνθηκών κατά μήκος των αξόνων X και Y χρησιμεύει στην ικανοποίηση της παραδοχής του θεωρητικά άπειρου μέσου. Όσον αφορά τη Z διεύθυνση, στο άνω

μήμα έχουν εφαρμοστεί ελεύθερες συνοριακές συνθήκες και στο κάτω ανακλώμενες, για τους λόγους που έχουν αναφερθεί παραπάνω.

Η χωρική κατανομή της ακτίνας Laser είναι και αυτή Gauss, όπως συμβαίνει και στην περίπτωση του δοκιμίου. Ο αριθμός των εναποτιθέμενων φωτονίων εντός του δοκιμίου είναι εκθετικά μειούμενος καθώς αυξάνεται το βάθος, ακολουθώντας το νόμο *Beer-Lambert*. Η ενέργεια των φωτονίων μεταφέρεται στα σωματίδια του κρυστάλλου, με αποτέλεσμα την αύξηση της κινητικής ενέργειας του συστήματος των σωματιδίων.

Όσον αφορά τα υπόλοιπα χαρακτηριστικά της δέσμης Laser, το μήκος κύματος αυτής είναι ίσο με 355 nm, ώστε να βρίσκεται σε πλήρη συμφωνία με το Nd:YAG Laser που χρησιμοποιήθηκε στο ΕΙΕ κατά τη διεξαγωγή της πειραματικής διαδικασίας. Η διάρκεια παλμού των 10 ns, αλλά και ο συνολικός χρόνος επίδρασης του Laser στο υλικό, είναι χαρακτηριστικά που παραμένουν σταθερά καθ'όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης.

Προκειμένου για τη διερεύνηση του βάθους της οπής που δημιουργείται κατά την απομάκρυνση του υλικού, είναι σημαντική η μελέτη της διαδικασίας φωτοαποδόμησης τόσο μεταξύ του πρώτου και του τελευταίου χρονικού βήματος, όσο και για διαφορετικές τιμές της πυκνότητας ενέργειας Laser, τουλάχιστον όσον αφορά τις τιμές του 1 mJ, των 2 mJ και των 3 mJ που χρησιμοποιήθηκαν κατά τη διάρκεια των πειραμάτων.

Όσον αφορά τον καθορισμό των αρχικών ταχυτήτων των σωματιδίων, είναι σημαντικό να οριστούν κατά τέτοιο τρόπο ώστε να ακολουθούν την κατανομή Gauss και να συμβάλλουν στη διατήρηση της ολικής ορμής του συστήματος στη μηδενική τιμή. Με αυτό τον τρόπο εξασφαλίζεται η περιέλευση του συστήματος σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας, κάτι που ελέγχεται με τη βοήθεια του κριτηρίου σύγκλισης ταχυτήτων, μέσω της ποσότητας $a(t)$ που παριστάνει τη συνάρτηση σύγκλισης ταχυτήτων, όπως αυτή έχει αναφερθεί από το Rieth στη βιβλιογραφία [130] αλλά και έχει εφαρμοστεί στο Κεφάλαιο 4. Ο τρόπος με τον οποίο έχει οριστεί στη MATLAB η συνάρτηση σύγκλισης ταχυτήτων, χρησιμοποιώντας δηλαδή την προγραμματιστική συνάρτηση *AConv*, οδηγεί σε τιμές που ικανοποιούν σε αποδεκτό βαθμό το κριτήριο σύγκλισης των ταχυτήτων. Από τη στιγμή που η τιμή $a(t)$, η οποία εξαρτάται από διάφορες τιμές ταχύτητας που έχουν οριστεί με τη βοήθεια μιας γεννήτριας τυχαίων αριθμών (random number generator) κατά τέτοιο τρόπο, ώστε να ακολουθούν Gauss κατανομή γύρω από την ταχύτητα του κέντρου μάζας (που εξαρτάται από την αρχική θερμοκρασία του κρυσταλλικού πλέγματος), υπολογίζεται σε κάθε τρέξιμο του κώδικα ίση με μία τιμή που δεν υπερβαίνει το 1.9, μπορούμε να προχωρήσουμε άφοβα στη συνέχιση της προσομοίωσης, θεωρώντας προφανώς ότι η ισορροπία έχει επιτευχθεί. Γενικότερα, ορίσαμε ότι μπορεί να επιτυγχάνεται ισορροπία εφόσον:

η απόλυτη τιμή της διαφοράς μεταξύ της αριθμητικής τιμής της συνάρτησης $a(t)$ και του αριθμού $5/3$ είναι μικρότερη του 0.25.

Το γεγονός ότι η συνθήκη ικανοποιείται μας απαλλάσσει από επιπλέον επαναληπτικούς αλγορίθμους Verlet που θα μπορούσαν να δυσχεράνουν την ολοκλήρωση της πειραματικής διαδικασίας ή, τουλάχιστον, να αυξήσουν κατά πολύ τον ολικό χρόνο περαίωσης της προσομοίωσης.

Λαμβάνοντας ως παράδειγμα το πρώτο από τα δύο υμένια που χρησιμοποιήθηκαν στο πείραμα, παρατηρούμε ότι αυτό έχει ως υλικό το Mo και χαρακτηρίζεται από οριζόντιες (X) και κατακόρυφες (Y) διαστάσεις ίσες με 13 και 8 nm αντίστοιχα, τη στιγμή που το πάχος (Z) του υμενίου είναι τουλάχιστον 5 τάξεις μεγέθους μικρότερο από την κατακόρυφη διάσταση, οριζόμενο στα 280 nm. Με δεδομένο ότι η διατομική απόσταση μεταξύ γειτονικών ατόμων Mo στην αρχική (ισορροπημένη) κρυσταλλική δομή είναι ίση με 2.7252 Å, αρχικά βλέπουμε ότι υπάρχει η ανάγκη για ενσωμάτωση 103 ατόμων προκειμένου να αναπαρασταθεί το πάχος κατά Z, αλλά σαφώς περισσότερων αναφορικά με τις διαστάσεις X και Y ($4.7703 \cdot 10^7$ και $2.9356 \cdot 10^7$ αντίστοιχα), οδηγώντας εντέλει σε έναν όγκο προσομοίωσης στον οποίο το πλήθος των ατόμων είναι της τάξης των 10^{17} , ο οποίος δεν είναι εφικτό να προσομοιωθεί χρησιμοποιώντας τη MATLAB, επειδή η υπολογιστική ισχύς που παρέχει δεν είναι ικανή να δώσει αποτελέσματα σε εύλογο χρονικό διάστημα, για τόσο μεγάλους και εκτεταμένους όγκους. Για τον παραπάνω λόγο, αξίζει να επικεντρωθούμε σε ένα μικρότερο όγκο ο οποίος βρίσκεται γύρω από την περιοχή από την οποία σίγουρα θα αρχίσει να υφίσταται φωτοαποδόμηση. Ως αφετηρία για την κατάστρωση του όγκου του μοντέλου θα είναι το γεγονός ότι η ακτίνα του παλμού στο εστιακό επίπεδο είναι ίση με 1 nm, ή 10 Å, δηλαδή $\frac{10}{2.7252} = 3.6695$ φορές μεγαλύτερη από τη διατομική απόσταση.

Αυτό σημαίνει ότι έως και τέσσερα άτομα πάνω και κάτω (κατά Y) αλλά και δεξιά και αριστερά (κατά X) από το σημείο εφαρμογής της δέσμης, θα βρίσκονται εντός της περιοχής επιρροής αυτής. Μία αρχική και ικανοποιητική θεώρηση έχει να κάνει με τον ορισμό ενός κυβικού όγκου που αποτελείται από 15 σωματίδια ανά διάσταση, δηλαδή συνολικά 3375. Το γεγονός ότι η κάθε διάσταση απαρτίζεται από 15 σωματίδια σημαίνει ότι η ακμή του κύβου που θα δημιουργηθεί θα ισούται με το γινόμενο της διατομικής απόστασης *όχι επί 15*, αλλά επί 14 (καθώς οι διαδοχικές αποστάσεις μεταξύ των δοκιμίων 1-2, 2-3, ..., 14-15 είναι συνολικά 14 και όχι 15). Οπότε, η ακμή του κάθε σχηματιζόμενου κύβου θα είναι ίση με $14 \cdot 2.7252 = 38.1528$ Å.

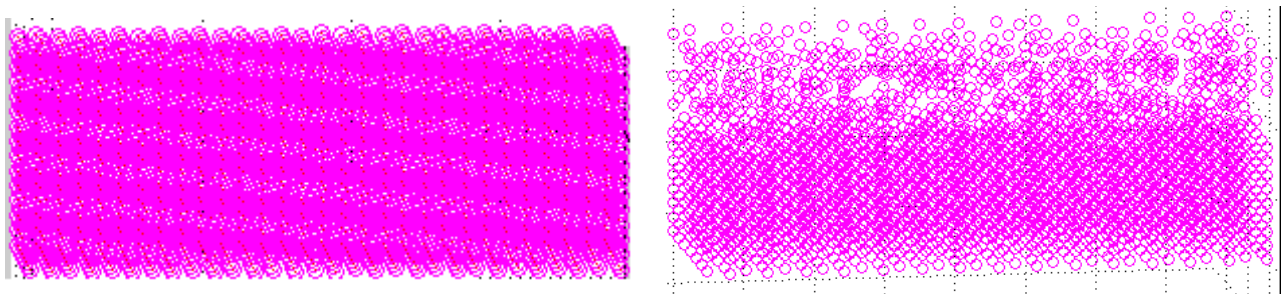
Ο τρόπος με τον οποίο αναπτύχθηκε το μοντέλο στη MATLAB, θα εξασφαλίσει επίσης το γεγονός ότι θα προσπίπτει μεγαλύτερη ένταση Laser πάνω σε άτομα που βρίσκονται πιο κοντά στο σημείο εφαρμογής της δέσμης, κάτι που θα έχει ως αποτέλεσμα την απορρόφηση περισσότερων φωτονίων σε κάποιες περιοχές από ό,τι σε άλλες. Το γεγονός ότι η ένταση της ακτινοβολίας ακολουθεί κατανομή

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Gauss κατά το επίπεδο XY αναμένεται να παίζει σημαντικό ρόλο στη διαμόρφωση τόσο του βαθμού στον οποίο επήλθε φωτοαποδόμηση από περιοχή σε περιοχή, όσο και των αναπτυσσόμενων θερμοκρασιών τόσο κατά τη διάρκεια της ακτινοβολήσεως όσο και μετά το πέρας αυτής.

Αξίζει εδώ να σημειώσουμε, όπως έχουμε κάνει και στο Κεφάλαιο 5, ότι η εξασθένηση της ακτινοβολίας δεν αφορά μόνο το επίπεδο XY, αλλά και τη διάσταση Z, καθώς το Laser διεισδύει όλο και βαθύτερα εντός του υλικού. Κάτι τέτοιο ικανοποιεί το νόμο Beer-Lambert περί εκθετικής μείωσης της ακτινοβολίας Laser καθώς το βάθος αυξάνεται, και αναπαραστάθηκε με τη σειρά του στη MATLAB σε μία προσπάθεια αύξησης της αξιοπιστίας της μοντελοποίησης.

Θα αρχίσουμε την ανάλυση της υπολογιστικής διαδικασίας στην πράξη, από το ακόλουθο Σχήμα 7.4.. Σε αυτό, εμφανίζεται η εξέλιξη της διαδικασίας φωτοαποδόμησης μετά το πέρας μερικών χρονικών βημάτων (10 ps το καθένα), ώστε να διαπιστωθεί το πώς συμπεριφέρονται τα άτομα του Mo στην κρυσταλλική δομή αμέσως μόλις αρχίσει η ακτινοβολήσή τους (σημείωση: επανακαθορίσαμε, για λόγους ευχρηστίας, το χρώμα των ατόμων όπως απεικονίζονται μέσω της συνάρτησης graphOut, ώστε να είναι magenta, ενώ επίσης απενεργοποιήσαμε και την εμφάνιση μικροσκοπικών βελών που δείχνουν τη διεύθυνση της ταχύτητας και της επιτάχυνσης, καθώς κάτι τέτοιο δε μας χρειάζεται επί της παρούσης).



Σχήμα 7.4. (α) Στιγμιότυπο του ακτινοβολούμενου όγκου προσομοίωσης στην αρχή εκτέλεσης του κώδικα. (β) Στιγμιότυπο που ελήφθη μετά το πέρας 15 χρονοβημάτων, ήτοι κατά τη χρονική στιγμή $t = 0.75$ ns. Σε αυτό το στιγμιότυπο έχει σχεδιαστεί προσεγγιστικά η Gaussian δέσμη Laser (όσον αφορά τις διευθύνσεις πάνω στο επίπεδο XY, ώστε να μας δείξει τις θέσεις από τις οποίες θα αρχίσουν να αφαιρούνται άτομα.

Είναι εμφανές, από τα πρώτα στάδια της φωτοαποδόμησης, ότι ο σκοπός της κατεργασίας είναι η δημιουργία οπής στο δοκίμιο, ή οποία θα έχει προκύψει από την απομάκρυνση σωματιδίων που είναι ικανά, λόγω της αυξημένης ενέργειάς τους, να υπερνικήσουν τους δεσμούς συνοχής που τους κρατάνε στην κρυσταλλική δομή, και να απομακρυνθούν, κατά συνέπεια, από τον όγκο προσομοίωσης. Όπως έχουμε αναφέρει και στο Κεφάλαιο 5, σωματίδια ή συσσωματώματα αυτών έχουν τη δυνατότητα να απομακρυνθούν από τον υπόψη όγκο εφόσον το άθροισμα της κινητικής ενέργειας και της απορροφημένης από τα φωτόνια ενέργειας είναι μεγαλύτερο από την ενέργεια συνοχής του Mo σε

μακροεπίπεδο. Ήδη από το πρώτο βήμα της προσομοίωσης, η αύξηση της ενέργειας αρκετών σωματιδίων είναι τέτοια ώστε να οδηγήσει στην απομάκρυνσή τους. Άλλα σωματίδια που έχουν απομακρυνθεί, παρουσιάζουν παρ'όλα αυτά αυξημένη ενέργεια, προκαλώντας τη μετακίνησή τους από τις αρχικές τους θέσεις, ή την εντονότερη ταλάντωσή τους γύρω από τη θέση στην οποία βρίσκονται, και αλλοιώνοντας, κατ'αυτό τον τρόπο, την κρυσταλλική δομή.

Η απορροφώμενη ενέργεια των φωτονίων από τα σωματίδια μετατρέπεται, ακολούθως, σε θερμότητα, η οποία είναι υπεύθυνη για τη μετέπειτα αύξηση της θερμοκρασίας του ακτινοβολούμενου όγκου. Το γεγονός ότι ο παλμός που εφαρμόζεται στο δοκίμιο έχει ιδιαίτερα μικρή διάρκεια (*βραχύς παλμός 10 ns*, όπως και στην προσομοίωσή μας) οδηγεί στη διαπίστωση ότι αυτή η αύξηση της θερμοκρασίας που λαμβάνει χώρα είναι πολύ ταχεία. Κάτι τέτοιο έχει ως άμεση συνέπεια τη γρήγορη τήξη ή και εξάτμιση πολλών από τα σωματίδια, ήδη από το πρώτο βήμα, με αποτέλεσμα να απομακρυνθούν, ακόμα και αν αυτά είναι τοποθετημένα σε ακραίες (κατά το επίπεδο XY) θέσεις εντός του όγκου μοντελοποίησης. Η αύξηση της θερμοκρασίας και η περιέλευση στη υγρή ή αέρια φάση γίνεται πιο γρήγορα σε σωματίδια που χαρακτηρίζονται από βάθος μηδενικό ή πολύ μικρό, καθώς οι υπόψη περιοχές είναι οι πρώτες με τις οποίες έρχεται χρονικά σε επαφή ο παλμός Laser.

Ένα πράγμα που, τουλάχιστον ποιοτικά, παρατηρείται ήδη από τα πρώτα βήματα εξέλιξης της προσομοίωσης, είναι το γεγονός ότι ο ρυθμός εξέλιξης της φωτοαποδόμησης ελαττώνεται με την αύξηση του βάθους αποδόμησης (το οποίο αυξάνεται χρονικά καθώς εξελίσσεται ο ένας παλμός). Δύο είναι οι βασικοί λόγοι για τους οποίους συμβαίνει αυτό:

- Ο πρώτος είναι η χρήση του νόμου Beer-Lambert για τη μοντελοποίηση της εξασθένησης της δέσμης Laser κατά τον άξονα των Z. Ο αριθμός των φωτονίων ελαττώνεται εκθετικά σύμφωνα με τον υπόψη νόμο, κάτι που έχει ως άμεση συνέπεια την προσβολή μικρότερου αριθμού σωματιδίων σε μεγαλύτερο βάθος.
- Ο δεύτερος έχει να κάνει με τη διαπίστωση ότι δεν είναι απαραίτητο ένα σωματίδιο που έχει περιέλθει στην αέρια φάση να έχει απομακρυνθεί από την κρυσταλλική δομή. Υπάρχουν δηλαδή, σε κάθε στιγμή εξέλιξης της φωτοαποδόμησης, αέρια σωματίδια M_0 που παρ'όλα αυτά δεν έχουν απομακρυνθεί. Αυτά κινούνται εντός του όγκου προσομοίωσης και εξακολουθούν να απορροφούν ενέργεια φωτονίων, η οποία, υπό άλλες συνθήκες, θα μπορούσε να προκαλέσει αύξηση του ρυθμού φωτοαποδόμησης, με το αντίθετο τελικά να ισχύει. Μπορούμε δηλαδή να διαπιστώσουμε ότι υπάρχουν άτομα των οποίων η ενέργεια δεν είναι αρκετή για να υπερνικήσει τις δυνάμεις συνοχής που το κρατάνε «ενωμένο» με τον υπόλοιπο κρύσταλλο, με αποτέλεσμα να μην παίζει ρόλο η φάση στην οποία έχουν περιέλθει, αναφορικά με την απομάκρυνσή τους.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Συνεχίζοντας την παράθεση των στιγμιότυπων της φωτοαποδόμησης για την παρούσα περίπτωση, μπορούμε να μελετήσουμε το πώς ο παλμός Laser αποδομεί σωματίδια κατά τη διάρκεια της εφαρμογής του πάνω στο στόχο. Θα μπορέσουμε να διαπιστώσουμε πιο ξεκάθαρα το γεγονός ότι όλο και λιγότερα σωματίδια αποδομούνται καθώς εξελίσσεται η προσομοίωση, σε σημείο που, σε κάποια στιγμή, η δέσμη Laser θα έχει εξασθενήσει σε τέτοιο βαθμό, που θα οδηγεί σε ελάχιστη ή καθόλου αποδόμηση. Όπως φαίνεται στη συνέχεια εκτέλεσης του κώδικά μας, κάτι τέτοιο οδηγεί στο σχηματισμό μιας οπής που, για την εξεταζόμενη ροή ακτινοβολίας, φτάνει μέχρι το απέναντι z-άκρο του όγκου προσομοίωσης. Μία εξήγηση που μπορεί να δοθεί για αυτό το φαινόμενο είναι το γεγονός ότι έχουμε λάβει, ως ενέργεια συνοχής όλων των ατόμων του όγκου, την αντίστοιχη τιμή αυτής σε *μακροεπίπεδο* (π.χ. -6.82 eV για το Mo), παραγνωρίζοντας όμως το ότι ορισμένα άτομα εντός του (μικροσκοπικού, σε κλίμακα nm / nm³) όγκου παρουσιάζουν διαφορετική ενέργεια συνοχής τόσο από τα υπόλοιπα, όσο και από την προαναφερθείσα τιμή. Για λόγους διευκόλυνσης χρησιμοποιήσαμε την ενέργεια συνοχής σε μακροεπίπεδο στους υπολογισμούς μας, ενώ επίσης θεωρούμε εξαιρετικά δύσκολο να διατυπώσουμε μία σχέση που θα δίνει τις τιμές της ενέργειας συνοχής είτε για κάθε άτομο ξεχωριστά είτε για κάθε μικρή ομάδα ατόμων, επειδή δεν υπάρχουν διαθέσιμες πληροφορίες στη βιβλιογραφία για το συγκεκριμένο ζήτημα (π.χ. πώς παράγοντες όπως η θερμοκρασία του κρυστάλλου και οι περιβαλλοντικές επιδράσεις μπορούν να επηρεάσουν τις ενέργειες συνοχής των ατόμων του τεμαχίου).

Το Σχήμα 7.5. θα μας βοηθήσει να παρατηρήσουμε οπτικά την εξέλιξη της φωτοαποδόμησης, λαμβάνοντας ως υλικό το Mo, με ενέργεια συνοχής -6.82 eV. Μαζί με κάθε στιγμιότυπο θα παρατεθεί και ο αριθμός των αποδομημένων σωματιδίων, όπως έχει υπολογιστεί μέσω του κώδικα MATLAB (με τις αντίστοιχες αριθμητικές τιμές να εμφανίζονται στο Command Window κατά την εκτέλεση του κώδικα). Τα χαρακτηριστικά κάθε στιγμιότυπου θα εμφανιστούν στον ακόλουθο Πίνακα 7.2., πριν την παράθεση του Σχήματος. Είναι σημαντικό να έχουμε στο νου μας ότι ο ολικός αριθμός αποδομημένων σωματιδίων για κάθε χρονικό βήμα μπορεί να διαφέρει λίγο μεταξύ διαφορετικών εκτελέσεων του κώδικα, επειδή έχουμε ήδη ορίσει κάποιες αρχικές ταχύτητες για τα σωματίδιά μας, μέσω μίας *γεννήτριας τυχαίων τιμών*, έστω και αν σε αυτή τη γεννήτρια λαμβάνεται υπόψη το γεγονός ότι επιθυμούμε οι ταχύτητες να ακολουθούν την κανονική κατανομή. Το υπόψη Σχήμα μπορεί να ληφθεί υπόψη ως αφετηρία για το σχολιασμό ποικίλων περιπτώσεων φωτοαποδόμησης με τους nanosecond μονοχρωματικούς παλμούς Laser που χρησιμοποιούμε επί του παρόντος, αλλάζοντας αρχικά τη ροή της ακτινοβολίας Laser και δευτερευόντως το υλικό. Στην παρούσα ανάλυσή μας δεν κρίνεται απαραίτητο να παραθέσουμε εξέλιξη στιγμιότυπων για όλες τις πιθανές περιπτώσεις που πρόκειται να εξετάσουμε, καθ'ότι δε διαφέρει σημαντικά ο τρόπος με τον οποίο αφαιρούνται τα σωματίδια. Πιο σημαντικό ρόλο

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

ενδέχεται να παίζει η μορφή του τελικού όγκου, μετά το πέρας του παλμού, κάτι που μπορεί να μας οδηγήσει σε χονδρικές εκτιμήσεις σχετικά με το βάθος φωτοαποδόμησης.

Για λόγους συντόμευσης της υπό μελέτη διαδικασίας, θα ρυθμίσουμε εδώ τη διάρκεια του χρονοβήματος στα 50 ps, ώστε να μην απαιτηθούν πάνω από 200 επαναλήψεις προκειμένου να προσομοιωθεί η εξέλιξη του φαινομένου καθ'όλη τη διάρκεια του παλμού Laser (10 ns). Ιδανικά θα μπορούσαμε να πενταπλασιάσουμε τον αριθμό των βημάτων και να μειώσουμε 5 φορές τη διάρκεια του χρονικού βήματος. Η μείωση του αριθμού χρονοβημάτων για την περιγραφή του προβλήματος μπορεί να προκαλέσει ορισμένα προβλήματα αναφορικά με τη λεπτομερή ανάλυσή του, αλλά αυτά δεν κρίνονται ιδιαίτερα ανησυχητικά ώστε να μας οδηγήσουν στην απαίτηση να αυξήσουμε το χρόνο ολοκλήρωσης της προσομοίωσης.

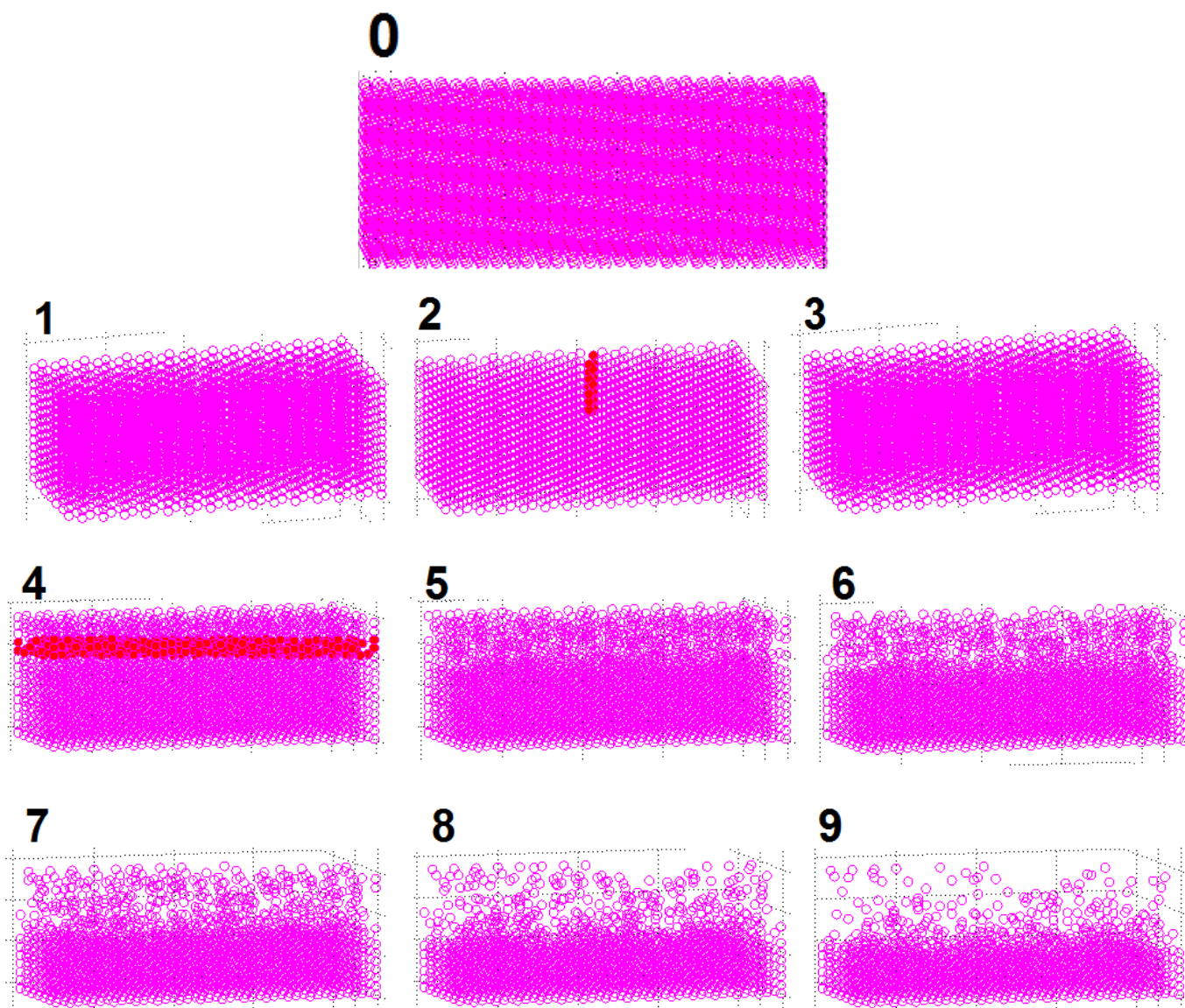
Στον ίδιο Πίνακα θα παρατεθούν και οι υπολογισθείσες τιμές για τη μέση θερμοκρασία που λαμβάνει το σύστημα των σωματιδίων του κρυστάλλου, έπειτα από την παρέλευση κάθε χρονικού βήματος για το οποίο γίνεται λόγος. Η θερμοκρασία αυτή θα παρατεθεί σε μονάδες Kelvin (K) και θα ισούται με το άθροισμα των απόλυτων θερμοκρασιών όλων των σωματιδίων του συστήματος, διαιρεμένο με τον αριθμό αυτών σε κάθε χρονικό βήμα (λαμβάνοντας υπόψη ότι ορισμένα άτομα έχουν ήδη απομακρυνθεί από τον κρύσταλλο, μένοντας πιστοί στο κριτήριο ενέργειας συνοχής).

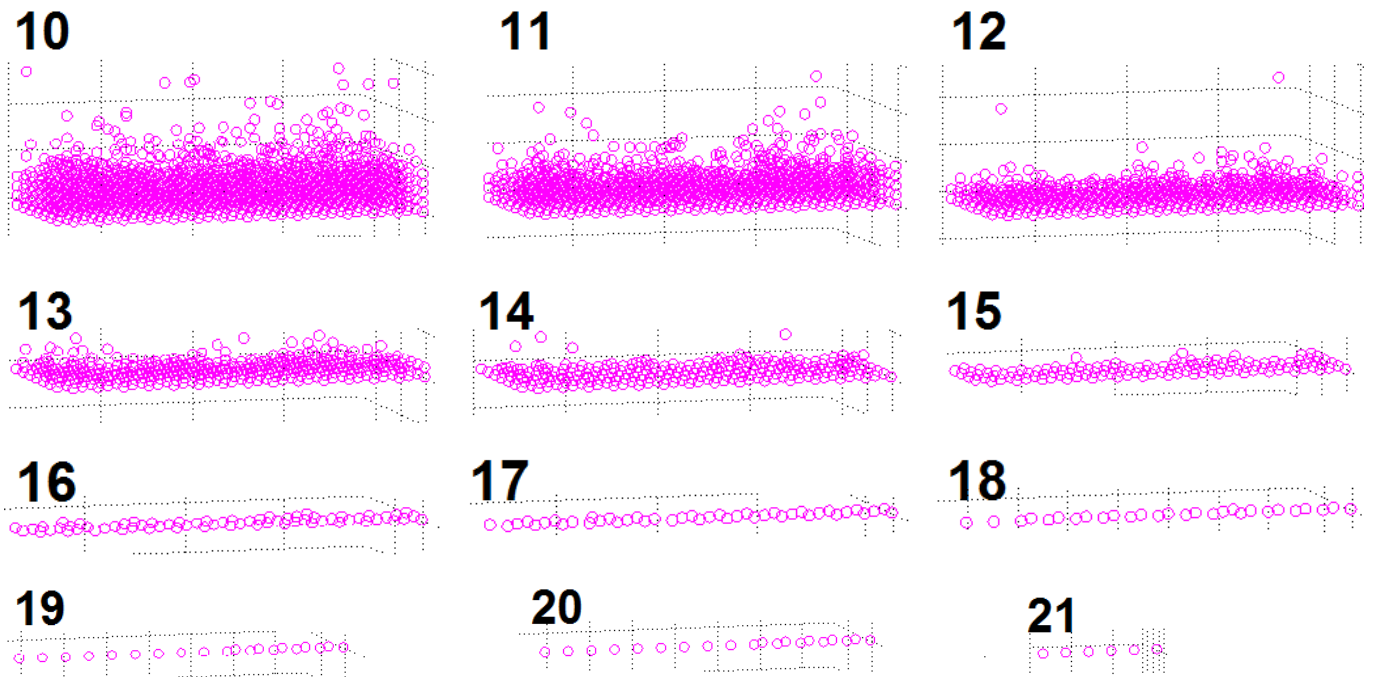
A/A Στιγμιότυπου	Χρονικό βήμα προσομοίωσης	Χρόνος προσομοίωσης (ns)	Ολικός αριθμός αποδομημένων σωματιδίων	Θερμοκρασία συστήματος (K)
0 (έναρξη)	0	0	0	300
1	7	0.35	24	3271.6
2	8	0.4	76	3676.38
3	9	0.45	145	4106.75
4	10	0.5	230	4551.1
5	12	0.6	517	5400.87
6	14	0.7	774	6305.48
7	16	0.8	1052	7131.34
8	18	0.9	1360	8170.38
9	20	1	1653	8980.71
10	22	1.1	1908	9923.43
11	25	1.25	2261	11475.87
12	28	1.4	2541	12532.31
13	32	1.6	2837	15387.19
14	36	1.8	3032	15112.57
15	40	2	3160	18819.54

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

16	45	2.25	3266	22846.09
17	50	2.5	3314	11832.62
18	60	3	3349	7373.97
19	70	3.5	3355	4704.24
20	100	5	3356	6340.41
21 (λήξη)	200	10	3369	5473.47

Πίνακας 7.2. Παρουσίαση βασικών χαρακτηριστικών για τα στιγμιότυπα προσομοίωσης του παρακάτω Σχήματος 8.5.. Ο ολικός αριθμός των φωτοαποδομημένων σωματιδίων επηρεάζει και τη μορφή του εκάστοτε στιγμιότυπου.





Σχήμα 7.5. (στην προηγούμενη Σελίδα): Στιγμιότυπα εξέλιξης της φωτοαποδόμησης του όγκου προσομοίωσης για το υλικό-στόχο, όταν αυτό αποδομείται με παλμό Laser διάρκειας 10 ns. Οι περιοχές που έχουν σημειωθεί με κόκκινο είναι αυτές στις οποίες αρχίζουν, από το υπόψη χρονικό βήμα και μετά, να αφαιρούνται άτομα (η αφαίρεση αυτή μπορεί να παρατηρηθεί με γυμνό μάτι, αλλά απαιτείται ιδιαίτερα μεγάλη προσοχή και συγκέντρωση προκειμένου να γίνει επιτυχώς αυτή η οπτική παρατήρηση).

Αρχικά μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι απαιτούνται 350 ns, από την έναρξη εκπομπής του παλμού, προκειμένου να αρχίσουν να αποδομούνται σωματίδια. Χρησιμοποιώντας το κριτήριο ενέργειας συνοχής για το οποίο έχει γίνει λόγος στο Κεφάλαιο 4, και υπολογίζοντας τις διαφορές μεταξύ κινητικής ενέργειας κάθε ατόμου και ενέργειας συνοχής, μπορούμε να δούμε ότι αρχίζουν οι διαφορές αυτές να αποκτούν θετικές τιμές για κάποια άτομα, που γίνονται ολοένα και περισσότερα ανά χρονικό βήμα καθώς η προσομοίωση προχωρά. Η αύξηση του αριθμού αποδομούμενων σωματιδίων είναι ενδεικτική και της αύξησης του ρυθμού φωτοαποδόμησης, η οποία συνδέεται με το γεγονός ότι η θερμοκρασία ολοένα και μεγαλώνει, λόγω θέρμανσης του υλικού. Μελετώντας τον κώδικα MATLAB που έχουμε εκτελέσει, παρατηρούμε ότι τα σημεία τήξης και βρασμού του Mo (2890 K και 4912 K αντίστοιχα) έχουν ξεπεραστεί ήδη από το 6^ο και 11^ο βήμα της προσομοίωσης αντίστοιχα. Αυτό το συμπέρασμα μπορεί να βγει τόσο από τα αποτελέσματα όπως εμφανίζονται στο Command Window, όσο και από γραμμική

παρεμβολή μεταξύ των τιμών 0-7 και 10-12, λαμβάνοντας υπόψη ότι η αύξηση της θερμοκρασίας κατά τις πρώτες φάσεις της προσομοίωσης είναι κατά τόπους γραμμική και αλλού σχεδόν γραμμική.

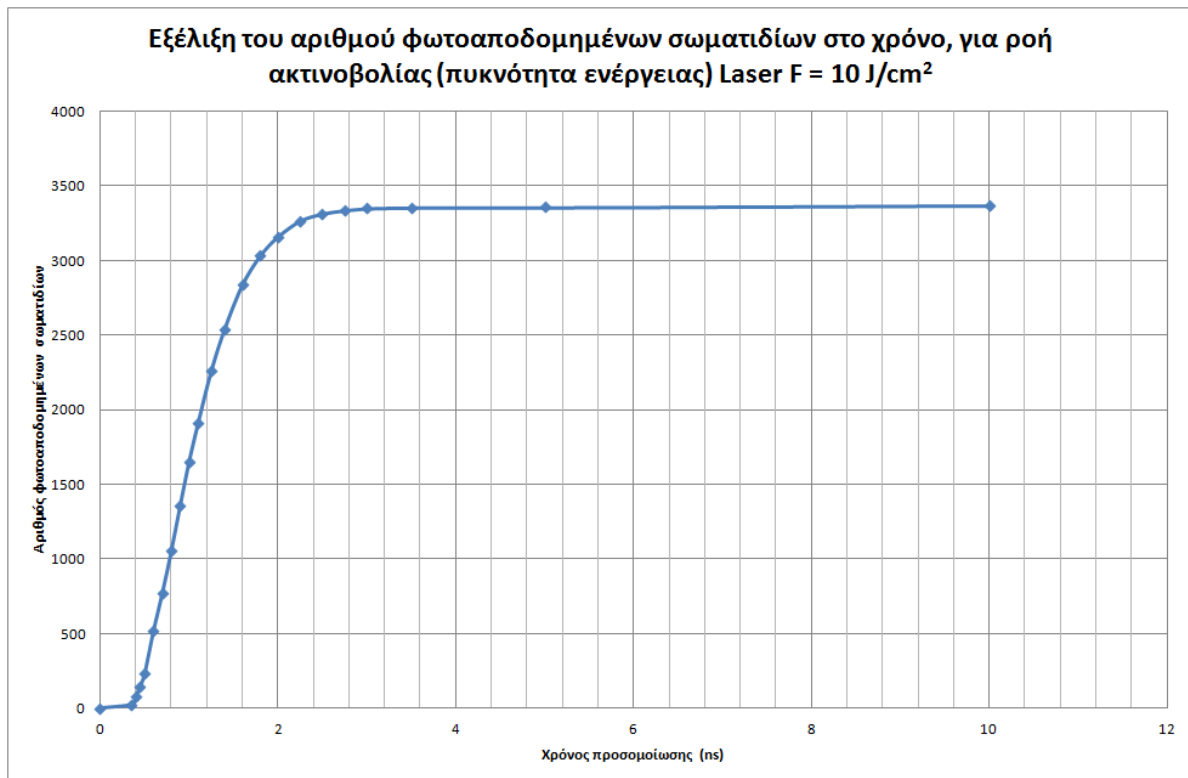
Η κατάσταση αντιστρέφεται από το 8^ο στιγμιότυπο και μετά (κατά τη χρονική στιγμή 900 ps = 0.9 ns), με το ρυθμό φωτοαποδόμησης να ελαττώνεται, για τους λόγους που αναφέρθηκαν σε προηγούμενες σελίδες της Υποενότητας (εξασθένηση δέσμης κατά το βάθος λόγω του νόμου Beer-Lambert, παραμονή ορισμένων ατόμων αέριας φάσης εντός του όγκου προσομοίωσης). Η μείωση του ρυθμού φωτοαποδόμησης δε συνδέεται με ελάττωση της θερμοκρασίας, τουλάχιστον κατά τα πρώτα βήματα στα οποία αλλάζει η μονοτονία του ρυθμού φωτοαποδόμησης (από αύξουσα σε φθίνουσα). Κάτι τέτοιο όμως συμβαίνει μετά τα 2.25 ns, ή το 22.5% της συνολικής διάρκειας του παλμού, λόγω του γεγονότος ότι πλέον μένουν πολύ λίγα σωματίδια προκειμένου να υπερνικήσουν τις δυνάμεις συνοχής που τα κρατάνε και, ως εκ τούτου, να απομακρυνθούν από τον όγκο προσομοίωσης. Πάντως, μπορούμε να παρατηρήσουμε επίσης ότι, σε ένα χρονικό διάστημα κατά το οποίο η αποδόμηση σωματιδίων είναι ανεπαίσθητη ή μη υπαρκτή (π.χ. μεταξύ 70 και 100 ns), το υλικό εντούτοις θερμαίνεται, καθιστώντας λογική την αύξηση της θερμοκρασίας του συστήματος.

Η μέγιστη θερμοκρασία, στην παρούσα περίπτωση, ισούται με 22846.09 K και παρατηρείται κατά τη χρονική στιγμή 2.25 ns. Το μέγιστο της θερμοκρασίας ενδεχομένως να μπορούσε να υπολογιστεί και με μεγαλύτερη ακρίβεια αυξάνοντας τον αριθμό των χρονοβημάτων στην ανάλυσή μας (και μειώνοντας, κατά συνέπεια, τη διάρκεια του κάθε χρονικού βήματος στην προσομοίωση). Ένα τοπικό ελάχιστο, με θερμοκρασία 4704 K (λίγο χαμηλότερα από το σημείο βρασμού του Mo), εμφανίζεται στο 21^ο στιγμιότυπο (για τη χρονική στιγμή των 5 ns), με σχεδόν όλα τα σωματίδια του όγκου προσομοίωσης να έχουν αποδομηθεί. Αυτό βέβαια δε σημαίνει ότι ολόκληρο το υλικό έχει αποδομηθεί, καθώς γύρω από την υπό εξέταση περιοχή υπάρχουν και άλλα άτομα, λόγω εφαρμογής της περιοδικής συνοριακής συνθήκης που αφορά την άπειρη επέκταση του υλικού κατά τους άξονες X και Y. Αξίζει να σημειώσουμε ότι η επίτευξη ιδιαίτερα υψηλών θερμοκρασιών καθ'όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης αποτελεί ένα δείγμα ισχυρής υπερθέρμανσης του δοκιμίου καθώς αυτό ακτινοβολείται.

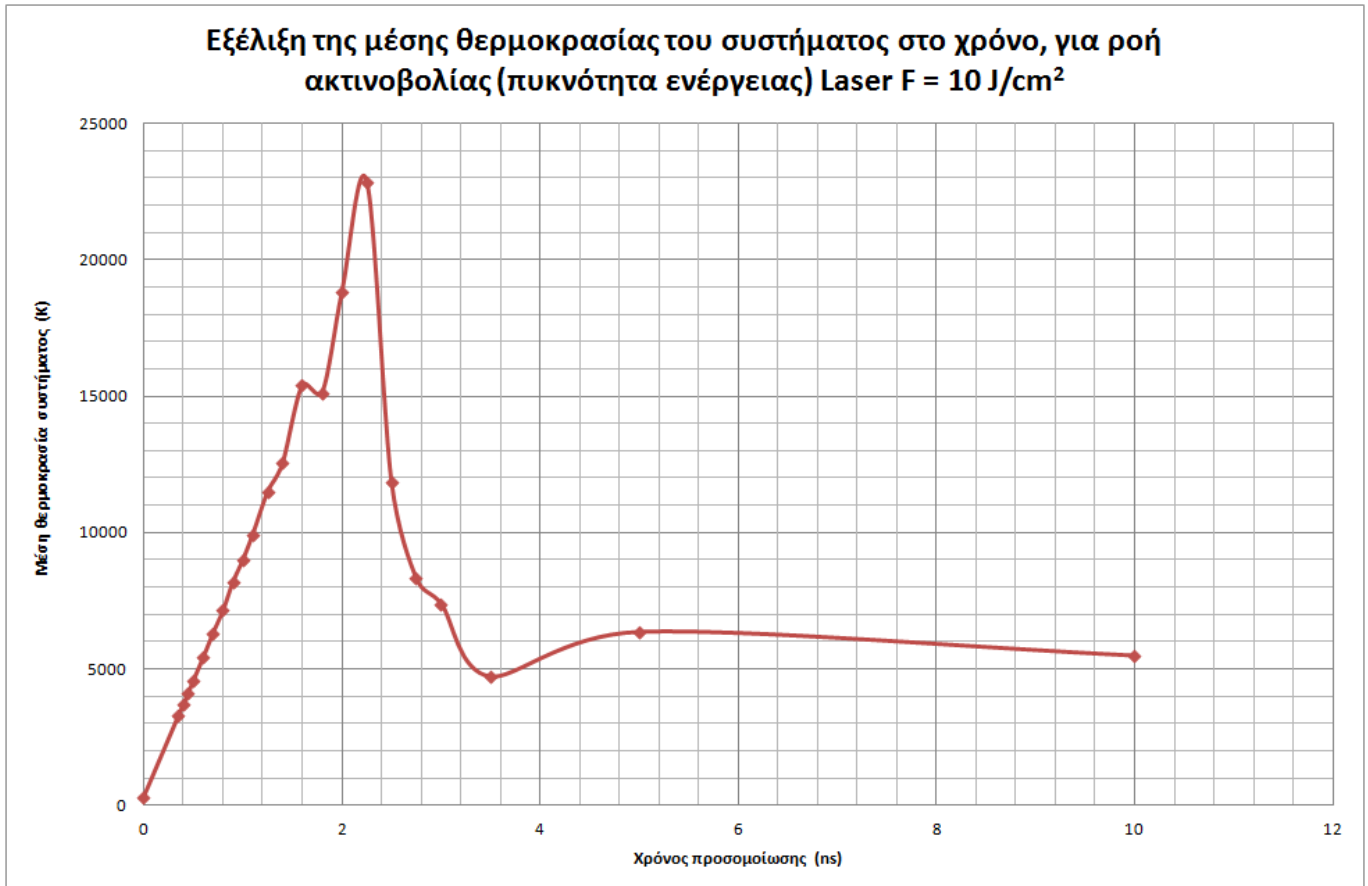
Το γεγονός ότι ο ρυθμός φωτοαποδόμησης σταδιακά μειώνεται καθώς εκπέμπεται ο παλμός, έστω και για προχωρημένες χρονικές στιγμές, ισχύει και στην πραγματικότητα (με βάση δηλαδή τη διεξαγωγή των πειραμάτων), από τη στιγμή που τα άτομα που βρίσκονται σε μεγαλύτερο βάθος απορροφούν μικρότερη ποσότητα φωτονίων. Κάτι τέτοιο βέβαια δεν ήταν εφικτό να διασταυρωθεί με πλήρη ακρίβεια στο EIE, έπειτα από τη λήξη της πειραματικής διαδικασίας εγχάραξης και φωτοαποδόμησης των λεπτών υμενίων, από τη στιγμή που η διάρκεια των 10ns, για τον παλμό Laser, είναι σαφώς μικρότερη από την ελάχιστη

χρονική διαφορά (της τάξης των ms) που μπορεί το ανθρώπινο μάτι και ο ανθρώπινος εγκέφαλος να αντιληφθεί.

Τα δεδομένα του Πίνακα 7.2. μπορούν να παρατεθούν και σε διαγραμματική μορφή, δίνοντας στον αναγνώστη μία πιο ξεκάθαρη ιδέα για το πώς εξελίσσεται ο ρυθμός φωτοαποδόμησης των σωματιδίων (μειώνεται σε κάθε χρονοβήμα που περνάει, όπως έχουμε ήδη δει), αλλά και η θερμοκρασία του συστήματος καθώς εξελίσσεται η υπολογιστική μας μελέτη. Ειδικά στο Σχήμα 7.7. φαίνεται ξεκάθαρα η απότομη πτώση της θερμοκρασίας αμέσως μετά την επίτευξη της μέγιστης τιμής της.



Σχήμα 7.6. Σχηματική παράσταση της μεταβολής του αριθμού φωτοαποδομημένων σωματιδίων στο χρόνο για την περίπτωση προσομοίωσης που εξετάζουμε ($F = 10 \text{ J/cm}^2$), λαμβάνοντας ταυτόχρονα υπόψη τα δεδομένα του Πίνακα 7.2.



Σχήμα 7.7. Σχηματική παράσταση της μεταβολής της μέσης θερμοκρασίας του συστήματος ατόμων του όγκου προσομοίωσης στο χρόνο, για την περίπτωση προσομοίωσης που εξετάζουμε ($F = 10 \text{ J/cm}^2$) λαμβάνοντας ταυτόχρονα υπόψη τα δεδομένα του Πίνακα 7.2.

Σε πολλές περιπτώσεις στη βιβλιογραφία, έχει εξεταστεί η φωτοαποδόμηση υλικών-στόχων με χρήση Laser, για σαφώς μικρότερες ροές ακτινοβολίας από τα 10 J/cm^2 που έχουμε χρησιμοποιήσει στην προσομοίωσή μας. Βέβαια, η τιμή 10 J/cm^2 χρησιμοποιήθηκε ως αφετηρία προκειμένου να κάνουμε μία αξιόπιστη ανάλυση, καθ'ότι οι τιμές ροής ακτινοβολίας που υπολογίστηκαν, τουλάχιστον για το Mo, στο Κεφάλαιο 6 και την πειραματική διαδικασία στην οποία αναφέρεται, βρίσκονται γύρω από την περιοχή των 10 J/cm^2 (για το Al είναι αρκετά μεγαλύτερες και γίνεται να φτάσουν μέχρι και τα 20 J/cm^2).

Καταρχήν, έχει ενδιαφέρον να δούμε πώς μεταβάλλεται η εξέλιξη της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας Laser με την ύλη, αλλά και της φωτοαποδόμησης, όταν μειώσουμε τη ροή της ακτινοβολίας σταδιακά από τα 10 J/cm^2 , μέχρις ότου φτάσει στην τιμή 0.5 J/cm^2 , η οποία, για τις περισσότερες κατεργασίες φωτοαποδόμησης (βλ. για παράδειγμα [3][144]), βρίσκεται αρκετά υψηλότερα από το κατώφλι αυτής (0.07 J/cm^2 στην [144], 0.1 J/cm^2 στην [3]) Κατά σειρά, θα παρατεθούν τα αριθμητικά αποτελέσματα σχετικά με τον αριθμό των φωτοαποδομημένων σωματιδίων και την εξέλιξη της θερμοκρασίας, για ροές ακτινοβολίας 5, 1 και 0.5 J/cm^2 . Ο λόγος για τον οποίο δεν εξετάστηκε η τιμή

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

0.1 J/cm² είναι γιατί τελικά δεν κρίθηκε αναγκαίο, από τη στιγμή που διεξαχθείσες δοκιμές με την πενταπλάσια τιμή της προαναφερθείσας ροής (0.5 J/cm²) κατέδειξαν ότι, μετά το πέρας της ακτινοβολίας Laser, αποδομήθηκε ένας πάρα πολύ μικρός αριθμός ατόμων (54 από τα 3375 του όγκου προσομοίωσης).

• Περίπτωση 1^η: F = 5 J/cm² (Πίνακας 7.3.)

Α/Α Μέτρησης	Χρονικό βήμα προσομοίωσης	Χρόνος προσομοίωσης (ns)	Ολικός αριθμός αποδομημένων σωματιδίων	Θερμοκρασία συστήματος (K)
0	0	0	0	300
1	13	0,65	0	3056.38
2	14	0,7	7	3267.71
3	15	0,75	31	3466.62
4	16	0,8	71	3676.38
5	17	0,85	144	3887.18
6	18	0,9	204	4113.08
7	20	1	376	4547.94
8	22	1,1	543	4928.74
9	24	1,2	766	5391.39
10	27	1,35	1066	6100.49
11	30	1,5	1433	6984.51
12	33	1,65	1784	7676.54
13	36	1,8	2076	8169.35
14	40	2	2409	8937.26
15	45	2,25	2721	10475.11
16	50	2,5	2954	11363.11
17	55	2,75	3099	12282.28
18	60	3	3221	15374.6
19	70	3,5	3313	7453.39
20	100	5	3341	5533.33
21	150	7,5	3354	5441.68
22	200	10	3355	5185.30

Πίνακας 7.3. Παρουσίαση βασικών χαρακτηριστικών για επιλεγμένες χρονικές στιγμές προσομοίωσης, αναφορικά με τον αριθμό των ατόμων που αποδομούνται (σε σχέση με την αρχή της προσομοίωσης) αλλά και τη μέση θερμοκρασία που επιτυγχάνεται στο σύστημα. Με γαλάζια σκίαση έχει σημειωθεί η πρώτη γραμμή αποτελεσμάτων που αντιστοιχεί σε θερμοκρασία υψηλότερη του σημείου τήξης του Mo, ενώ με πορτοκαλί χρώμα ισχύει το αντίστοιχο για το σημείο βρασμού. Τα αποτελέσματα έχουν εξαχθεί για ροή ακτινοβολίας Laser F = 5 J/cm².

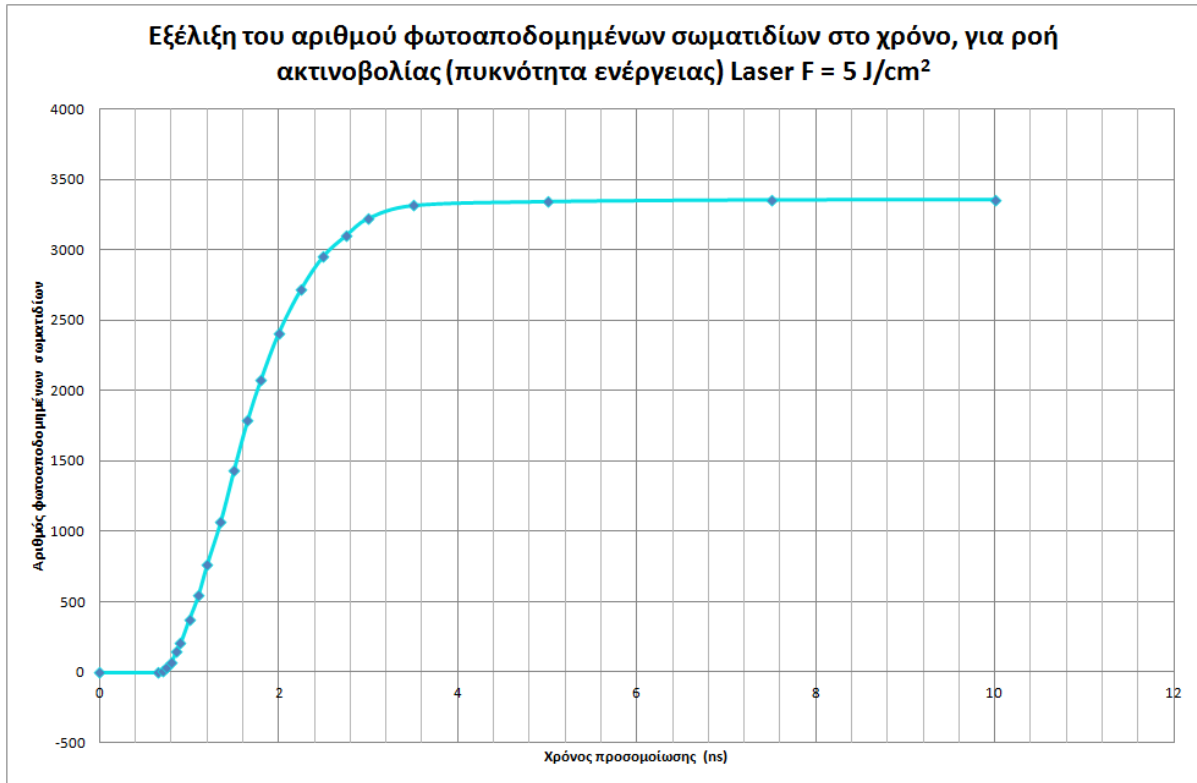
Παρατηρούμε εδώ, όπως είναι λογικό, ότι η θέρμανση του υλικού γίνεται με πιο αργό ρυθμό συγκριτικά με την περίπτωση της ροής ακτινοβολίας F = 10 J/cm², που είναι διπλάσια από αυτή που εξετάζεται επί του παρόντος. Η θερμοκρασία τήξης των 2890 K υπερβαίνεται ήδη από το 13^ο βήμα

προσομοίωσης, κάτι που δημιουργεί το έναυσμα για την έναρξη της απομάκρυνσης σωματιδίων από τον όγκο προσομοίωσης. Σταδιακά ο ρυθμός φωτοαποδόμησης αυξάνεται, ενώ η αύξηση αυτή αρχίζει να γίνεται ακόμα εντονότερη όταν το σημείο βρασμού των 4912 K έχει ξεπεραστεί (στο 22^ο βήμα). Μετά το πέρας 1.5 ns, ο ρυθμός φωτοαποδόμησης αρχίζει και μειώνεται, για τους λόγους που έχουν αναφερθεί παραπάνω στην Υποενότητα, κάτι όμως που δεν επηρεάζει τη συνεχώς αύξουσα μονοτονία της θερμοκρασίας, η οποία εντέλει αποκτά τη μέγιστη τιμή των 15374.6 K όταν έχουν παρέλθει 3 ns από την εκπομπή του παλμού. Βέβαια, αυτή η θερμοκρασία τυγχάνει να απαντάται όταν ήδη έχει αποδομηθεί ένα πολύ μεγάλο ποσοστό ολόκληρου του όγκου προσομοίωσης, δηλαδή το $\frac{3221}{3375} \cdot 100\% = 95.44\%$ αυτού. Η

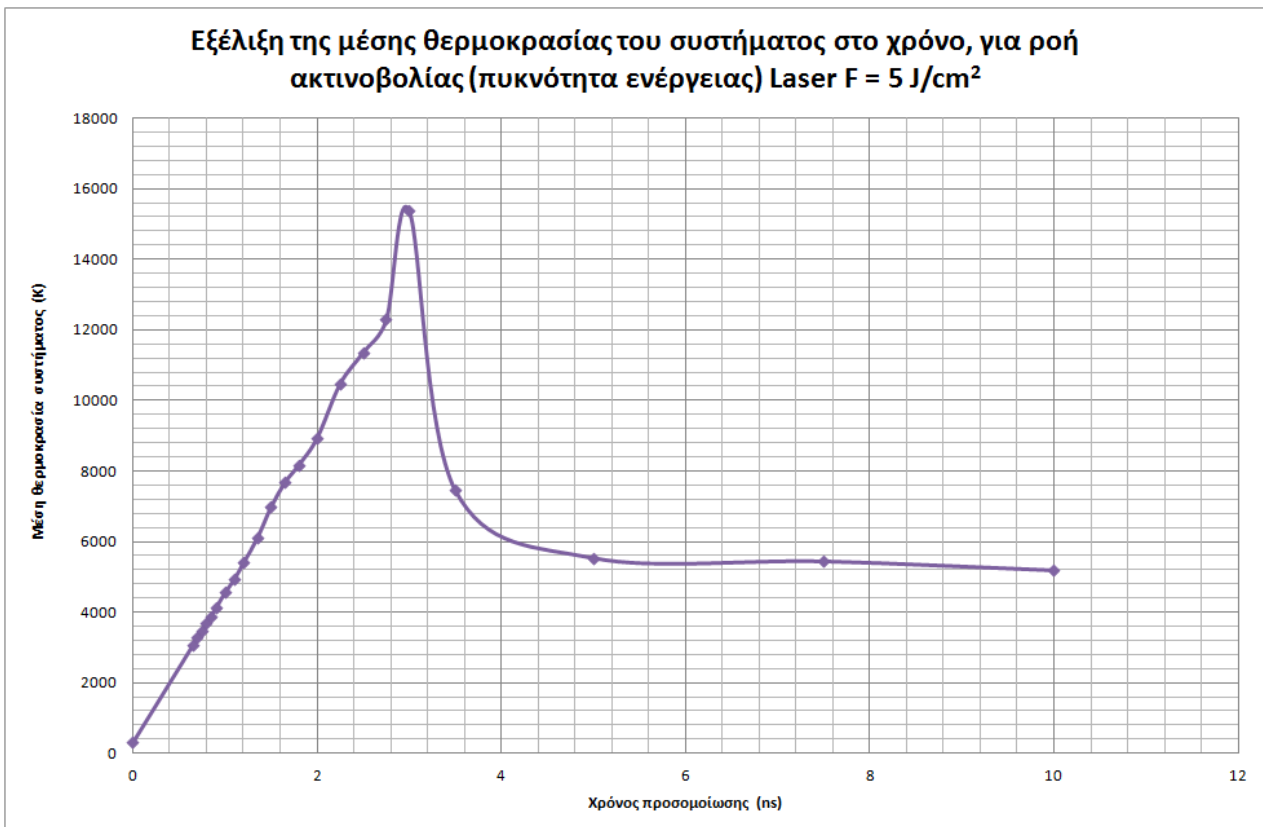
δραστική μείωση του ρυθμού φωτοαποδόμησης μετά τα 3 ns συνοδεύεται και από πολύ ταχεία και δραματική πτώση στη θερμοκρασία του συστήματος των ατόμων, πριν φτάσει αυτή η θερμοκρασία να είναι ίση με 5185.3 K στη λήξη του παλμού, που αποτελεί και *τοπικό ελάχιστο* μετά τη μέγιστη τιμή της θερμοκρασίας. Η τελική θερμοκρασία του δοκιμίου είναι χαμηλότερη κατά $5473.47 - 5185.3 = 288.17K$ σε σχέση με την περίπτωση της διπλάσιας ροής ακτινοβολίας, ενώ και η μέγιστη επιτεύξιμη θερμοκρασία υπολείπεται κατά $1 - \frac{15374.6}{22846.09} = 0.327 = 32.7\%$ του αντίστοιχου μέγιστου για την πυκνότητα ενέργειας

των $10 J/cm^2$. Για πληροφοριακούς λόγους, αναφέρουμε ότι η τιμή του μέγιστου που βρήκαμε βρίσκεται πολύ κοντά στους 16000 K που αναφέρει η βιβλιογραφία [E1] ως τη μέγιστη επιτεύξιμη θερμοκρασία για ροή ακτινοβολίας $1.5 J/cm^2$ και υπερβραχείς παλμούς Laser.

Τα αποτελέσματα που εμφανίστηκαν στον παραπάνω Πίνακα μπορούν να αναπαρασταθούν και γραφικά, στα ακόλουθα Σχήματα 7.8. και 8.9., ώστε να διευκολυνθεί ο αναγνώστης στην εξαγωγή των επιθυμητών συμπερασμάτων. Από το πρώτο Σχήμα είναι εμφανές ότι η αποδόμηση σωματιδίων αργεί να ξεκινήσει συγκριτικά με τη διπλάσια ροή ακτινοβολίας, ενώ από το δεύτερο Σχήμα βλέπουμε ότι η ανύψωση της θερμοκρασίας έως τη μέγιστη τιμή της είναι λιγότερο απότομη.



Σχήμα 7.7. Σχηματική παράσταση της μεταβολής του αριθμού φωτοαποδομημένων σωματιδίων στο χρόνο για την περίπτωση προσομοίωσης που εξετάζουμε ($F = 5 \text{ J/cm}^2$), λαμβάνοντας ταυτόχρονα υπόψη τα δεδομένα του Πίνακα 7.3.



ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Σχήμα 7.8. Σχηματική παράσταση της μεταβολής της μέσης θερμοκρασίας του συστήματος ατόμων του όγκου προσομοίωσης στο χρόνο, για την περίπτωση προσομοίωσης που εξετάζουμε ($F = 5 \text{ J/cm}^2$) λαμβάνοντας ταυτόχρονα υπόψη τα δεδομένα του Πίνακα 7.3.

• **Περίπτωση 2^η: $F = 1 \text{ J/cm}^2$ (Πίνακας 7.4.)**

Α/Α Μέτρησης	Χρονικό βήμα προσομοίωσης	Χρόνος προσομοίωσης (ns)	Ολικός αριθμός αποδομημένων σωματιδίων	Θερμοκρασία συστήματος (K)
0	0	0	0	300
1	20	1	0	1146.42
2	40	2	0	1975.69
3	60	3	0	2772.10
4	64	3.2	0	2926.18
5	70	3.5	0	3153.56
6	74	3.7	1	3302.53
7	75	3.75	3	3338.36
8	76	3.8	6	3368.81
9	77	3.85	11	3402.33
10	78	3.9	19	3434.82
11	80	4	43	3518.52
12	82	4.1	76	3584.94
13	84	4.2	120	3663.28
14	86	4.3	178	3743.73
15	88	4.4	244	3811.06
16	90	4.5	316	3870.49
17	93	4.65	449	3958.72
18	96	4.8	612	4076.60
19	100	5	791	4195.70
20	105	5.25	1068	4458.41
21	110	5.5	1360	4725.74
22	115	5.75	1635	4822.28
23	120	6	1890	4939.33
24	125	6.25	2114	4996.29
25	130	6.5	2314	5203.43
26	140	7	2647	5534.58
27	150	7.5	2899	6032.09
28	160	8	3068	5675.25
29	180	9	3283	5866.09
30	200	10	3309	3723.41

Πίνακας 7.4. Παρουσίαση βασικών χαρακτηριστικών για επιλεγμένες χρονικές στιγμές προσομοίωσης, αναφορικά με τον αριθμό των ατόμων που αποδομούνται (σε σχέση με την αρχή της προσομοίωσης) αλλά και τη μέση θερμοκρασία που επιτυγχάνεται στο σύστημα. Με γαλάζια σκίαση έχει σημειωθεί η πρώτη

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

γραμμή αποτελεσμάτων που αντιστοιχεί σε θερμοκρασία υψηλότερη του σημείου τήξης του Mo, ενώ με πορτοκαλί χρώμα ισχύει το αντίστοιχο για το σημείο βρασμού. Τα αποτελέσματα έχουν εξαχθεί για ροή ακτινοβολίας Laser $F = 1 \text{ J/cm}^2$.

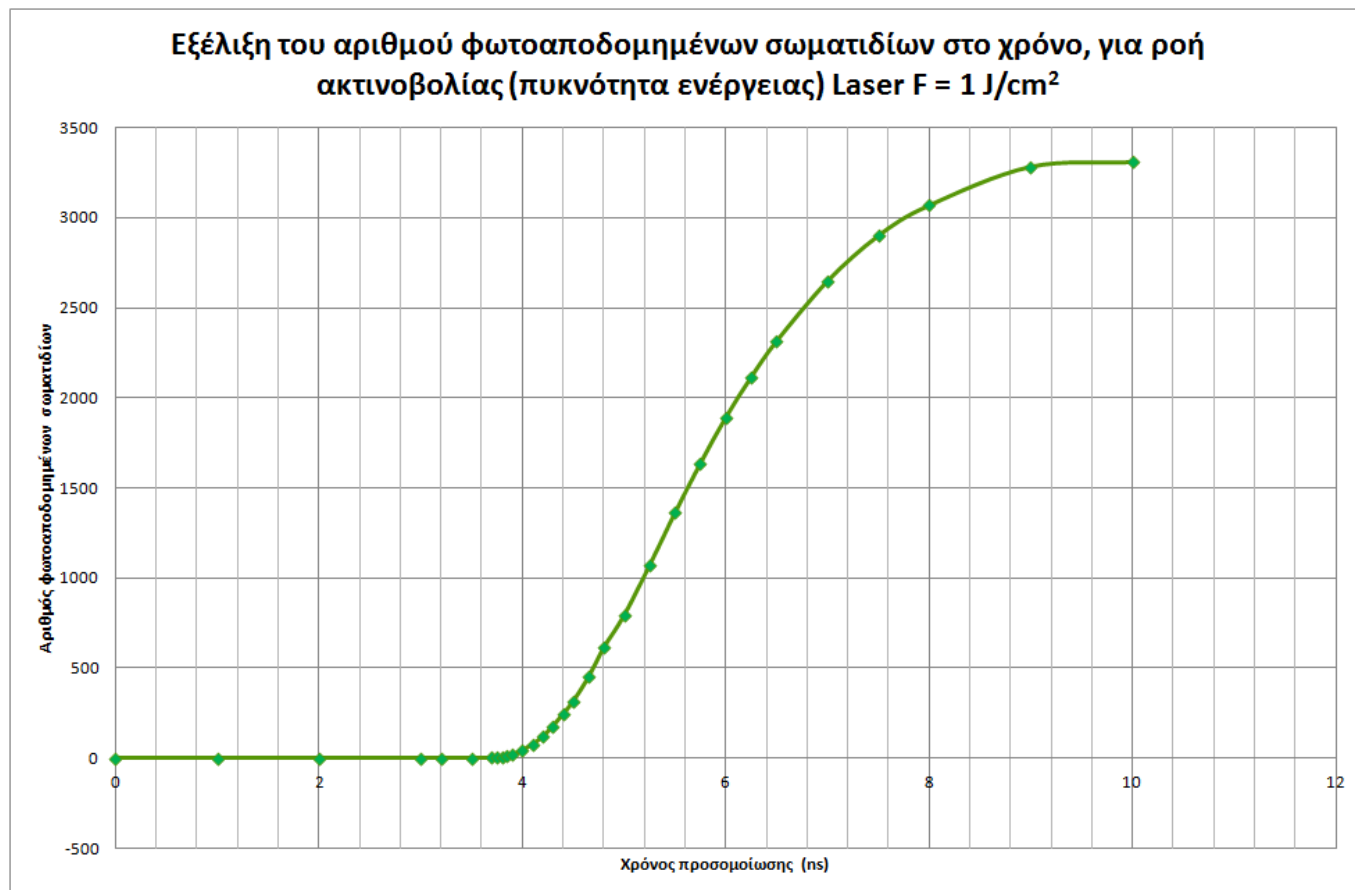
Μελετώντας καταρχήν την εξέλιξη της θερμοκρασίας του συστήματος καθώς το δοκίμιο θερμαίνεται από την ακτινοβολία Laser, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η αύξηση της θερμοκρασίας ανά χρονικό βήμα διέπεται από μία σχέση αναλογίας με τη ροή ακτινοβολίας Laser. Μάλιστα, η παράλληλη παράθεση και σύγκριση με τα αποτελέσματα που λαμβάνουμε από τους Πίνακες 8.2. και 8.3. για τα πρώτα χρονοβήματα της προσομοίωσης, επιβεβαιώνουν τα λεγόμενά μας. Κάτι τέτοιο παρατηρήθηκε και καθώς εκτελούσαμε τον κώδικα στη MATLAB, για διαφορετικές τιμές της πυκνότητας ενέργειας. Για παράδειγμα, η τιμή 10 J/cm^2 οδηγούσε σε θερμοκρασιακή ανύψωση περίπου 424.5 K / βήμα (2971.6 K σε 7 βήματα). Για την τιμή 5 J/cm^2 η ανύψωση εκτιμάται στους περίπου 212 K / βήμα (2756.38 K σε 13 βήματα), ενώ η πτώση της ροής ακτινοβολίας στο 1 J/cm^2 οδηγεί σε ανύψωση περίπου 42.3 K / βήμα (846.42 K σε 20 βήματα), δείγμα του ότι η διαπίστωσή μας σχετικά με την αναλογία της αρχικής θερμοκρασιακής ανύψωσης με τη ροή ακτινοβολίας Laser επαληθεύεται πλήρως.

Αξίζει να παρατηρήσουμε εδώ ότι η περιέλευση του συστήματος στη θερμοκρασία τήξης του Mo δε σημαίνει απαραίτητα και έναρξη της φωτοαποδόμησης. Κάτι τέτοιο έρχεται σε αντίθεση με την προηγούμενη περίπτωση ακτινοβόλησης του στόχου με την πενταπλάσια πυκνότητα ενέργειας, οπότε και άρχισαν να αποδομούνται άτομα με το που το σύστημα περιήλθε στη θερμοκρασία τήξης. Η τήξη είναι μία αλλαγή φάσης που δε λαμβάνει χώρα ακαριαία, αλλά απαιτεί κάποιο μικρό χρονικό διάστημα, κατά τη διάρκεια του οποίου η θερμοκρασία του ατόμου που υπόκειται σε τήξη παραμένει αμετάβλητη. Είναι ιδιαίτερα πιθανό η πτώση του ρυθμού θερμοκρασιακής ανύψωσης (στην περιοχή των $30\text{-}35 \text{ K}$ ανά βήμα), αμέσως μετά την υπέρβαση του σημείου τήξης, να οφείλεται στο γεγονός ότι πολλά άτομα υπόκεινται σε τήξη και δε θερμαίνονται μαζί με τα υπόλοιπα. Αυτό που πάντως είναι σίγουρο είναι το γεγονός ότι η αργή θέρμανση του υλικού από τη χαμηλή ροή ακτινοβολίας φέρνει τη θερμοκρασία του συστήματος στο σημείο τήξης του Mo μετά την παρέλευση 3.2 ns , τη στιγμή που θα πρέπει να έχουν περάσει 6 ns από τη στιγμή έναρξης εφαρμογής της ακτινοβολίας, ώστε η θερμοκρασία του υλικού να φτάσει το σημείο βρασμού. Παρατηρούμε πάντως ότι, αρκετά μετά τη στιγμή των 6 ns , η θερμοκρασιακή ανύψωση ανά βήμα αυξάνει σταδιακά, κάτι που οφείλεται στην έντονη απομάκρυνση σωματιδίων λόγω της ατμοποίησης (εξαέρωσής) τους. Η μέγιστη τιμή επιτυγχάνεται για τη χρονική στιγμή των 7 ns , δηλαδή μετά το πέρας 150 χρονοβημάτων 50 ps . Έπειτα από αυτό το μέγιστο, η θερμοκρασία πέφτει στους 5675 K και μετά ανεβαίνει λίγο, προτού ακολουθήσει μία μεγάλη πτώση προς το τέλος εφαρμογής της ακτινοβολίας, έως τη θερμοκρασία των 3723 K . Όπως αναμένεται, αυτή η θερμοκρασία θα είναι πολύ

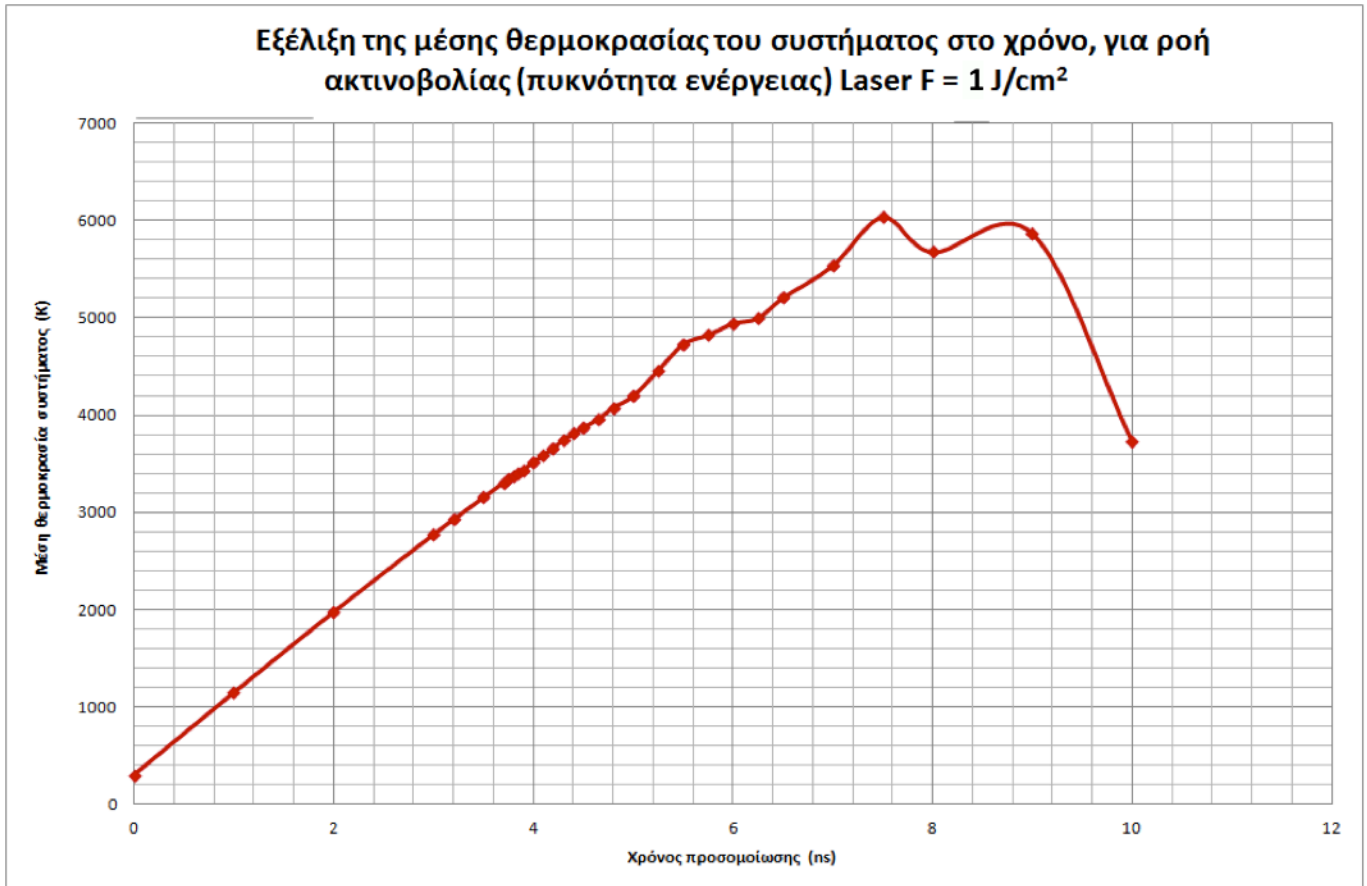
χαμηλότερη από αυτή που θα έχει επιτευχθεί όταν θα έχει ολοκληρωθεί η ακτινοβολία του υμενίου με Laser μεγαλύτερης ροής ακτινοβολίας. Μάλιστα, αυτή η εξεταζόμενη περίπτωση είναι η πρώτη, από αυτές που έχουμε ήδη δει, κατά την οποία η θερμοκρασία που επιτυγχάνεται στο τέλος της προσομοίωσης είναι μικρότερη από το σημείο βρασμού του υλικού (δηλαδή, στις δύο προηγούμενες περιπτώσεις, το σύστημα είχε περιέλθει εξολοκλήρου στην αέρια κατάσταση, κάτι που όμως εδώ δε συμβαίνει).

Προχωράμε τώρα στην ανάλυση της εξέλιξης του ρυθμού φωτοαποδομούμενων σωματιδίων. Τα άτομα που έχουν υπερνικήσει τις δυνάμεις συνοχής που τα κρατούν ενωμένα με τον κρύσταλλο, αρχίζουν και απομακρύνονται σταδιακά, ξεκινώντας από το 74° βήμα της προσομοίωσης (χρονική στιγμή 3.7 ns). Από εδώ, και λαμβάνοντας υπόψη τα αποτελέσματα για τις μεγαλύτερες ροές ακτινοβολίας, είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι όσο μειώνεται η ροή της προσπίπτουσας ακτινοβολίας, τόσο περισσότερο καθυστερεί η έναρξη της φωτοαποδόμησης. Κάτι τέτοιο μπορεί να δικαιολογηθεί και από αυτά που γράφτηκαν παραπάνω σχετικά με τη θερμοκρασιακή ανύψωση, η οποία, όσο επιβραδύνεται, τόσο πιο πολύ καθυστερεί τη μετάβαση του συστήματος σε θερμοκρασίες σχετικές με αλλαγές φάσης. Καθώς η ενέργεια των σωματιδίων αυξάνεται σταδιακά, όλο και περισσότερα άτομα απομακρύνονται από τον κρύσταλλο. Ο ρυθμός φωτοαποδόμησης, όπως φαίνεται και από το Σχήμα 7.9. που θα παραθέσουμε παρακάτω, παρουσιάζει αυξητικές τάσεις μέχρι και τη χρονική στιγμή των 5 ns. Από εκεί και έπειτα, και μέχρι την τιμή 6.3 ns, αυτή η αύξηση σταθεροποιείται (καθώς ο αριθμός των φωτοαποδομημένων σωματιδίων αυξάνεται γραμμικά με το χρόνο), ενώ στη συνέχεια ο ρυθμός φωτοαποδόμησης συνεχώς μειώνεται, πριν τελικά ο αριθμός των φωτοαποδομημένων σωματιδίων διαμορφωθεί στα 3309 με τη λήξη της κατεργασίας. Συγκεκριμένα, θα υπάρχουν $3375 - 3309 = 66$ σωματίδια που δε θα έχουν αποδομηθεί, και τα οποία θα μπορούσαν να ακτινοβοληθούν με ένα δεύτερο παλμό προκειμένου να αποδομηθούν. Είναι λοιπόν εμφανές ότι δεν εξασφαλίζεται εντελώς πλήρης αφαίρεση υλικού με τη συγκεκριμένη ροή ακτινοβολίας.

Τα Σχήματα 7.9. και 8.10. παρουσιάζουν, σε διαγραμματική μορφή, τη μεταβολή τόσο του αριθμού φωτοαποδομημένων σωματιδίων όσο και της θερμοκρασίας του συστήματος των ατόμων, για τη συγκεκριμένη τιμή της ροής ακτινοβολίας. Τα όσα έχουν ειπωθεί σχετικά με τη μεταβολή του ρυθμού φωτοαποδόμησης φαίνονται στο πρώτο Σχήμα, ενώ το δεύτερο Σχήμα είναι ικανό να δείξει, μεταξύ άλλων, ότι η πολύ χαμηλή ροή ακτινοβολίας είναι υπεύθυνη για τη χρονική καθυστέρηση εμφάνιση μιας μέγιστης τιμής στο σύστημα, μέχρι την οποία η αύξηση της θερμοκρασίας έλαβε χώρα με γραμμικό τρόπο, ειδικά πριν τη χρονική στιγμή 3.7 ns, οπότε και άρχισαν να αποδομούνται άτομα του στόχου.



Σχήμα 7.9. Σχηματική παράσταση της μεταβολής του αριθμού φωτοαποδομημένων σωματιδίων στο χρόνο για την περίπτωση προσομοίωσης που εξετάζουμε ($F = 1 \text{ J/cm}^2$), λαμβάνοντας ταυτόχρονα υπόψη τα δεδομένα του Πίνακα 7.4.



Σχήμα 7.10. Σχηματική παράσταση της μεταβολής της μέσης θερμοκρασίας του συστήματος ατόμων του όγκου προσομοίωσης στο χρόνο, για την περίπτωση προσομοίωσης που εξετάζουμε ($F = 1 \text{ J/cm}^2$) λαμβάνοντας ταυτόχρονα υπόψη τα δεδομένα του Πίνακα 7.4.

• Περίπτωση 3^η: $F = 0.5 \text{ J/cm}^2$ (Πίνακας 7.5.)

A/A Μέτρησης	Χρονικό βήμα προσομοίωσης	Χρόνος προσομοίωσης (ns)	Ολικός αριθμός αποδομημένων σωματιδίων	Θερμοκρασία συστήματος (K)
0	0	0	0	300
1	40	2	0	1137.84
2	80	4	0	1910.91
3	120	6	0	2569.73
4	144	7.2	0	2898.28
5	160	8	0	3088.28
6	184	9.2	1	3330.64
7	185	9.25	2	3338.6
8	186	9.3	3	3346.67
9	188	9.4	7	3360.99
10	190	9.5	11	3374.14
11	192	9.6	17	3388.03
12	194	9.7	25	3402.6

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

13	196	9.8	35	3425.3
14	198	9.9	47	3449.52
15	200	10	54	3449.03

***Πίνακας 7.5.** Παράθεση βασικών χαρακτηριστικών / αποτελεσμάτων για επιλεγμένες χρονικές στιγμές προσομοίωσης, αναφορικά με τον αριθμό των ατόμων που αποδομούνται (σε σχέση με την αρχή της προσομοίωσης) αλλά και τη μέση θερμοκρασία που επιτυγχάνεται στο σύστημα. Με γαλάζια σκίαση έχει σημαθεί η πρώτη γραμμή αποτελεσμάτων που αντιστοιχεί σε θερμοκρασία υψηλότερη του σημείου τήξης του Mo. Η θερμοκρασία βρασμού (4912 K) δεν επιτυγχάνεται για το χρονικό διάστημα που διαρκεί ο παλμός. Τα αποτελέσματα έχουν εξαχθεί για ροή ακτινοβολίας Laser $F = 0.5 \text{ J/cm}^2$.*

Το πρώτο πράγμα που μπορούμε να παρατηρήσουμε είναι το γεγονός ότι αυτή η τόσο μικρή τιμή της ροής ακτινοβολίας του Laser δεν είναι αρκετή ώστε να κάνει το σύστημα των υπό ακτινοβολία ατόμων να περιέλθει σε θερμοκρασία μεγαλύτερη από το σημείο βρασμού του Mo. Με τη θερμοκρασία να αυξάνεται συνεχώς, και σε ρυθμό λίγο χαμηλότερο των 21 K / βήμα κατά την έναρξη της προσομοίωσης (837.84 K για τα πρώτα 40 βήματα), βλέπουμε ότι η μέγιστη τιμή του μεγέθους αυτού επιτυγχάνεται σχεδόν με τη λήξη του παλμού και διαμορφώνεται τελικά στους 3449 K, δηλαδή αρκετά χαμηλότερα από το σημείο βρασμού του Mo. Η θερμοκρασία αυτή πάντως είναι επαρκής ώστε να μπορούν να απομακρυνθούν από τον κρύσταλλο ακόμα και λίγα άτομα, με το συνολικό αριθμό να φτάνει τα 54, ή

αλλιώς ένα πολύ μικρό $\frac{54}{3375} \cdot 100\% = 1.6\%$ του όγκου προσομοίωσης. Μπορούμε εδώ να διαπιστώσουμε

ότι, όσο ελαττώνουμε την πυκνότητα ενέργειας, τόσο μεγαλύτερο είναι το χρονικό διάστημα μεταξύ της επίτευξης της θερμοκρασίας τήξης του Mo από το δοκίμιο και της έναρξης απομάκρυνσης σωματιδίων. Ακόμα πάντως και με αυτή τη χαμηλή τιμή, μπορούμε να υπολογίσουμε, έστω και χονδρικά, τον αριθμό ατόμων του υλικού που απομακρύνονται σε κάθε χρονικό βήμα, και να συμπεράνουμε, ως αποτέλεσμα, ότι ο ρυθμός φωτοαποδόμησης αυξάνεται συνεχώς και το φαινόμενο επιταχύνεται χρονικά.

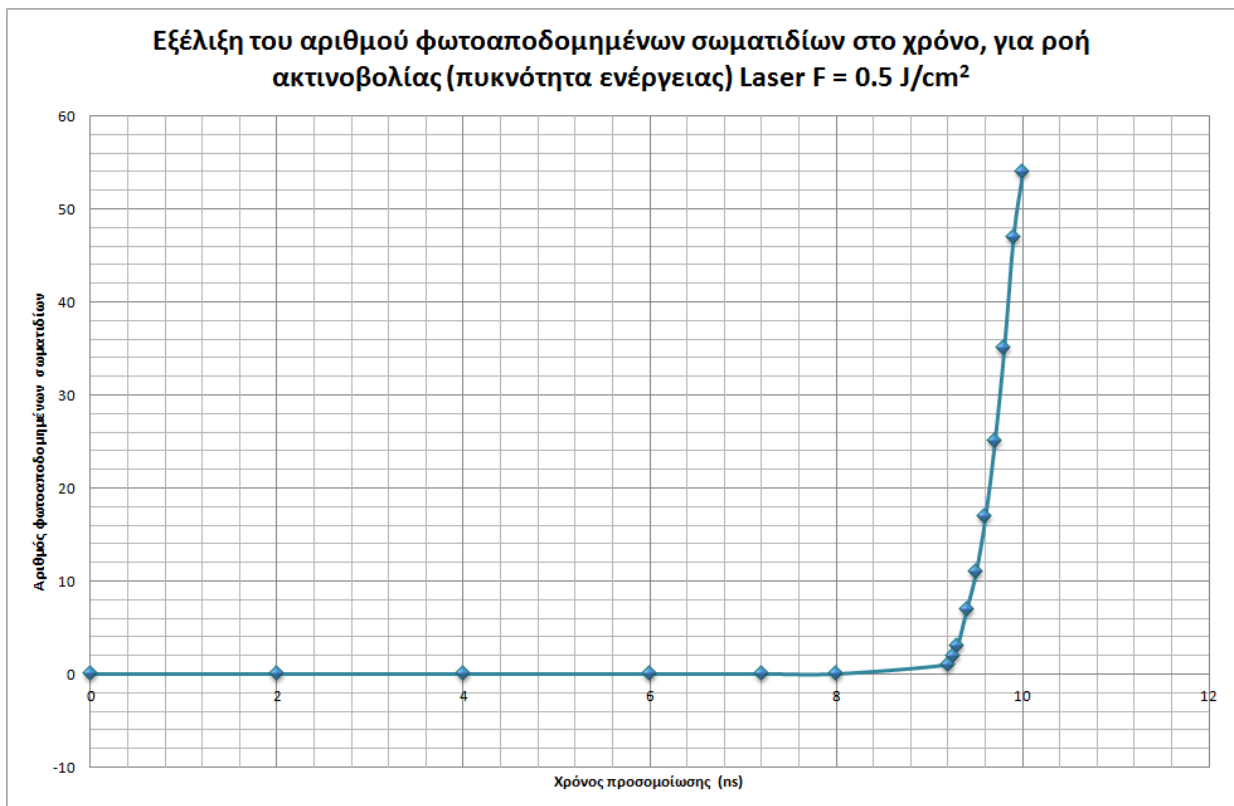
Πάντως, το γεγονός ότι έχουν αποδομηθεί τόσο λίγα σωματίδια από το λεπτό υμένιο έπειτα από το πέρας ενός παλμού, οδηγεί στην ανάγκη είτε για εφαρμογή περισσότερων του ενός παλμού αυτής της ροής, προκειμένου να πετύχουμε τον επιθυμητό βαθμό φωτοαποδόμησης, είτε στην αυτονόητη λύση της αύξησης της ροής ακτινοβολίας, με την τιμή 0.5 J/cm^2 τελικώς να μην κρίνεται προσιτή για την υπό εξέταση περίπτωση της κατεργασίας λεπτών υμενίων (αρχικός μας σκοπός είναι να προσπαθήσουμε να διεκπεραιώσουμε την κατεργασία και επαρκή αποδόμηση της επιφάνειας με χρήση μόνο ενός παλμού).

Από τον παραπάνω Πίνακα θα μπορούσαμε να εκτιμήσουμε και την τιμή του *κατωφλίου φωτοαποδόμησης* για την υπόψη διαδικασία. Έχουμε στο νου μας ότι η αύξηση της θερμοκρασίας κατά

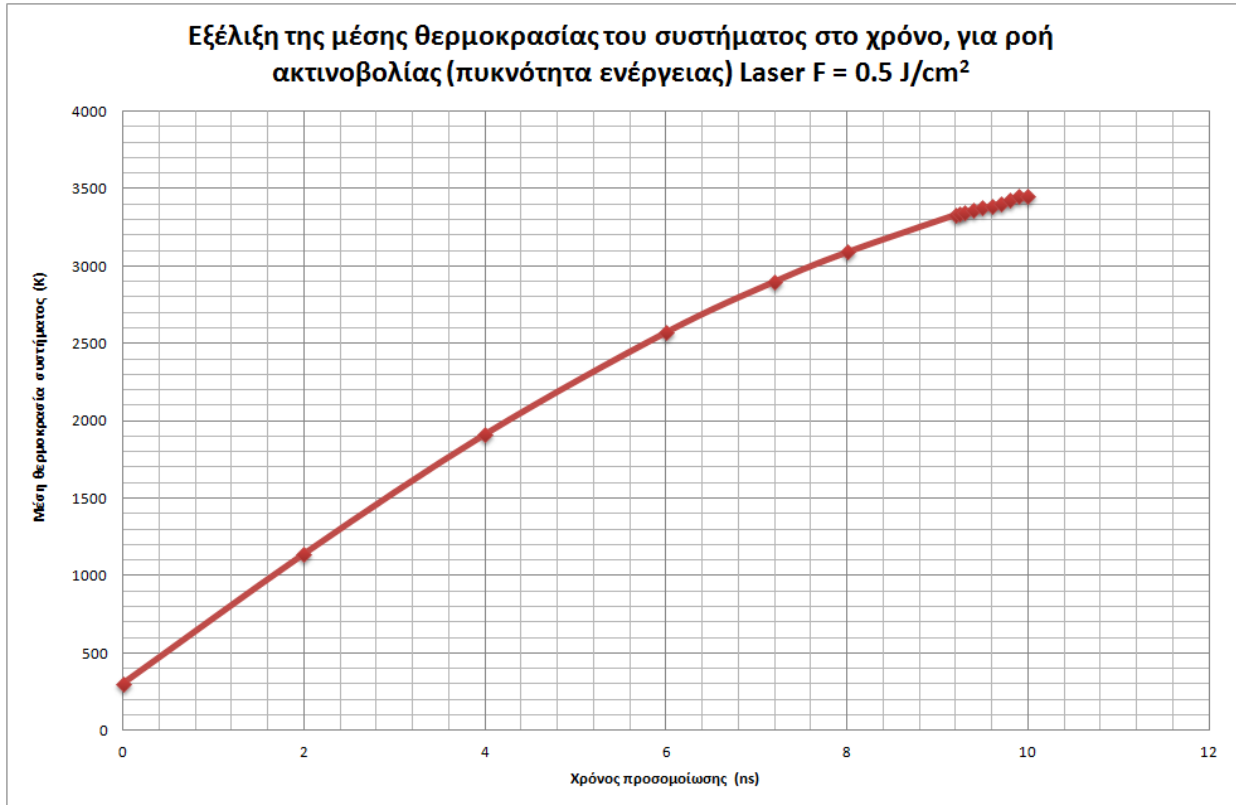
ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

τα πρώτα βήματα είναι ανάλογη της ροής ακτινοβολίας, με την υπόψη συσχέτιση να μην αλλάζει ενόσω δεν απομακρύνονται σωματίδια από το υλικό. Βλέποντας ότι η απαραίτητη προϋπόθεση για να αρχίσουν να αποδομούνται σωματίδια είναι το σύστημα να περιέλθει σε θερμοκρασία 3100°C, δηλαδή λίγο πιο πάνω από το σημείο τήξης του Mo, μπορούμε να βρούμε χονδρικά για ποια ροή ακτινοβολίας μία θερμοκρασία της τάξης των 3200°C (λίγο μεγαλύτερη, από τη στιγμή που η μείωση της ροής επηρεάζει προς τα πάνω και τη θερμοκρασία κατά την οποία αρχίζουν σωματίδια να απομακρύνονται) να είναι η μέγιστη καθ'όλη τη διάρκεια της κατεργασίας. Από τη στιγμή που η μέγιστη θερμοκρασία που παρατηρείται στον προηγούμενο Πίνακα είναι ίση με 3450 K περίπου, τότε η ροή ακτινοβολίας για την οποία μόλις που θα υπάρχει αποδόμηση (ροή κατωφλίου / threshold fluence) θα εκτιμηθεί ίση με $0.5 \cdot \frac{3200}{3450} = 0.4638 \text{ J/cm}^2$. Παρά το γεγονός ότι μία τέτοια θεώρηση ενδέχεται να μη χαρακτηρίζεται από τη μέγιστη δυνατή ακρίβεια και εγκυρότητα, κρίνεται άκρως ικανοποιητική και αποδεκτή για τις συνθήκες της ανάλυσης που διεξάγεται επί του παρόντος.

Η εξέλιξη του αριθμού φωτοαποδομημένων σωματιδίων και της θερμοκρασίας στο χρόνο θα παρατεθεί παρακάτω, για λόγους πληρότητας (Σχήματα 7.11. και 7.12.) και θα βασίζεται στα αριθμητικά αποτελέσματα του Πίνακα 7.5.:



Σχήμα 7.11. Σχηματική παράσταση της μεταβολής του αριθμού φωτοαποδομημένων σωματιδίων στο χρόνο για την περίπτωση προσομοίωσης που εξετάζουμε ($F = 0.5 \text{ J/cm}^2$), λαμβάνοντας ταυτόχρονα υπόψη τα δεδομένα του Πίνακα 7.5.



Σχήμα 7.12. Εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας του συστήματος ατόμων στη μονάδα του χρόνου, για τη ροή ακτινοβολίας $F = 0.5 \text{ J/cm}^2$ που εξετάζουμε επί του παρόντος. Τα αριθμητικά αποτελέσματα λαμβάνονται από τον Πίνακα 7.5.

Αξίζει εδώ να παρουσιάσουμε τρεις ακόμα περιπτώσεις που αναμένεται να κινήσουν το ενδιαφέρον μας κατά τη διάρκεια της υπολογιστικής μελέτης του φαινομένου. Αυτές θα αφορούν τις ροές ακτινοβολίας των 0.8 , 8 και 20 J/cm^2 και θα εξεταστούν στη συνέχεια. Η εξέταση αυτή των τιμών που λογίζονται ως *ενδιάμεσες* σε σχέση με αυτές που έχουμε ήδη παρουσιάσει, μπορούν να μας δώσουν μία πληρέστερη εικόνα για το πώς διαμορφώνεται τόσο ο ρυθμός φωτοαποδόμησης όσο και η ταχύτητα με την οποία αυξάνεται η θερμοκρασία εντός του υλικού όσο αυτό ακτινοβολείται. Η συγκεκριμένη μελέτη μπορεί να δώσει σε παρόντες και μελλοντικούς ερευνητές το έναυσμα για τη διερεύνηση των συνθηκών εκείνων που θα βελτιώσουν την αποδοτικότητα της φωτοαποδόμησης και των κατεργασιών που σχετίζονται με αυτή.

- **Περίπτωση 4^η: $F = 0.8 \text{ J/cm}^2$ (Πίνακας 7.6.)**

**ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ
ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ**

A/A Μέτρησης	Χρονικό βήμα προσομοίωσης	Χρόνος προσομοίωσης (ns)	Ολικός αριθμός αποδομημένων σωματιδίων	Θερμοκρασία συστήματος (K)
0	0	0	0	300
1	20	1	0	977.13
2	40	2	0	1640.55
3	60	3	0	2277.68
4	81	4.05	0	2906.3
5	96	4.8	1	3324.29
6	97	4.85	3	3350.07
7	98	4.9	6	3370.48
8	100	5	18	3416.54
9	102	5.1	35	3476.8
10	104	5.2	59	3536.13
11	106	5.3	91	3588.4
12	108	5.4	130	3641.51
13	110	5.5	177	3688.23
14	113	5.65	264	3750.99
15	116	5.8	366	3803.83
16	120	6	524	3921.68
17	125	6.25	733	4088.32
18	130	6.5	947	4233.6
19	135	6.75	1187	4390.02
20	140	7	1418	4507.51
21	145	7.25	1656	4541.19
22	150	7.5	1855	4713.72
23	160	8	2250	4981.47
24	163	8.15	2357	5038.69
25	170	8.5	2544	4945.68
26	180	9	2784	5289.03
27	185	9.25	2878	5644.02
28	190	9.5	2969	5268.14
29	200	10	3093	5331.99

Πίνακας 7.6. Παράθεση βασικών χαρακτηριστικών / αποτελεσμάτων για επιλεγμένες χρονικές στιγμές προσομοίωσης, αναφορικά με τον αριθμό των ατόμων που αποδομούνται (σε σχέση με την αρχή της προσομοίωσης) αλλά και τη μέση θερμοκρασία που επιτυγχάνεται στο σύστημα. Με γαλάζια σκίαση έχει σημανθεί η πρώτη γραμμή αποτελεσμάτων που αντιστοιχεί σε θερμοκρασία υψηλότερη του σημείου τήξης

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

του Mo, ενώ με πορτοκαλί η αντίστοιχη γραμμή που χαρακτηρίζεται από θερμοκρασία υψηλότερη από το σημείο βρασμού του υλικού. Τα αποτελέσματα έχουν εξαχθεί για ροή ακτινοβολίας Laser $F = 0.8 \text{ J/cm}^2$.

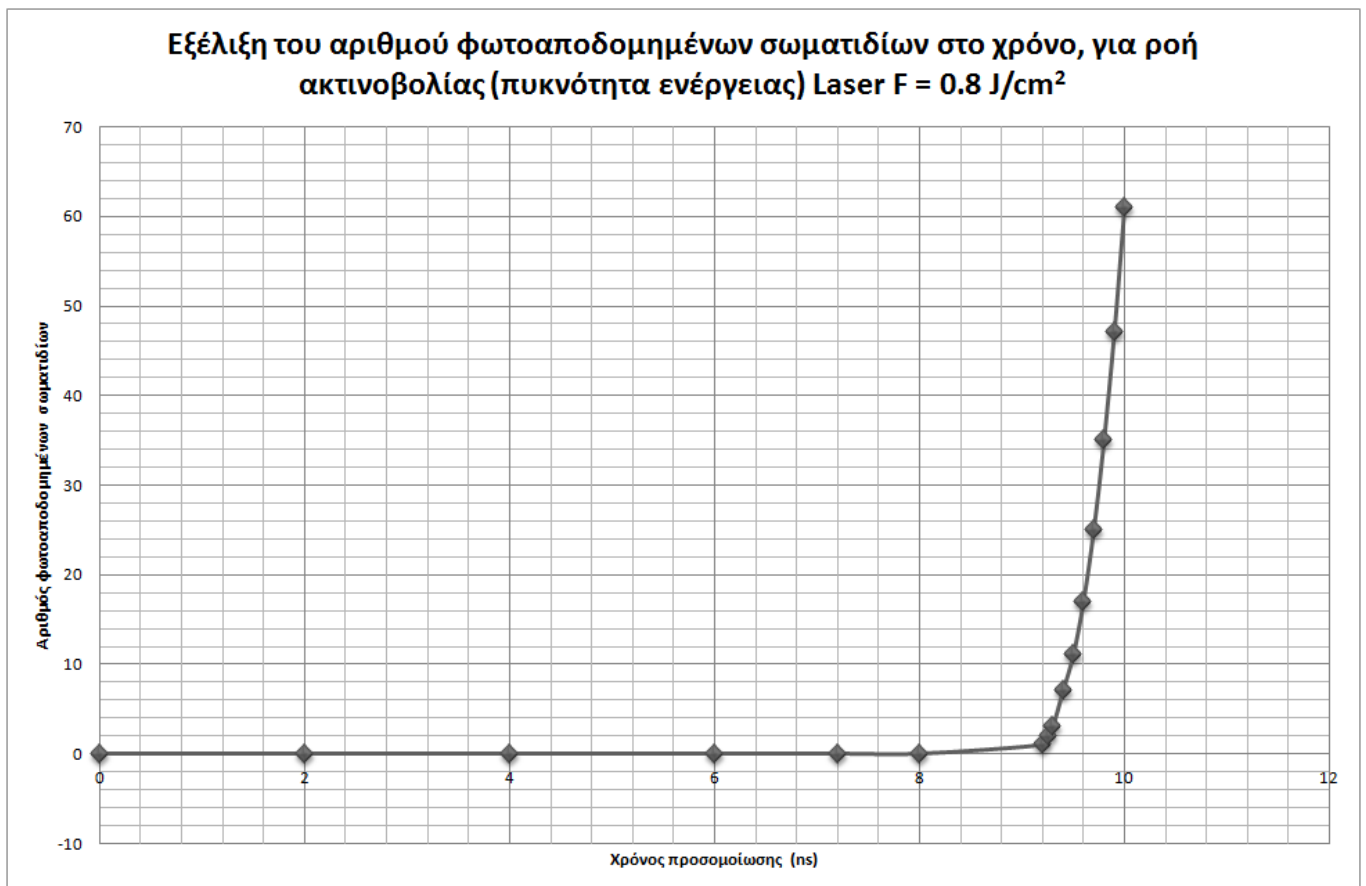
Αρχικά παρατηρούμε ότι η θερμοκρασία τήξης του Mo επιτυγχάνεται έπειτα από 81 χρονικά βήματα, ή 4.05 ns, του συνολικού χρόνου προσομοίωσης. Η έναρξη της απομάκρυνσης σωματιδίων δε συμπίπτει με την περιέλευση του συστήματος προσομοίωσης στη θερμοκρασία τήξης, αλλά παρέρχονται 15 βήματα (0.75 ns) ανάμεσα στα δύο αυτά συμβάντα. Όπως θα φανεί και στο Σχήμα 6.14, που παριστάνει την εξέλιξη της θερμοκρασίας του συστήματος σε σχέση με το χρόνο, ο ρυθμός αύξησης της θερμοκρασίας παρουσιάζει μειωτική τάση από τη στιγμή που το υλικό αρχίζει να τήκεται, μέχρι και τη χρονική στιγμή 5 ns (100^ο χρονικό βήμα). Κάτι τέτοιο, όπως είδαμε και στην προηγούμενη περίπτωση (για $F = 0.5 \text{ J/cm}^2$), ενδεχομένως να σχετίζεται με το γεγονός ότι τα άτομα που πρόκειται να υποστούν τήξη διατηρούν τη θερμοκρασία τους σταθερή μέχρι την πλήρη πραγματοποίηση της τήξης (δε συντελείται δηλαδή αύξηση της θερμοκρασίας ενός ατόμου, κατά το χρονικό διάστημα στο οποίο τήκεται).

Ο ρυθμός με τον οποίο αφαιρούνται σωματίδια από τον όγκο αυξάνεται συνεχώς, μέχρι και τη χρονική στιγμή των 6.75 ns, οπότε και οδεύει προς εκ νέου ελάττωση. Κάτι τέτοιο φαντάζει λογικό από τη στιγμή που η δέσμη του Laser έχει υποστεί σημαντική εξασθένηση κυρίως λόγω της διείσδυσής της σε βάθος (με βάση το νόμο του Beer-Lambert), ενώ έχει ταυτόχρονα επηρεαστεί και από το δημιουργούμενο νέφος πλάσματος, το οποίο αποκτά ολοένα και μεγαλύτερο πάχος καθώς προχωρά η προσομοίωση.

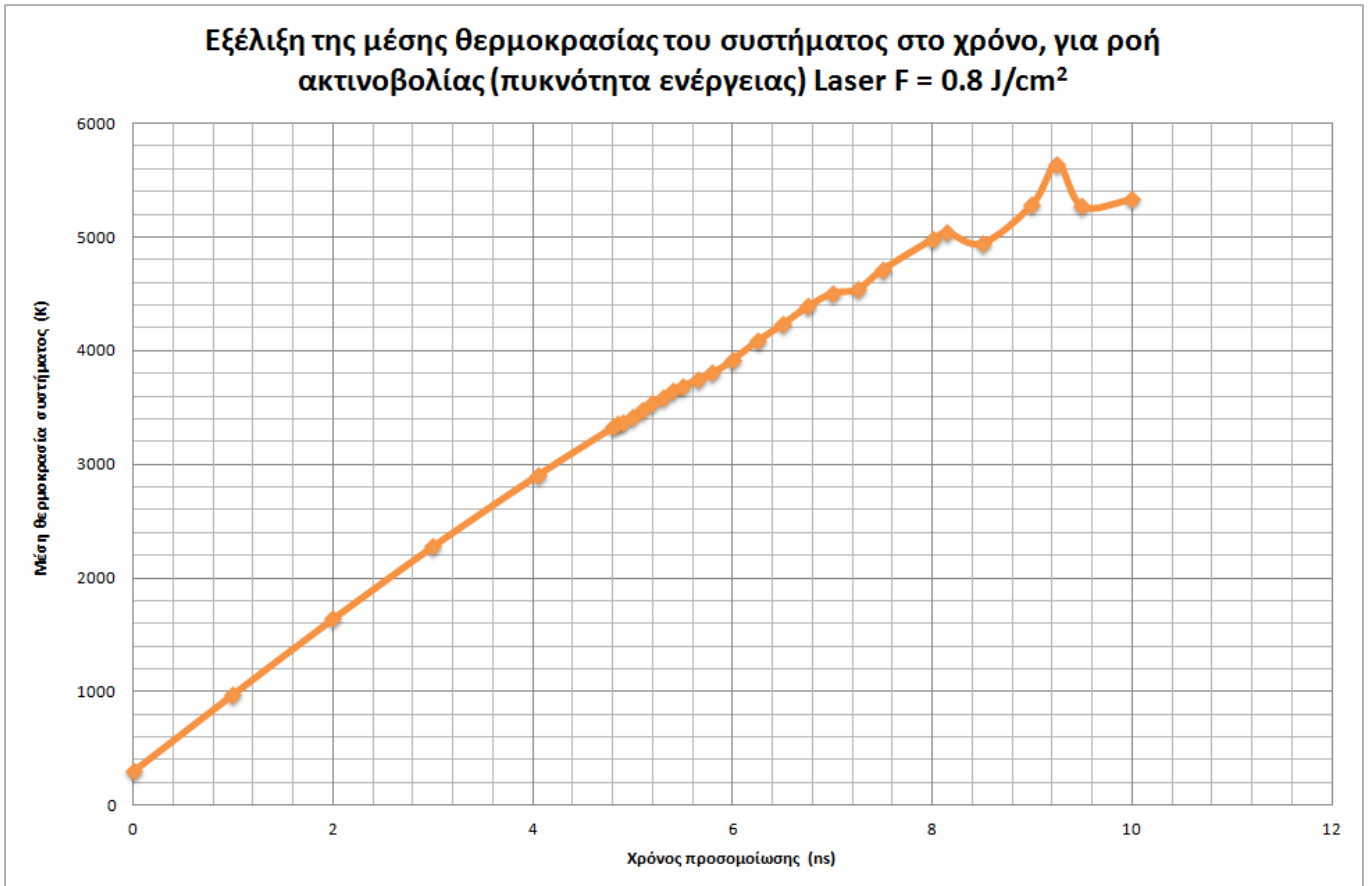
Κατά τα πρώτα βήματα της προσομοίωσης, η αύξηση της θερμοκρασίας του συστήματος είναι γραμμική, με μία τιμή λίγο κάτω από τους 39 K / βήμα (αύξηση 677.13 K για τα 20 πρώτα χρονοβήματα). Στη συνέχεια, παράγοντες όπως η εξασθένηση της δέσμης, η απομάκρυνση των σωματιδίων αλλά και η δημιουργία θερμικά επηρεασμένων ζωνών (HAZ), παίζουν το ρόλο τους στη διαμόρφωση ενός προφίλ θερμοκρασίας, στο οποίο η υπόψη τιμή παρουσιάζει μία μεταβολή που απέχει, έστω και λίγο, από τη γραμμική. Το σημείο τήξης των 2890 K και το σημείο βρασμού των 4912 K επιτυγχάνονται λίγο πριν το 4^ο και 23^ο στιγμιότυπο της MD ανάλυσης, που αντικατοπτρίζει αντίστοιχα τις χρονικές στιγμές 4.05 ns και 8 ns. Το ολικό μέγιστο της θερμοκρασίας έχει βρεθεί ίσο με τη σχετικά υψηλή τιμή των 5644 K, η οποία παρατηρείται 0.75 ns πριν τη λήξη της προσομοίωσης. Πρόκειται για μία τιμή που κρίνεται ιδιαίτερα λογική, από τη στιγμή που παρόμοιες μελέτες σε μεταλλικά υλικά μετάπτωσης (στα οποία ανήκει και το Mo), όπως ο σίδηρος (Fe), έχουν εξαγάγει ως αποτέλεσμα παραπλήσιες τιμές της μέγιστης θερμοκρασίας για πυκνότητες ενέργειας ακτινοβολίας που βρίσκονται πολύ κοντά σε αυτή που εξετάζεται επί του παρόντος (π.χ. η μελέτη [E1] κάνει λόγο για μέγιστη θερμοκρασία 6582 K στην περίπτωση ακτινοβολίας δοκιμίων από Fe με πυκνότητα ενέργειας Laser 0.6 J/cm^2).

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Σε γενικές γραμμές, αυτά που μπορούμε να παρατηρήσουμε είναι ότι η σχέση αναλογίας της θερμοκρασιακής αύξησης με τη ροή ακτινοβολίας εξακολουθεί να ισχύει, ότι η θερμοκρασία παρουσιάζει αυξητικές τάσεις σχεδόν μέχρι τη λήξη της προσομοίωσης, και ότι, λόγω της σχετικά αργής θέρμανσης του υλικού, η φωτοαποδόμηση ατόμων (σωματιδίων) από αυτό αρχίζει να υφίσταται μετά από ένα εύλογο χρονικό διάστημα σε σχέση με την έναρξη της προσομοίωσης. Τα Σχήματα 7.13. και 7.14. μπορούν να μας δώσουν με τη σειρά τους μία εμπειριστατωμένη εικόνα για το πώς εξελίσσεται η φωτοαποδόμηση λόγω της εφαρμογής της συγκεκριμένης πυκνότητας ενέργειας ακτινοβολίας.



Σχήμα 7.13. Σχηματική παράσταση της μεταβολής του αριθμού φωτοαποδομημένων σωματιδίων στο χρόνο για την περίπτωση προσομοίωσης που εξετάζουμε ($F = 0.8 \text{ J/cm}^2$), λαμβάνοντας ταυτόχρονα υπόψη τα δεδομένα του Πίνακα 7.6.



Σχήμα 7.14. Εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας του συστήματος ατόμων στη μονάδα του χρόνου, για τη ροή ακτινοβολίας $F = 0.8 \text{ J/cm}^2$ που εξετάζουμε επί του παρόντος. Τα αριθμητικά αποτελέσματα λαμβάνονται από τον Πίνακα 7.6.

- Περίπτωση 5^η: $F = 8 \text{ J/cm}^2$ (Πίνακας 7.7.)

Α/Α Μέτρησης	Χρονικό βήμα προσομοίωσης	Χρόνος προσομοίωσης (ns)	Ολικός αριθμός αποδομημένων σωματιδίων	Θερμοκρασία συστήματος (K)
0	0	0	0	300
1	8	0.4	1	3016.52
2	9	0.45	25	3354.54
3	10	0.5	72	3674.32
4	11	0.55	135	4023.48
5	12	0.6	213	4363.81
6	13	0.65	300	4692.81
7	15	0.75	509	5393.74
8	17	0.85	780	6151.05
9	20	1	1215	7225.09

**ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ
ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ**

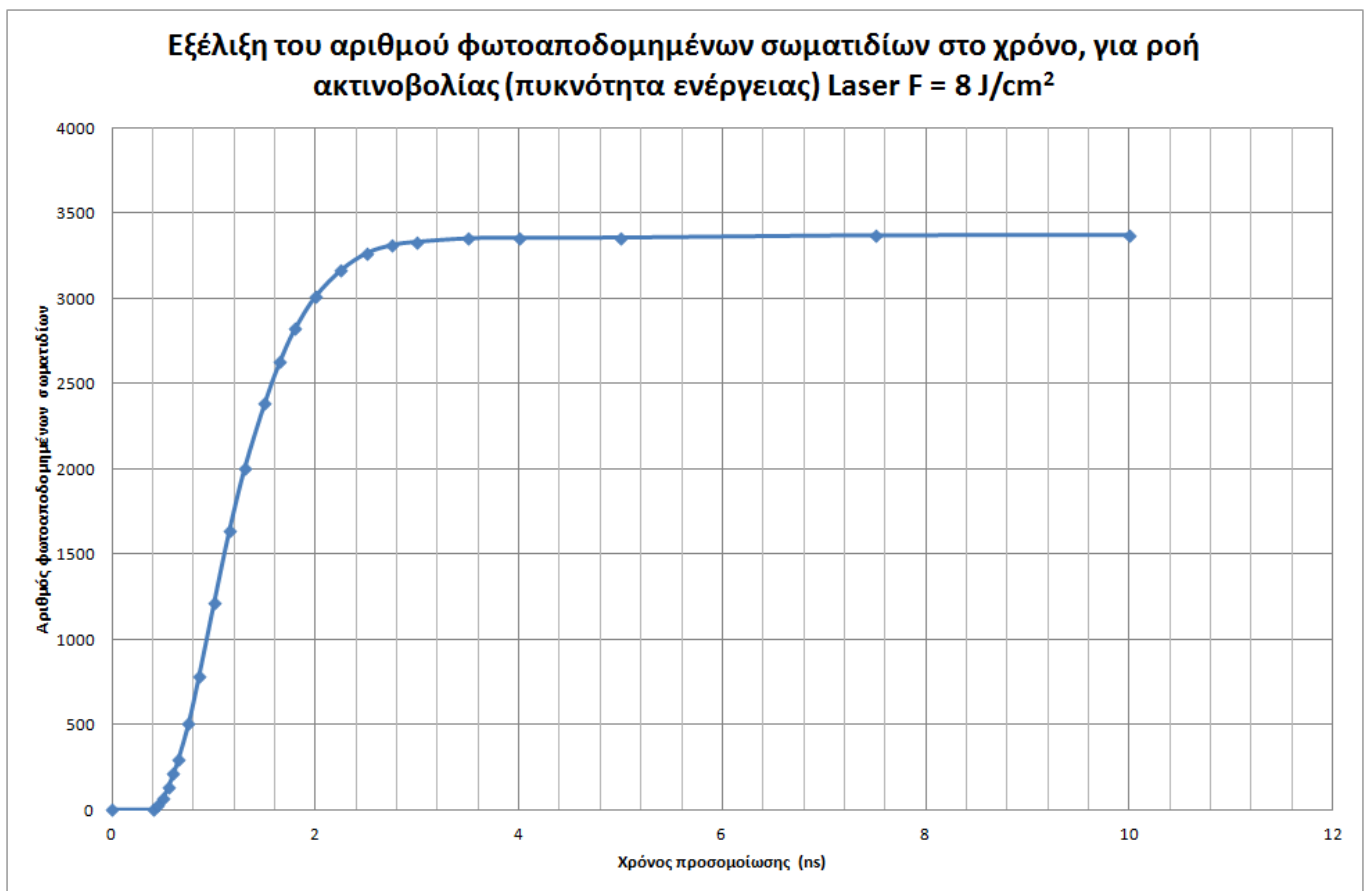
10	23	1.15	1637	8199.13
11	26	1.3	2002	9249.29
12	30	1.5	2387	10601.33
13	33	1.65	2630	11957.27
14	36	1.8	2825	12774.11
15	40	2	3011	14288.41
16	45	2.25	3164	17664.62
17	50	2.5	3263	20779.91
18	55	2.75	3311	14087.59
19	60	3	3330	8869.74
20	70	3.5	3350	7277.59
21	80	4	3354	5259.3
22	100	5	3355	5132.33
23	150	7.5	3368	6901.72
24	200	10	3369	4438.78

Πίνακας 7.7. Παράθεση βασικών χαρακτηριστικών / αποτελεσμάτων για επιλεγμένες χρονικές στιγμές προσομοίωσης, αναφορικά με τον αριθμό των ατόμων που αποδομούνται (σε σχέση με την αρχή της προσομοίωσης) αλλά και τη μέση θερμοκρασία που επιτυγχάνεται στο σύστημα. Με γαλάζια σκίαση έχει σημανθεί η πρώτη γραμμή αποτελεσμάτων που αντιστοιχεί σε θερμοκρασία υψηλότερη του σημείου τήξης του Mo, ενώ με πορτοκαλί η αντίστοιχη γραμμή που χαρακτηρίζεται από θερμοκρασία υψηλότερη από το σημείο βρασμού του υλικού. Τα αποτελέσματα έχουν εξαχθεί για ροή ακτινοβολίας Laser $F = 8 \text{ J/cm}^2$.

Η ροή ακτινοβολίας των 8 J/cm^2 είναι μία ενδιαμέση τιμή που βρίσκεται ανάμεσα σε αυτές των 5 και 10 J/cm^2 , για τις οποίες έχουμε αναφέρει σημαντικά στοιχεία παραπάνω. Για αυτό το λόγο, αναμένουμε ότι η έναρξη της φωτοαποδόμησης σωματιδίων θα γίνει νωρίτερα από ότι στα 5 J/cm^2 και αργότερα από ότι στα 10 (όσον αφορά τη χρονική στιγμή της προσομοίωσης), ενώ ταυτόχρονα θα επιτευχθεί μία μέγιστη θερμοκρασία που είναι μεγαλύτερη από αυτή της πρώτης περίπτωσης και μικρότερη από αυτή της δεύτερης. Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα του Πίνακα 7.7. με αυτά των 7.2. (για 10 J/cm^2) και 7.3. (για 5 J/cm^2), βλέπουμε ότι και οι δύο παρατηρήσεις – προβλέψεις μας επαληθεύονται πλήρως. Για την τρέχουσα περίπτωση, η φωτοαποδόμηση ατόμων Mo αρχίζει και λαμβάνει χώρα ήδη από το 8° χρονικό βήμα (0.4 ns), με το ρυθμό εξέλιξης της κατεργασίας να αυξάνεται συνεχώς πριν αρχίσει και πάλι να ελαττώνεται, χονδρικά από τη χρονική στιγμή του 1.5 ns και μετά. Παρ'όλα αυτά, η μείωση του ρυθμού φωτοαποδόμησης δε συνεπάγεται και την ελάττωση της θερμοκρασίας κατά την ίδια στιγμή, με το αντίθετο να συμβαίνει μέχρι και τα 2.5 ns της προσομοίωσης, οπότε και παρατηρείται η μέγιστη επιτεύξιμη θερμοκρασία των 20779.91 K. Έκτοτε, η ψύξη του συστήματος είναι ιδιαίτερα ταχεία και

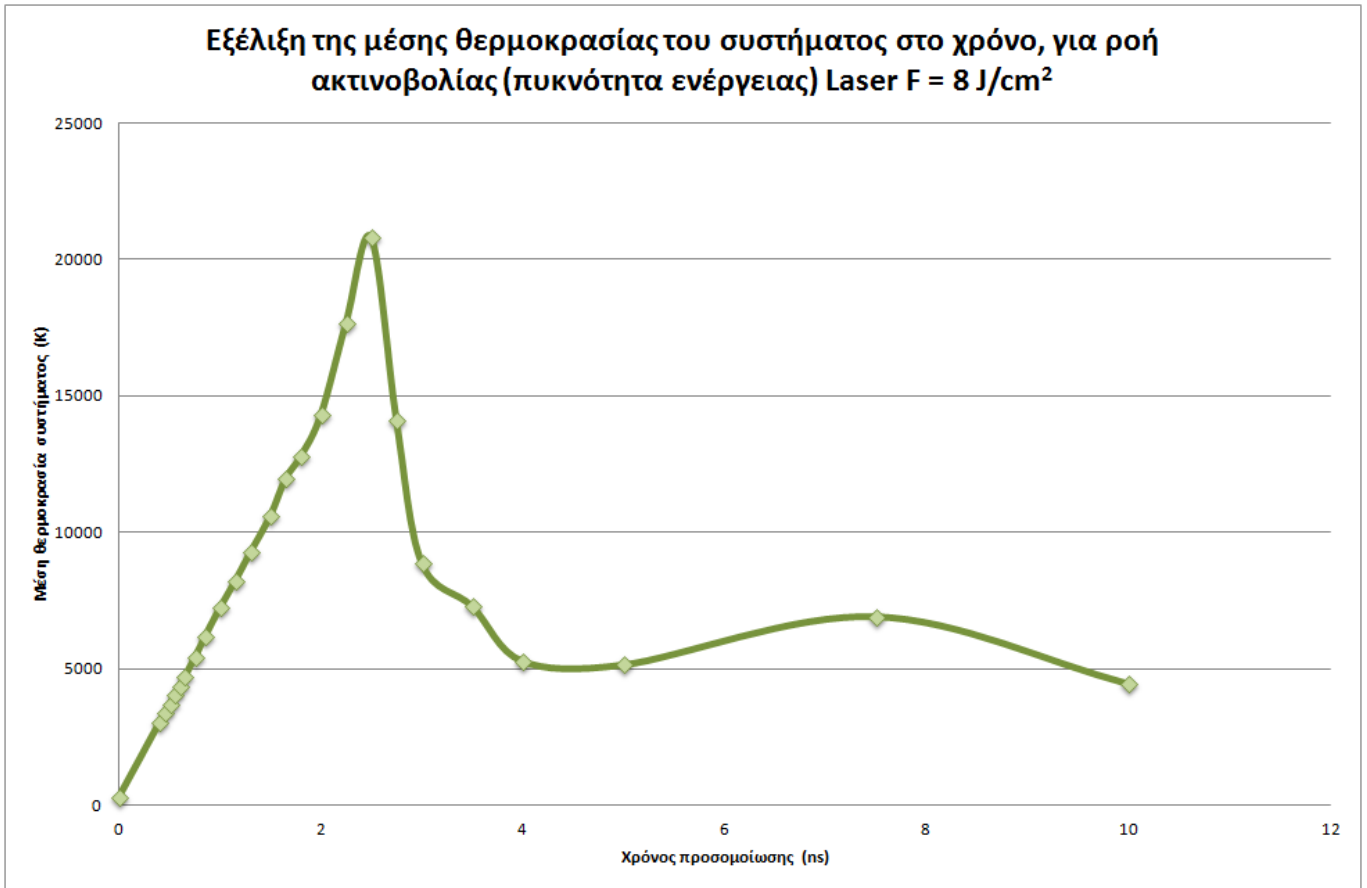
συνδέεται με το γεγονός ότι πλέον δεν αποδομείται ιδιαίτερα υψηλός αριθμός ατόμων κατά τα τελευταία στάδια ολοκλήρωσης της κατεργασίας (άλλωστε, τη στιγμή που εμφανίζεται η μέγιστη θερμοκρασία έχουν ήδη απομακρυνθεί τα 3263 από τα 3375 συνολικά άτομα του αρχικού όγκου προσομοίωσης). Στο τέλος της κατεργασίας, το σύστημα περιέρχεται σε θερμοκρασία χαμηλότερη του σημείου βρασμού του Mo, πράγμα που σημαίνει ότι ένα ή περισσότερα από τα 6 (3375 – 3369) άτομα που δεν έχουν αποδομηθεί, ενδέχεται να μεταβούν από την αέρια στην υγρή κατάσταση και να στερεοποιηθούν σε μελλοντικές χρονικές στιγμές, λαμβάνοντας με αυτό τον τρόπο τη μορφή στερεοποιημένου τήγματος.

Τα Σχήματα 7.15. και 7.16. μπορούν να μας βοηθήσουν στον ευκολότερο σχολιασμό της εξέλιξης της φωτοαποδόμησης για την υπόψη ροή ακτινοβολίας, και μας επιτρέπουν να εξαγάγουμε και να κατανοήσουμε καλύτερα τα συμπεράσματα που τελικά προκύπτουν έπειτα από την ολοκλήρωση της αντίστοιχης κατεργασίας. Ειδικά στο Σχήμα 7.16. φαίνεται ότι η δραστική πτώση της (μέσης) θερμοκρασίας του συστήματος συνοδεύεται από μία περιοχή στην οποία αυτή αυξάνεται σε μικρό βαθμό προτού μειωθεί εκ νέου, με αυτή τη μικρή αυξητική τάση να οφείλεται κατά πάσα πιθανότητα σε θέρμανση των εναπομεινάντων ατόμων από τη δέσμη Laser όσο αυτά δεν αποδομούνται.



Σχήμα 7.15. Σχηματική παράσταση της μεταβολής του αριθμού φωτοαποδομημένων σωματιδίων στο χρόνο για την περίπτωση προσομοίωσης που εξετάζουμε ($F = 8 \text{ J/cm}^2$), λαμβάνοντας ταυτόχρονα υπόψη τα δεδομένα του Πίνακα 7.7.

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ



Σχήμα 7.16. Εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας του συστήματος ατόμων στη μονάδα του χρόνου, για τη ροή ακτινοβολίας $F = 8 \text{ J/cm}^2$ που εξετάζουμε επί του παρόντος. Τα αριθμητικά αποτελέσματα λαμβάνονται από τον Πίνακα 7.7.

• Περίπτωση 6^η: $F = 20 \text{ J/cm}^2$ (Πίνακας 7.8.)

Α/Α Μέτρησης	Χρονικό βήμα προσομοίωσης	Χρόνος προσομοίωσης (ns)	Ολικός αριθμός αποδομημένων σωματιδίων	Θερμοκρασία συστήματος (K)
0	0	0	0	300
1	3	0.15	24	2848.07
2	4	0.2	93	3677.89
3	5	0.25	200	4545.57
4	6	0.3	369	5391.02
5	7	0.35	526	6225.71
6	8	0.4	691	7063.94
7	9	0.45	877	7913.51
8	10	0.5	1060	8785.98
9	12	0.6	1428	10480.61
10	14	0.7	1780	12555.58

**ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ
ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ**

11	16	0.8	2079	14236.2
12	18	0.9	2336	16614.61
13	20	1	2553	17834.42
14	23	1.15	2825	22117.05
15	26	1.3	3007	23976.93
16	30	1.5	3170	28974.99
17	35	1.75	3287	29243.9
18	40	2	3326	14156.91
19	45	2.25	3345	13086.06
20	50	2.5	3358	9702.86
21	60	3	3369	4340.54
22	80	4	3369	5565.95
23	100	5	3370	2716.45
24	200	10	3370	4208.7

***Πίνακας 7.8.** Παράθεση βασικών χαρακτηριστικών / αποτελεσμάτων για επιλεγμένες χρονικές στιγμές προσομοίωσης, αναφορικά με τον αριθμό των ατόμων που αποδομούνται (σε σχέση με την αρχή της προσομοίωσης) αλλά και τη μέση θερμοκρασία που επιτυγχάνεται στο σύστημα. Με γαλάζια σκίαση έχει σημανθεί η πρώτη γραμμή αποτελεσμάτων που αντιστοιχεί σε θερμοκρασία υψηλότερη του σημείου τήξης του Mo, ενώ με πορτοκαλί η αντίστοιχη γραμμή που χαρακτηρίζεται από θερμοκρασία υψηλότερη από το σημείο βρασμού του υλικού. Τα αποτελέσματα έχουν εξαχθεί για ροή ακτινοβολίας Laser $F = 20 \text{ J/cm}^2$.*

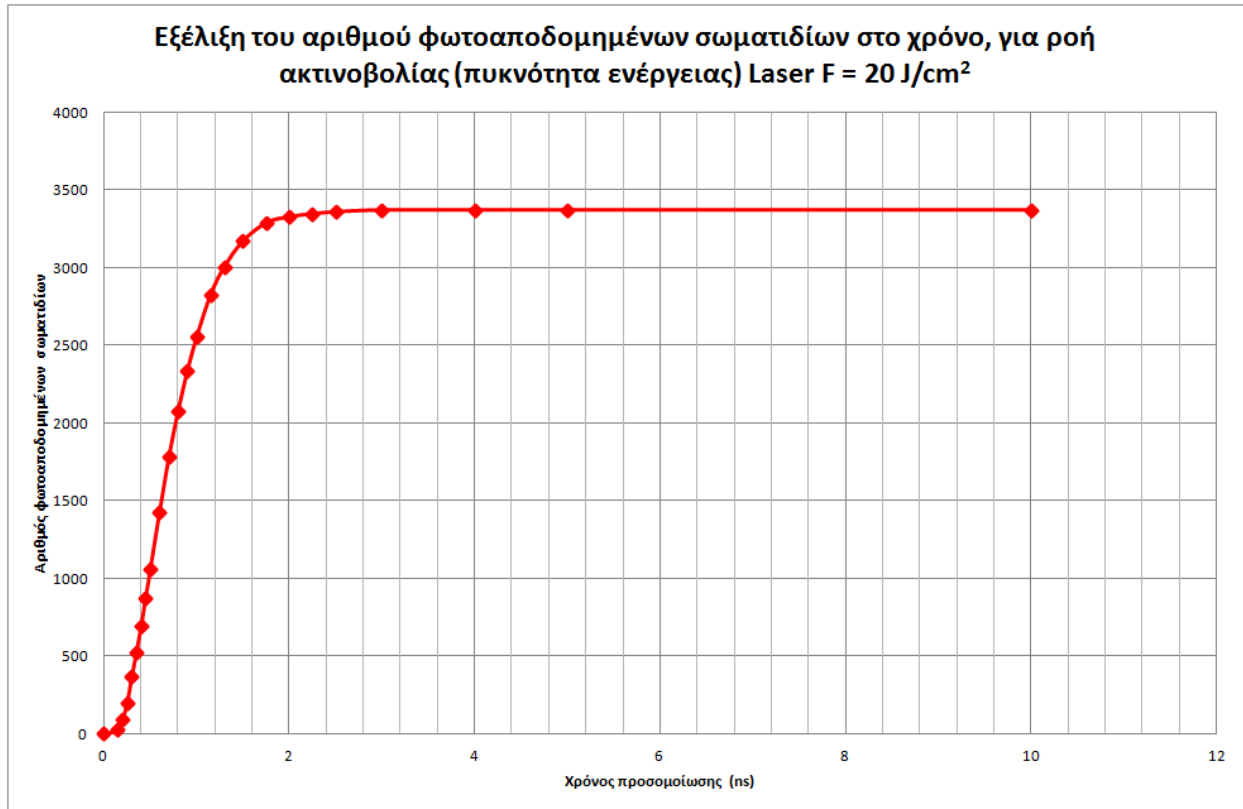
Η ροή ακτινοβολίας των 20 J/cm^2 έχει ως φανερό αποτέλεσμα την πολύ ταχεία και έντονη θέρμανση του υλικού που ακτινοβολείται από τη δέσμη Laser, κάτι που, με τη σειρά του, συντελεί στην πολύ γρήγορη μετάβαση της μέσης θερμοκρασίας του συστήματος σε τιμές περιμετρικά του σημείου τήξης (για 0.15 ns) και βρασμού (για 0.3 ns) του Mo, για τα οποία (σημεία) έχουν δοθεί πληροφορίες παραπάνω. Είναι πάντως ιδιαίτερα αξιοσημείωτο το γεγονός ότι αρχίζουν και αποδομούνται άτομα από το υλικό πριν η μέση θερμοκρασία του συστήματος αγγίξει τη θερμοκρασία τήξης (περίπου 2980 K). Κάτι τέτοιο μπορεί να εξηγηθεί από το γεγονός ότι η θερμοκρασία για την οποία γίνεται λόγος στον Πίνακα 7.8. είναι ουσιαστικά μία τιμή μέσης θερμοκρασίας για το σύστημα των ατόμων, που έχει προκύψει από τη στάθμιση (σε μορφή μέσου όρου) πολλών διαφορετικών τιμών θερμοκρασιών. Σε ακραίες θέσεις της περιοχής φωτοαποδόμησης η θερμοκρασία δεν έχει αυξηθεί ιδιαίτερα σε σχέση με τους 300 K , πράγμα που σημαίνει ότι τα άτομα αυτά ελαττώνουν τη μέση θερμοκρασία. Για αυτό το λόγο, σίγουρα το σύστημα περιλαμβάνει άτομα των οποίων η θερμοκρασία είναι υψηλότερη από το σημείο τήξης, με άμεση συνέπεια αυτά να έχουν περιέλθει στην υγρή κατάσταση.

Ο ρυθμός φωτοαποδόμησης, κατά τα πρώτα στάδια της κατεργασίας, αυξάνεται πολύ γρήγορα, φτάνοντας έως και σε μία τιμή λίγο χαμηλότερη από τα 200 άτομα / βήμα, κατά τη χρονική στιγμή του

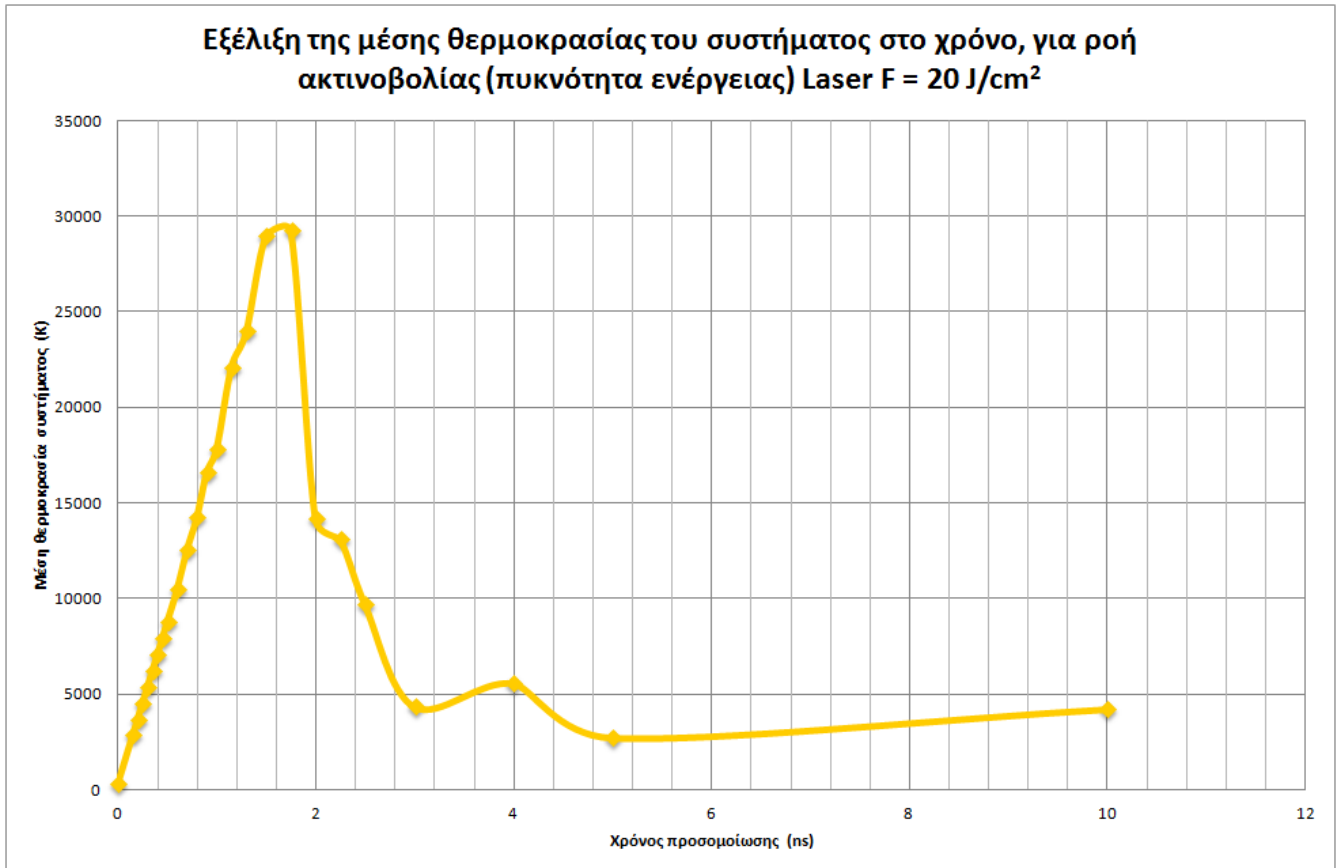
μισού (0.5) ns. Το γεγονός ότι απομακρύνονται πολλά σωματίδια από τον κρύσταλλο ήδη από τα πρώτα χρονικά βήματα, έχει ως φυσικό επακόλουθο τη σταδιακή μείωση του ρυθμού απομάκρυνσης σωματιδίων, ο οποίος φτάνει σε πολύ χαμηλές τιμές ύστερα από την επίτευξη της μέγιστης θερμοκρασίας στο σύστημα (29243.9 K), μέχρι τελικά να έχουν αποδομηθεί 3370 σωματίδια με τη λήξη του παλμού, με τον όγκο προσομοίωσης τελικά να περιλαμβάνει μόνο 5 άτομα Mo.

Η αύξηση της θερμοκρασίας στο σύστημα είναι πολύ ταχεία ήδη από τα πρώτα βήματα. Χαρακτηρίζεται από γραμμικότητα μέχρι περίπου τα 1.2 ns (βλ. Σχήμα 7.18.) και σχεδόν γραμμικότητα για τα επόμενα 300 ps. Με την αύξηση της θερμοκρασίας ανά βήμα, κατά τα πρώτα βήματα, να είναι περίπου ίση με 850 K (2548.07 K για τα 3 πρώτα χρονοβήματα), και λαμβάνοντας υπόψη ότι η αντίστοιχη τιμή για τη μισή ροή ακτινοβολίας (10 J/cm^2) ισούται με κάτι παραπάνω από 420 K, είναι εμφανές ότι εξακολουθεί να ισχύει η σχέση αναλογίας της θερμοκρασιακής ανύψωσης με τη ροή ακτινοβολίας. Τέλος, διαπιστώνουμε ότι η ελάττωση της θερμοκρασίας, μετά την επίτευξη του μέγιστου, είναι ιδιαίτερα απότομη, φτάνοντας, για τα 5 ns του παλμού, σε ένα ελάχιστο που αντιστοιχεί στη χαμηλότερη τιμή (για τα προχωρημένα στάδια της φωτοαποδόμησης) από όλες όσες έχουν εξεταστεί μέχρι στιγμής: 2716.45 K. Αυτή η θερμοκρασία είναι χαμηλότερη και από το σημείο τήξης του Mo, πράγμα που σημαίνει ότι μπορεί να οδηγήσει και σε στερεοποίηση των λίγων ατόμων που έχουν παραμείνει στον όγκο προσομοίωσης.

Τα συμπεράσματά μας μπορούν να εξαχθούν με ιδιαίτερη ευκολία εάν παρατηρήσουμε *γραφικά* την εξέλιξη τόσο του αριθμού των αποδομημένων σωματιδίων όσο και της μέσης θερμοκρασίας του συστήματος, αντίστοιχα μέσω των Σχημάτων 7.17. και Σχημάτων 7.18.:



Σχήμα 7.17. Σχηματική παράσταση της μεταβολής του αριθμού φωτοαποδομημένων σωματιδίων στο χρόνο για την περίπτωση προσομοίωσης που εξετάζουμε ($F = 20 \text{ J/cm}^2$), λαμβάνοντας ταυτόχρονα υπόψη τα δεδομένα του Πίνακα 7.8.



Σχήμα 7.18. Εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας του συστήματος ατόμων στη μονάδα του χρόνου, για τη ροή ακτινοβολίας $F = 20 \text{ J/cm}^2$ που εξετάζουμε επί του παρόντος. Τα αριθμητικά αποτελέσματα λαμβάνονται από τον Πίνακα 7.8.

- **Ιδιαίτερη περίπτωση: Φωτοαποδόμηση λεπτού υμενίου Al με nanosecond παλμούς Laser πυκνότητας ενέργειας 10 J/cm^2**

Στην ανάλυση που θα διεξαγάγουμε επί του παρόντος, θα επικεντρωθούμε στο πώς το χρησιμοποιούμενο υλικό στην κατεργασία ενδέχεται να επηρεάσει την εξέλιξη και τα τελικά χαρακτηριστικά της φωτοαποδόμησης με Laser. Έχοντας ήδη μελετήσει όλες τις υπο-περιπτώσεις ακτινοβολίας λεπτών υμενίων από μολυβδαίνιο (Mo), μεταβάλλοντας κάθε στιγμή την τιμή της ροής ακτινοβολίας (πυκνότητας ενέργειας) του nanosecond παλμού, αξίζει εδώ να δώσουμε προσοχή στο τι θα συμβεί εάν διατηρήσουμε τη ροή της προσπίπτουσας ακτινοβολίας ίδια με αυτή της αρχικής μας περίπτωσης (στην οποία $F = 10 \text{ J/cm}^2$), όταν στη θέση του Mo τοποθετηθεί το Al ως υλικό-στόχος. Η επιλογή του Al για την παρούσα προσομοίωση δεν ήταν τυχαία καθώς, όπως έχουμε ήδη παρατηρήσει και στα πλαίσια του Κεφαλαίου 6, κατά τη διάρκεια της διεξαγωγής των πειραμάτων μας στο ΕΙΕ δεν υποβάλαμε μόνο υμένια από Mo σε ακτινοβολία (και εγχάραξη, scribing), αλλά κάναμε το ίδιο και με

το Al. Με αυτή τη θεωρητική ανάλυση δηλαδή επιδιώκουμε να συσχετίσουμε, στο μέτρο του δυνατού, την πειραματική και υπολογιστική υλοποίηση της διεργασίας (διαδικασίας) της φωτοαποδόμησης στο υπό μελέτη υλικό. Πρόκειται για ένα υλικό με δομή FCC και διατομική απόσταση 2.864 Angstrom .

Ο κυρίαρχος παράγοντας στον οποίο διαφέρει το Al από το Mo, και ο οποίος θα ληφθεί ως *μοναδικός* παράγοντας διαφοροποίησης των δύο υλικών, στα πλαίσια της υπολογιστικής υλοποίησης μέσω MD, είναι η *ανακλαστικότητα* καθενός από τα δύο υλικά. Έχουμε επανειλημμένα τονίσει στο προηγούμενο Κεφάλαιο ότι το Mo είναι ένα σαφώς πιο απορροφητικό υλικό από το Al, επιτρέποντας την απορρόφηση πολύ μεγαλύτερου ποσού ενέργειας φωτονίων από το υλικό. Το υπόλοιπο ποσό της ενέργειας, το οποίο δεν απορροφάται, ανακλάται. Η διαφορά στο συντελεστή απορρόφησης του Mo και του Al είναι πολύ σημαντική, με αποτέλεσμα να αναμένουμε να παρουσιαστούν σημαντικές διαφοροποιήσεις στα τελικά αποτελέσματα και συμπεράσματα μεταξύ των δύο υλικών. Εμείς θα χρησιμοποιήσουμε τις τιμές της ανακλαστικότητας που έχουμε παραθέσει στα δύο προηγούμενα Κεφάλαια (5 και 6), ώστε να τις χρησιμοποιήσουμε στη μοντελοποίηση. Για το Mo ο συντελεστής ανάκλασης θα είναι $R = 0.4286$ ενώ για το Al θα ισούται με $R = 0.92$. Αυτό δηλαδή σημαίνει ότι οι αντίστοιχοι συντελεστές απορρόφησης για τα δύο υλικά θα είναι 0.5724 και 0.08 .

Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε στον πηγαίο κώδικα MATLAB που χρησιμοποιήθηκε, και ο οποίος καταστρώθηκε στα πλαίσια μιας ενδελεχούς μελέτης που κάναμε ήδη στο Κεφάλαιο 5, διαπιστώνουμε ότι τόσο ο αριθμός των απορροφούμενων φωτονίων ανά βήμα, όσο και η απορροφούμενη ενέργεια, είναι μεταξύ άλλων *ανάλογες του συντελεστή απορρόφησης* του εκάστοτε υλικού (ο οποίος αντιπροσωπεύει τη μεταβλητή *asigma* στη σχέση " $NAP = asigma .* bsigma .* dsigma / EPhoton$ " που εκχωρήθηκε στη MATLAB, με NAP (Number of Absorbed Photons) να είναι ο αριθμός των απορροφημένων φωτονίων, που δίνει την απορροφούμενη ενέργεια εφόσον πολλαπλασιαστεί με την ενέργεια του φωτονίου).

Σημειώνεται ότι η αύξηση της κινητικής ενέργειας των ατόμων του στόχου, λόγω της μειωμένης απορροφούμενης ενέργειας από τα φωτόνια (η πλειονότητά τους ανακλώνται στην επιφάνεια του Al), θα είναι λιγότερο έντονη στο Al από ό,τι στο Mo, με αποτέλεσμα να αναμένουμε ότι η φωτοαποδόμηση θα λάβει χώρα σε ηπιότερο επίπεδο. Κάτι τέτοιο επιδιώκουμε να επιβεβαιώσουμε ή να διαψεύσουμε, προσδιορίζοντας, μέσω μαθηματικών υπολογισμών, την εξέλιξη του αριθμού φωτοαποδομούμενων σωματιδίων και της μέσης θερμοκρασίας του συστήματος, για $F = 10 \text{ J/cm}^2$ και υλικό Al.

Κάτι όμως που θα πρέπει να προσεχθεί, σε πολύ μεγάλο βαθμό, είναι το γεγονός ότι οι ενέργειες συνοχής του Mo και του Al διαφέρουν σημαντικά μεταξύ τους. Συγκεκριμένα, τα -6.82eV που ευρέθησαν για το Mo διαφέρουν σημαντικά από την αντίστοιχη τιμή της ενέργειας συνοχής για το Al, η οποία, με βάση τα λεγόμενα στη βιβλιογραφία [180], μπορεί να εκτιμηθεί ίση με -3.45 eV . Στην ανάλυσή

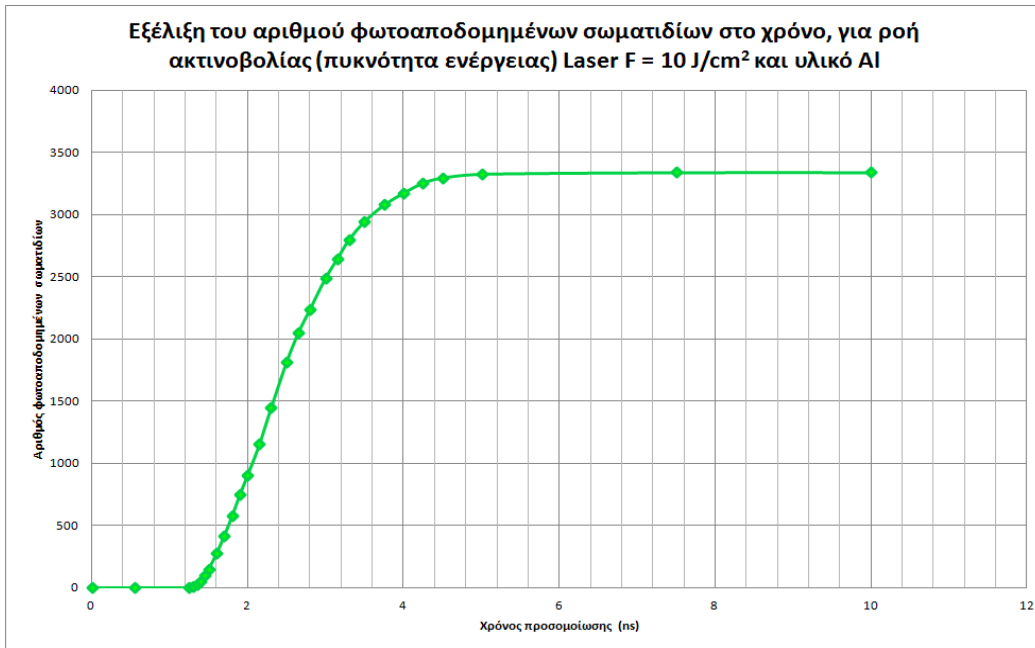
ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

μας, αλλά και την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων, θα πρέπει να ληφθεί υπόψη και το γεγονός ότι οι θερμοκρασίες τήξης και βρασμού του Al διαφέρουν από αυτές του Mo, όντας αντίστοιχα ίσες με 933.52 K και 2740.15 K.

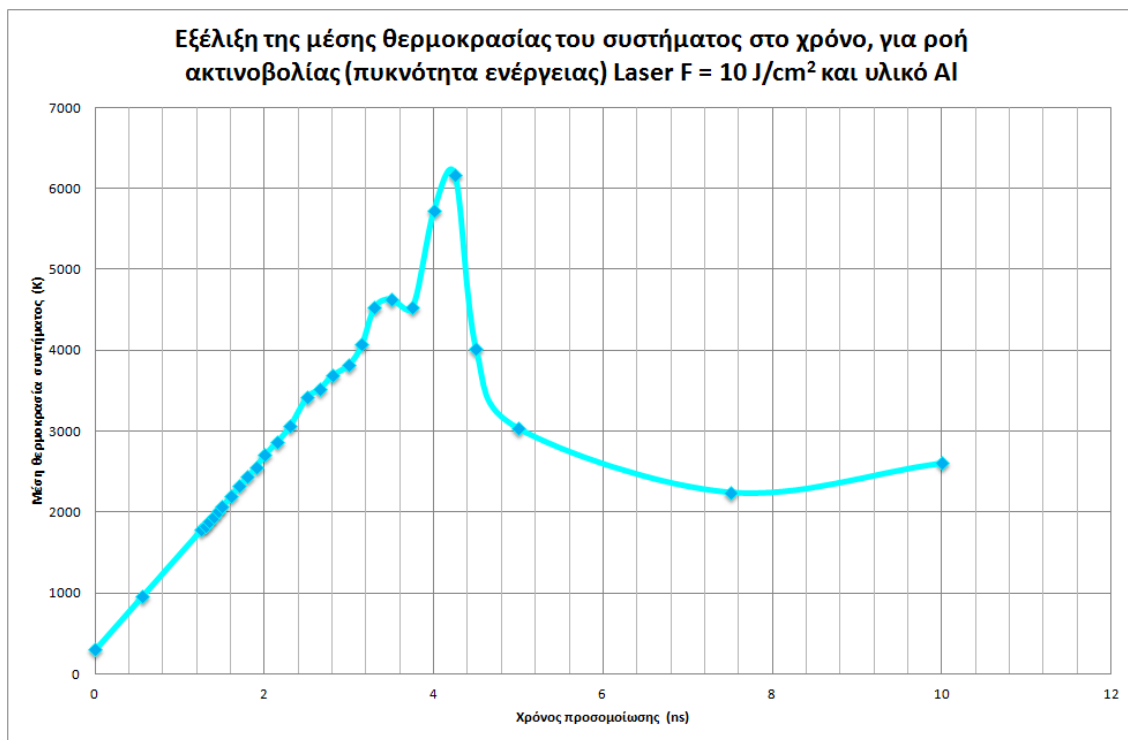
Ο Πίνακας που παρουσιάζει τα αποτελέσματα που μας ενδιαφέρουν είναι ο 7.9., ενώ τα Σχήματα 7.19. και 7.20. έχουν τη δυνατότητα να μας δώσουν μία πληρέστερη εικόνα για τις μεταβολές στα υπόψη μεγέθη όσο περνάει ο χρόνος.

A/A Μέτρησης	Χρονικό βήμα προσομοίωσης	Χρόνος προσομοίωσης (ns)	Ολικός αριθμός αποδομημένων σωματιδίων	Θερμοκρασία συστήματος (K)
0	0	0	0	300
1	11	0.55	0	953.36
2	25	1.25	2	1778.45
3	26	1.3	11	1833.66
4	27	1.35	27	1886.02
5	28	1.4	53	1946.4
6	29	1.45	95	2010.24
7	30	1.5	150	2069.31
8	32	1.6	275	2194.25
9	34	1.7	419	2322.21
10	36	1.8	575	2433.23
11	38	1.9	748	2558.77
12	40	2	906	2705.74
13	43	2.15	1151	2870.07
14	46	2.3	1444	3061.43
15	50	2.5	1814	3417.1
16	53	2.65	2049	3519.16
17	56	2.8	2240	3684.96
18	60	3	2491	3823.06
19	63	3.15	2645	4068.41
20	66	3.3	2799	4526.37
21	70	3.5	2946	4634.97
22	75	3.75	3078	4531.97
23	80	4	3174	5720.2
24	85	4.25	3255	6164.47
25	90	4.5	3296	4015.47
26	100	5	3326	3035.52
27	150	7.5	3339	2245.86
28	200	10	3339	2604.85

Πίνακας 7.9. Παράθεση βασικών χαρακτηριστικών / αποτελεσμάτων για επιλεγμένες χρονικές στιγμές προσομοίωσης, αναφορικά με τον αριθμό των ατόμων που αποδομούνται (σε σχέση με την αρχή της προσομοίωσης) αλλά και τη μέση θερμοκρασία που επιτυγχάνεται στο σύστημα. Το υλικό που χρησιμοποιήθηκε στην προσομοίωση είναι το Al, ενώ τα αποτελέσματα έχουν εξαχθεί για ροή ακτινοβολίας Laser $F = 10 \text{ J/cm}^2$. Με γαλάζια σκίαση έχει σημειωθεί η πρώτη γραμμή αποτελεσμάτων που αντιστοιχεί σε θερμοκρασία υψηλότερη του σημείου τήξης του Al, ενώ με πορτοκαλί η αντίστοιχη γραμμή που χαρακτηρίζεται από θερμοκρασία υψηλότερη από το σημείο βρασμού του υλικού.



Σχήμα 7.19. Σχηματική παράσταση της μεταβολής του αριθμού φωτοαποδομημένων σωματιδίων στο χρόνο για την περίπτωση προσομοίωσης που εξετάζουμε ($F = 10 \text{ J/cm}^2$, υλικό αλουμίνιο (Al)), λαμβάνοντας ταυτόχρονα υπόψη τα δεδομένα του Πίνακα 7.9.



Σχήμα 7.20. Εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας του συστήματος ατόμων στη μονάδα του χρόνου, για τη ροή ακτινοβολίας $F = 10 \text{ J/cm}^2$ και το υλικό Al που εξετάζουμε επί του παρόντος. Τα αριθμητικά αποτελέσματα λαμβάνονται από τον Πίνακα 7.9.

Το παράδοξο που ισχύει στην περίπτωση του Al είναι το γεγονός ότι απαιτείται χρονικό διάστημα μόλις 1.25 ns προκειμένου να αρχίσουν να αποδομούνται άτομα από τον κυρίως όγκο του υλικού, ενώ θα αναμέναμε το αντίθετο, λόγω της υψηλής ανακλαστικότητας του Al και, κατά συνέπεια, των χαμηλών ποσών ενέργειας που απορροφά. Ο παράγοντας που προκαλεί την έναρξη της φωτοαποδόμησης νωρίτερα από τη στιγμή που θα περιμέναμε (με βάση τα όσα μελετήθηκαν για το Mo) είναι η ελαττωμένη ενέργεια συνοχής του Al. Με άλλα λόγια, υπάρχει η δυνατότητα απομάκρυνση ατόμων από τον κρύσταλλο, ακόμα και αν η κινητική ενέργεια που έχουν αποκτήσει δεν είναι τόσο πολύ μεγάλη σε σχέση με αυτή που είναι αναγκαίο να αποκτηθεί από το Mo. Ο καθορισμός της ενέργειας συνοχής βοηθά επίσης τον κώδικα να καταλάβει ότι, εφόσον έχει ξεπεραστεί σε κάποιον εύλογο βαθμό το σημείο τήξης του Al, θα αρχίσουν τα σωματίδια να απομακρύνονται από τον όγκο προσομοίωσης, όντας πλέον πολύ ισχυρά ώστε να μείνουν ενωμένα.

Κατά τα άλλα, ο τρόπος με τον οποίο εξελίσσεται ο αριθμός των φωτοαποδομημένων σωματιδίων αλλά και η μέση θερμοκρασία του συστήματος ατόμων δε διαφέρει σημαντικά από ό,τι σε προηγούμενες περιπτώσεις. Πιο συγκεκριμένα, η αύξηση της θερμοκρασίας είναι γραμμική (με πολύ μικρές εξαιρέσεις) σε ένα σημαντικό τμήμα της προσομοίωσης (από την έναρξη μέχρι τη χρονική στιγμή 3.5 ns), ενώ στη συνέχεια υφίσταται μία δραστική αύξηση και φτάνει στη μέγιστη τιμή της (6164.47) όταν τα 3255 από τα 3375 άτομα έχουν αφαιρεθεί. Επίσης, τα όσα γράφτηκαν για τις μεταβολές του ρυθμού φωτοαποδόμησης των ατόμων, στις περιπτώσεις ακτινοβολίας με Laser ροής ακτινοβολίας 8 και 20 J/cm², παρατηρούμε ότι ισχύουν και εδώ, κάτι που μπορεί εύκολα να επιβεβαιωθεί δίνοντας ιδιαίτερη προσοχή στο Σχήμα 7.19.. Επίσης, μπορούμε να πούμε ότι ο πολύ χαμηλός αριθμός αφαίρεσης ατόμων, έπειτα από την επίτευξη της μέγιστης θερμοκρασίας συστήματος, συνδέεται άμεσα με την πολύ γρήγορη πτώση της θερμοκρασίας στην τοπικά ελάχιστη τιμή των 2245.86 K (για τη χρονική στιγμή 7.5 ns), η οποία βέβαια αυξάνεται λίγο καθώς τα εναπομείναντα σωματίδια του όγκου εξακολουθούν να θερμαίνονται λόγω του παλμού Laser, που δεν έχει σταματήσει να εκπέμπεται.

- **Εκτίμηση του βάθους φωτοαποδόμησης λεπτών υμενίων από Mo πάχους 280 nm, με βάση την ήδη διεξαχθείσα υπολογιστική υλοποίηση**

Η έννοια του *βάθους φωτοαποδόμησης* (ablation depth), όπως έχουμε ήδη αναφέρει, αφορά την απόσταση κατά τον άξονα των z στην οποία αφαιρείται υλικό λόγω της εφαρμογής της ακτινοβολίας και φωτοαποδόμησης με παλμούς Laser ενός δοκιμίου-στόχου. Διάφορες εμπειρικές σχέσεις έχουν καταστρωθεί προκειμένου για τον υπολογισμό του βάθους φωτοαποδόμησης. Παρ'όλα αυτά, στην

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

παρούσα μελέτη, γίνεται μία προσπάθεια να διερευνηθεί η ζητούμενη τιμή με βάση τον αριθμό στρώσεων υλικού, κατά τον άξονα των z , που παραμένουν στο υλικό έπειτα από την ολοκλήρωση της προσομοίωσης.

Αρχικά, στην ανάλυσή μας θα μας βοηθήσει ο ακόλουθος Πίνακας 7.10., στον οποίο εμφανίζεται ο αριθμός των ατόμων, στον αρχικώς ορισθέντα όγκο προσομοίωσης, που τελικώς αφαιρείται ως αποτέλεσμα της ακτινοβολήσής του με ένα nanosecond παλμό Laser διάρκειας 10 ns (FWHM) και διαφορετικής ροής ακτινοβολίας (πυκνότητας ενέργειας) κάθε φορά. Συγκεντρώσαμε δηλαδή όλα τα αποτελέσματα που έχουν ληφθεί παραπάνω, κατά τη διάρκεια διεξαγωγής της υπολογιστικής διαδικασίας.

Ροή ακτινοβολίας Laser (J/cm^2)	Ολικός αριθμός αποδομημένων σωματιδίων (κατά τους 3 άξονες x, y, z)
0.5	54
0.8	3093
1	3309
5	3355
8	3369
10	3369
20	3370

10 (υλικό Al)	3339
---------------	------

Πίνακας 7.10. Συγκεντρωτική παράθεση όλων των αριθμητικών τιμών για τον ολικό αριθμό αποδομημένων σωματιδίων κατά την προσομοίωση της ακτινοβολήσής με Laser, για διαφορετικές τιμές της ροής ακτινοβολίας F . Όπου δεν αναγράφεται το υλικό, εννοείται το μολυβδαίνιο (Mo).

Έχουμε τονίσει ότι η απόσταση μεταξύ των ακραίων ατόμων Mo στον αρχικό όγκο προσομοίωσης, κατά τον άξονα των z , ισούται με $14 \cdot 2.7252 = 38.1528 \text{ \AA}$. Αυτή είναι η απόσταση του κέντρου του 1^{ου} ατόμου από το αντίστοιχο κέντρο για το 15^ο άτομο κατά σειρά στον άξονα z , με όλα τα άτομα να βρίσκονται σε ίση απόσταση. Για τον παραπάνω λόγο, η απόσταση που μας ενδιαφέρει είναι αυτή του άνω άκρου του πρώτου κατά σειρά ατόμου με το κάτω άκρο για το τελευταίο. Αυτή θα ισούται με τη διατομική απόσταση για όλα τα ακραία άτομα, στην οποία θα προστεθούν δύο ατομικές ακτίνες (μία ατομική διάμετρος), με την ατομική ακτίνα για το Mo να ισούται με 1.18 \AA , όπως έχει ήδη βρεθεί. Άρα, η απόσταση του άνω άκρου του πρώτου ατόμου με το κάτω άκρο του τελευταίου, σύμφωνα με την προηγούμενη θεώρηση, θα ληφθεί ίση με $38.1528 + 2.36 = 40.5128 \text{ \AA}$. Αντίστοιχα θα εργαστούμε και

για άλλες υποπεριπτώσεις που μπορεί να συναντήσουμε έπειτα από την ολοκλήρωση της προσομοίωσης. Μία εξ αυτών είναι αυτή κατά την οποία υπάρχει κάποια περιοχή που περιλαμβάνει, κατά τον άξονα των z, μόνο μία στρώση από άτομα του υλικού που αλληλεπιδρά με τη δέσμη. Σε αυτή την περίπτωση, η έκταση της περιοχής που δεν έχει αποδομηθεί θα ισούται με τη διάμετρο του ατόμου, 2.36 Å. Επίσης, εάν αντί για μία στρώση, στην παραπάνω περίπτωση, εμφανίζονται τελικά δύο, τότε η απόσταση μεταξύ του άνω άκρου του πρώτου ατόμου και του κάτω άκρου του δεύτερου θα ισούται με τη διατομική απόστασή τους συν τη διάμετρο του ατόμου: $2.7252 + 2.36 = 5.0852$ Å. Τελικά, το βάθος φωτοαποδόμησης μπορεί να εκτιμηθεί ως η διαφορά της απόστασης των 40.5128 Å για την οποία έχει γίνει λόγος παραπάνω, με την απόσταση μεταξύ των δύο άκρων των ομάδων ατόμων (κατά τον άξονα των Z) που δεν έχουν απομακρυνθεί από τον ακτινοβολούμενο όγκο έπειτα από τη λήξη της προσομοίωσης. Για την περίπτωση του Al, η παραπάνω απόσταση (5.0852 Å για το Mo) θα ισούται με $2.864 + 1.0126 = 3.8766$ Å, ενώ η αντίστοιχη απόσταση των 40.5128 Å θα ισούται, για το Al, με $(14 * 2.864) + 1.0126 = 41.1086$ Å.

Από τη στιγμή που το βάθος φωτοαποδόμησης είναι εκφρασμένο σε μονάδες μήκους, μπορούμε εδώ, χωρίς βλάβη της γενικότητας, να αναγάγουμε το ευρεθέν μέγεθος (για τον αρχικά ορισμένο κυβικό όγκο των 15 x 15 x 15 ατόμων) σε ένα σαφώς μεγαλύτερο σύστημα ατόμων, τέτοιο ώστε το σχήμα του να εξακολουθεί να είναι κυβικό και η ακμή του να ορίζεται στα 280 nm, που είναι το πάχος του λεπτού υμενίου από Mo που χρησιμοποιήθηκε κατά τη διάρκεια διεξαγωγής της πειραματικής διαδικασίας στο Εργαστήριο του ΕΙΕ. Η αναγωγή θα γίνει με γνωστό το βάθος φωτοαποδόμησης στον όγκο προσομοίωσης και την απλή εύρεση, μέσω της μεθόδου των τριών, της χονδρικής τιμής που θα είχε το βάθος εάν το πάχος του όγκου ήταν ίσο με 280 nm. Τα αποτελέσματά μας θα είναι χρήσιμα και για την περίπτωση του Al, παρά το γεγονός ότι χρησιμοποιήσαμε ένα υμένιο πάχους 390 nm στα πειράματά μας. Όμως, υπάρχει η δυνατότητα να αποφανθούμε για το αν η φωτοαποδόμησή μας είναι πλήρης ή μερική, απλά εφαρμόζοντας τη μέθοδο των τριών, όπως και προηγουμένως, και αλλάζοντας την τιμή των 390 nm σε 380 προκειμένου για την επιθυμητή αναγωγή.

Ο Πίνακας 7.11. μας βοηθά να κατανοήσουμε καλύτερα τη μεθοδολογία που έχουμε ακολουθήσει, με σκοπό την εύρεση του βάθους φωτοαποδόμησης για κάθε μία από τις τιμές της ροής ακτινοβολίας που εξετάστηκαν. Τα βάθη αυτά προέκυψαν από οπτικές παρατηρήσεις πάνω στους όγκους προσομοίωσης που ακτινοβολήθηκαν σε κάθε διακριτή περίπτωση. Παρατηρούμε ότι η τιμή 0.5 J/cm^2 βρίσκεται πολύ κοντά στο κατώφλι φωτοαποδόμησης που έχουμε βρει, δικαιολογώντας έτσι πλήρως το γεγονός ότι έχουν απορροφηθεί πολύ λίγα άτομα μετά το πέρας των 10 ns (διάρκεια παλμού στην ανάλυσή μας). Πάντως, καθώς αυξάνεται η ροή σε μεγαλύτερες τιμές, παρατηρείται μία πάρα πολύ γρήγορη και έντονη αύξηση στον αριθμό των σωματιδίων που απομακρύνονται από το υλικό, άρα και στο βάθος φωτοαποδόμησης, το οποίο αντιστοιχεί σε πρακτικά ολόκληρο τον όγκο προσομοίωσης ήδη από τα 5

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

J/cm^2 . Το γεγονός ότι επιτυγχάνεται ίδιο βάθος φωτοαποδόμησης και για μεγαλύτερες ροές ακτινοβολίας, καταδεικνύει ότι η διεργασία γίνεται λιγότερο αποδοτική όταν αυξήσουμε τη ροή, με επακόλουθο να διαπιστώσουμε ότι δεν είναι απαραίτητη η εφαρμογή πολύ έντονης ακτινοβολίας ανά μονάδα επιφάνειας προκειμένου να επιτύχουμε τους επιθυμητούς σκοπούς μας.

Ροή ακτινοβολίας Laser (J/cm^2)	Ολικός αριθμός αποδομημένων σωματιδίων (κατά x,y,z)	Αριθμός ελάχιστων παρατηρούμενων στρώσεων κατά z, στη λήξη της προσομοίωσης	Εκτιμώμενη (ελάχιστη) παρατηρήσιμη απόσταση κατά z στη λήξη της προσομοίωσης (nm)	Εκτιμώμενο βάθος φωτοαποδόμησης (nm) (για υμένιο με $t = 280$ nm)
0.5	54	13	35.0624	37.66987224
0.8	3093	3	7.8104	226.0192334
1	3309	2	5.0852	244.8541695
5	3355	1	2.36	263.6891057
8	3369	0	0	280
10	3369	0	0	280
20	3370	0	0	280
10 (υλικό Al)	3339	2	3.8766	353.22244 (από 390)

Πίνακας 7.11. Εκτίμηση του βάθους φωτοαποδόμησης για διαφορετικές τιμές της ροής ακτινοβολίας που εξετάστηκαν στην προσομοίωση, έχοντας ακολουθήσει αναγωγή των τιμών σε πάχος υμενίου 280 nm (ίδιο με αυτό του Mo που χρησιμοποιήθηκε στην πειραματική διαδικασία). Για το Al το βάθος φωτοαποδόμησης εκτιμήθηκε συγκριτικά με τα 390 nm που αντικατοπτρίζουν το πάχος του υμενίου.

- **Εκτίμηση της θεωρητικής απόδοσης φωτοαποδόμησης για την υπό μελέτη κατεργασία**

Το μέγεθος της απόδοσης φωτοαποδόμησης έχει παρουσιαστεί και αναλυθεί συνοπτικά στο προηγούμενο Κεφάλαιο 6, και μπορεί να οριστεί είτε ως ο όγκος της φωτοαποδομημένης επιφάνειας προς την ενέργεια της ακτινοβολίας Laser, είτε ως το πάχος της φωτοαποδομημένης επιφάνειας προς τη ροή ακτινοβολίας Laser (ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας). Για την εύρεση της απόδοσης φωτοαποδόμησης θα χρησιμοποιηθεί η *δεύτερη* σχέση, επειδή επί του παρόντος κρίνεται πιο εύχρηστη. Ο υπολογισμός του μεγέθους έγινε σε $\mu m^3/mJ$, έτσι ώστε η μονάδα μέτρησης να συμφωνεί πλήρως με αυτή που χρησιμοποιήθηκε κατά τη διεξαγωγή των πειραμάτων στο Εργαστήριο. Για το λόγο αυτό,

ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΥΛΙΚΟΥ ΜΕ ΔΕΣΜΗ ΑΚΤΙΝΩΝ LASER: ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

εφαρμόστηκαν στα μεγέθη F και t , τα οποία αντιπροσωπεύουν αντίστοιχα τη ροή ακτινοβολίας Laser και το πάχος του υμενίου, οι ακόλουθες μετατροπές μεγεθών:

$$[F] = \frac{J}{cm^2} = 1000 \frac{mJ}{cm^2} = 10 \frac{mJ}{mm^2} = 10^{-5} \frac{mJ}{\mu m^2} \Rightarrow \frac{1}{[F]} = 10^5 \frac{\mu m^2}{mJ}$$

$$[t] = nm = 10^{-3} \mu m$$

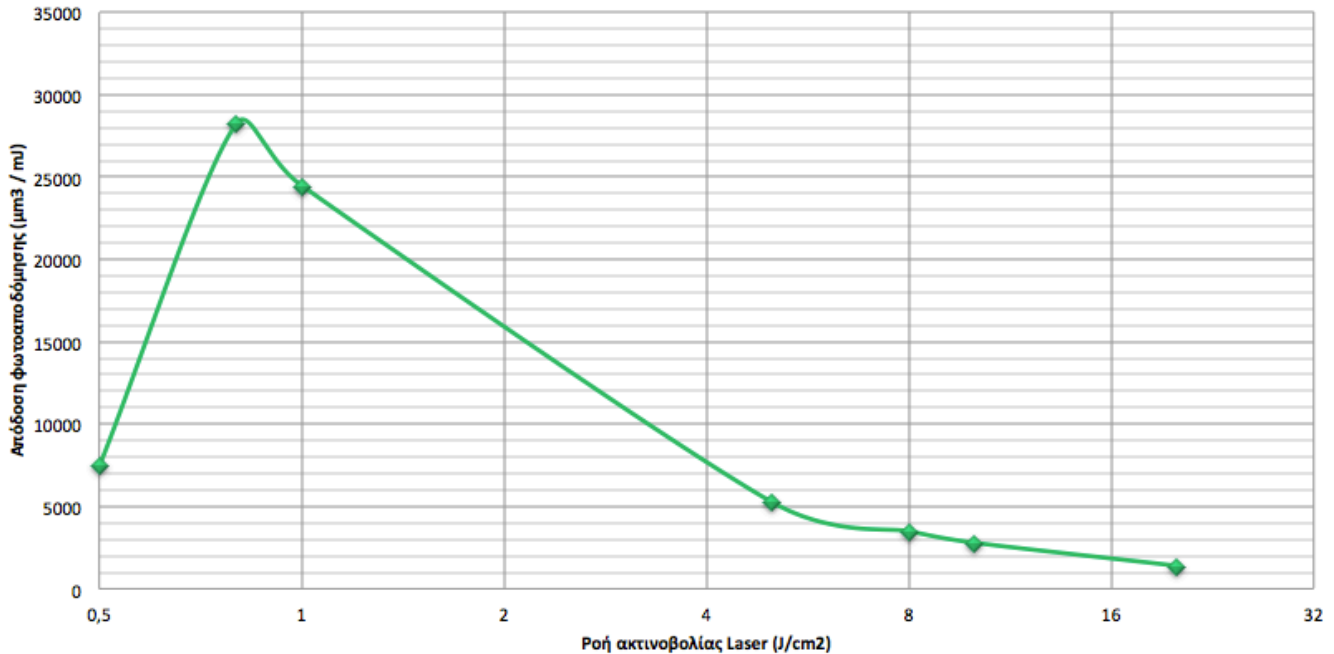
Με βάση τα παραπάνω, παραθέτουμε τόσο τον Πίνακα 7.12., στον οποίο συγκεντρώνονται όλα τα αποτελέσματα που αφορούν την απόδοση της φωτοαποδόμησης για ένα μεγάλο εύρος ροών ακτινοβολίας Laser, καθώς επίσης και το Σχήμα 7.21., το οποίο δείχνει τη μεταβολή του βαθμού φωτοαποδόμησης συναρτήσει της ροής ακτινοβολίας, δίνοντάς μας τη δυνατότητα να διαπιστώσουμε ποια είναι εκείνη η περιοχή τιμών που μπορεί να μας εξασφαλίσει βέλτιστο αποτέλεσμα στην κατεργασία. Οι ευρεθείσες τιμές για την απόδοση φωτοαποδόμησης θα μπορούσαν, τουλάχιστον για το υλικό Mo, να συγκριθούν με τα αποτελέσματα του Πίνακα 6.4. (στο προηγούμενο Κεφάλαιο 6), τα οποία περιορίζονται στην περιοχή ροών ακτινοβολίας 5-14 J, ώστε να διαπιστώσουμε εάν, και σε ποιο βαθμό, υπάρχει συμφωνία των θεωρητικών αποτελεσμάτων με τα πειραματικά.

Ροή ακτινοβολίας Laser (J/cm^2)	Εκτιμώμενο βάθος φωτοαποδόμησης (nm) (για υμένιο με $t = 280$ nm)	Απόδοση φωτοαποδόμησης ($\mu m^3/mJ$)
0.5	37.66987224	7533.974448
0.8	226.0192334	28252.40418
1	244.8541695	24485.41695
5	263.6891057	5273.782113
8	280	3500
10	280	2800
20	280	1400
10 (υλικό Al)	353.22244 (πάχος υμενίου 390nm)	3532.2244

Πίνακας 7.11. Μεταβολή της απόδοσης φωτοαποδόμησης συναρτήσει της ροής ακτινοβολίας Laser, για διάφορες εξεταζόμενες περιπτώσεις (πινακοποιημένη μορφή).

Chart Area

Μεταβολή της απόδοσης φωτοαποδόμησης συναρτήσει της ροής ακτινοβολίας (πυκνότητας ενέργειας) Laser για το Mo, για εύρος τιμών μεταξύ 0.5 και 20 J/cm²



Σχήμα 7.21. Μεταβολή της απόδοσης φωτοαποδόμησης στο Mo, συναρτήσει της ακτινοβολίας Laser, για διάφορες εξεταζόμενες περιπτώσεις (διαγραμματική μορφή).

Το κοινό στοιχείο που συνδέει τα πειραματικά αποτελέσματα με τα υπολογιστικά είναι το γεγονός ότι η απόδοση της διεργασίας πέφτει καθώς αυξάνεται η ροή ακτινοβολίας, ήδη ξεκινώντας από την τιμή της πυκνότητας ενέργειας 0.8 J/cm². Πριν από αυτή την τιμή, η αύξηση είναι πάρα πολύ έντονη, κάτι που δικαιολογείται από το γεγονός ότι, στην περιοχή μεταξύ 0.5 και 0.8 J/cm², η μικρή μεταβολή της ροής προς τα πάνω συνοδεύεται και από πολύ έντονη αύξηση στον αριθμό των σωματιδίων που τελικώς απομακρύνονται από τον όγκο προσομοίωσης (έχοντας καταφέρει να υπερνικήσουν την ενέργεια συνοχής). Όμως, καθώς η πυκνότητα ενέργειας αυξάνεται περαιτέρω, ο αριθμός των ατόμων που τελικώς αποδομούνται μετά το πέρας των 10 ns δεν αλλάζει σημαντικά, κάτι που οδηγεί σε ισχνή έως μηδενική μεταβολή του βάθους φωτοαποδόμησης. Εξαιτίας αυτού, η απόδοση φτάνει σε μία κατάσταση στην οποία το συγκεκριμένο μέγεθος είναι αντιστρόφως ανάλογο της ροής ακτινοβολίας Laser, με αποτέλεσμα η καμπύλη μεταβολής να προσομοιάζει ουσιαστικά σε μία *υπερβολή*, της μορφής $AE = \frac{C}{F}$, όπου AE (ablation efficiency) η απόδοση φωτοαποδόμησης, F (fluence) η ροή ακτινοβολίας και C (constant) πραγματική σταθερά. Βέβαια, η πτώση της απόδοσης μεταξύ του 1 και των 5 J/cm² εμφανίζεται γραμμική, λόγω του τρόπου που επεξεργάζεται το Microsoft Excel τα δεδομένα, αλλά η μεταβολή σε

αυτό το τμήμα ακολουθεί σίγουρα μία υπερβολή, λόγω της ανεπαίσθητης μεταβολής στον αριθμό φωτοαποδομημένων σωματιδίων μετά τη λήξη του παλμού.

Το γεγονός ότι η καμπύλη αναπαράστασης των αποτελεσμάτων έχει μορφή υπερβολής έρχεται σε πλήρη συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα του Κεφαλαίου 6 που αφορούν κυρίως το ακτινοβοληθέν λεπτό υμένιο από Mo (βλ. Πίνακα 6.4.) αλλά και αυτό που έχει ως υλικό το Al (Πίνακα 6.7.). Συγκρίνοντας τους Πίνακες 7.12. και 6.4. μεταξύ τους, παρατηρούμε επίσης ότι η πειραματική διερεύνηση της απόδοσης φωτοαποδόμησης δίνει παραπλήσια αριθμητικά αποτελέσματα σε σχέση με την αντίστοιχη θεωρητική. Για παράδειγμα, η απόδοση για ροή ακτινοβολίας 10 J/cm^2 (περίπου) ισούται με $2782.58 \text{ } \mu\text{m}^3/\text{mJ}$ για το πείραμα και με $2800 \text{ } \mu\text{m}^3/\text{mJ}$ για την προσομοίωση, μια διαφορά της τάξης του $\frac{2800 - 2782.58}{2782.58} \cdot 100\% = 0.626\%$ παραπάνω για την προσομοίωση. Αντίστοιχα, η προσομοίωση δίνει μία

τιμή απόδοσης γύρω στα $5300 \text{ } \mu\text{m}^3/\text{mJ}$ όταν η ροή ακτινοβολίας είναι περίπου ίση με 5.2 J/cm^2 , με την αντίστοιχη τιμή για το πείραμα να ορίζεται στα $5311.74 \text{ } \mu\text{m}^3/\text{mJ}$, διαφέροντας μόνο κατά $\frac{5311.74 - 5273.78}{5273.78} \cdot 100\% = 0.72\%$.

Πάντως, ακόμα και το γεγονός ότι κάθε ένα από τα λεπτά υμένια που ακτινοβολήθηκαν προέκυψαν από εναπόθεσή τους μέσω PLD πάνω σε γυάλινα υποστρώματα, οδηγώντας με αυτό τον τρόπο σε *ανομοιόμορφο πάχος υμενίου* (βλ. Κεφάλαιο 2), ενδέχεται να έπαιξε το ρόλο του και αυτό στις διαφοροποιήσεις των αριθμητικών τιμών που παρουσιάζονται σε πείραμα και προσομοίωση, σχετικά με την απόδοση της φωτοαποδόμησης. Τέλος, ενδέχεται στις διαφοροποιήσεις να παίζει ρόλο και το γεγονός ότι ο κώδικας που αναπτύχθηκε στη MATLAB σχετικά με τη φωτοαποδόμηση να μη λαμβάνει υπόψη το μέγεθος (τη διάμετρο) του διαφράγματος, το οποίο, όπως είδαμε και στο Κεφάλαιο 6, επηρέασε τα αποτελέσματα των υπολογισμών μας, όταν για το Mo ελαττώθηκε από τα $3 \text{ } \mu\text{m}$ στο 1.5 , οδηγώντας με αυτό τον τρόπο σε χαμηλότερες τιμές της ροής ακτινοβολίας Laser άρα και αποδοτικότερη κατεργασία.

Κλείνοντας με την ανάλυση του τρέχοντος Κεφαλαίου, και έχοντας παρουσιάσει τα χαρακτηριστικά της φωτοαποδόμησης για ένα μεγάλο εύρος πυκνοτήτων ενέργειας (ροών ακτινοβολίας), θα μπορούσαμε να θεωρήσουμε ότι διακρίνονται τρεις διαφορετικές περιοχές φωτοαποδόμησης στην παρούσα θεωρητική μελέτη μας, με κάθε μία από αυτές τις περιοχές να έχει διαφορετικά χαρακτηριστικά όσον αφορά την εξέλιξη του φαινομένου. Παρακάτω παρουσιάζονται συνοπτικά αυτές οι τρεις περιοχές φωτοαποδόμησης στις οποίες έχει λάβει χώρα η κατηγοριοποίηση, ενώ γίνεται και μία προσπάθεια προσδιορισμού των μηχανισμών που λαμβάνουν χώρα κατά την εξέλιξη του φαινομένου, με βάση και την αντίστοιχη θεωρία που έχει γραφτεί στα πλαίσια του Κεφαλαίου 2:

- **Περιοχή 1^η (Ροή Ακτινοβολίας Laser 0.5 – 0.8 J/cm²).** Η ελάχιστη τιμή της ροής ακτινοβολίας στην υπόψη περιοχή βρίσκεται λίγο πάνω από το κατώφλι φωτοαποδόμησης (threshold fluence), το οποίο έχει προσδιοριστεί ίσο με $0.4638 \frac{J}{cm^2}$. Για τις πυκνότητες ενέργειας που βρίσκονται κάτω από το κατώφλι, η θερμική επίδραση είναι ελάχιστη, με αποτέλεσμα να μην παρατηρείται φωτοαποδόμηση. Από τα 0.5 J/cm² και πάνω, αρχίζουν σταδιακά τόσο ο αριθμός φωτοαποδομούμενων σωματιδίων, όσο και το προκύπτον βάθος φωτοαποδόμησης, να αυξάνονται, με την αύξηση αυτή να είναι πολύ ταχεία μέχρι και το άνω άκρο της υπό μελέτη περιοχής (για $F = 0.8 \text{ J/cm}^2$). Η φωτοαποδόμηση είναι αρχικά ήπια, ενώ για τιμές πολύ κοντά στο άνω όριο της περιοχής αρχίζει και γίνεται ολοένα και πιο ισχυρή, μέχρι το σημείο κατά το οποίο έχει φωτοαποδομηθεί ένα ποσοστό μεγαλύτερο του 90% από όλα τα σωματίδια του ακτινοβολουμένου όγκου. Στις χαμηλότερες πυκνότητες ενέργειας της περιοχής, ο κύριος μηχανισμός αφαίρεσης υλικού είναι ο *φωτοθερμικός*, από τη στιγμή που η κινητική ενέργεια των φωτονίων μετατρέπεται σε θερμική, προσβάλλοντας τα άτομα του στόχου και οδηγώντας, κατά συνέπεια, σε τήξη και εξάτμιση τους. Όταν όμως η ροή ακτινοβολίας αυξηθεί σημαντικά, τότε αρχίζει να εμφανίζεται και ο μηχανισμός του εκρηκτικού βρασμού κατά τόπους (βλ. Κεφάλαιο 2), χαρακτηριστικό του οποίου εντός του υλικού είναι η εμφάνιση υπέρθερμου υγρού το οποίο χαρακτηρίζεται από έλλειψη ευστάθειας, οδηγώντας το σύστημα των ατόμων που χαρακτηρίζονται από αυτή τη φάση σε αυθόρμητη διάσπασή του σε αέρια και (σταθερή) υγρή φάση. Ο εκρηκτικός βρασμός είναι ένα φαινόμενο το οποίο μπορεί να παρατηρηθεί κυρίως στο άνω όριο της υπόψη περιοχής. Για όλους τους παραπάνω λόγους, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι στο πρώτο μισό της περιοχής λαμβάνει χώρα ήπια φωτοαποδόμηση, ενώ έπειτα λαμβάνει χώρα μεταπήδηση σε μία *μεταβατική* κατάσταση. Πάντως, κύριο χαρακτηριστικό της περιοχής αυτής είναι η ολοένα και αυξανόμενη απόδοση μέχρι να φτάσει τη μέγιστη τιμή της, για $F = 0.8 \text{ J/cm}^2$. Αυτή η μέγιστη τιμή της απόδοσης είναι ίση με $20428.75 \mu\text{m}^3 / \text{mJ}$.
- **Περιοχή 2^η (Ροή Ακτινοβολίας Laser 0.8 – 5 J/cm²).** Αυτή η περιοχή ροών ακτινοβολίας εξασφαλίζει την πραγματοποίηση *ισχυρής φωτοαποδόμησης*, στα πλαίσια της οποίας απομακρύνονται σχεδόν όλα τα άτομα του όγκου προσομοίωσης. Όμως, από τη στιγμή που δεν εμφανίζεται αξιόλογη αύξηση του αριθμού αυτού καθώς αυξάνεται η ροή, τότε η σχέση υπολογισμού της απόδοσης φωτοαποδόμησης (βάθος φωτοαποδόμησης / ροή ακτινοβολίας) μας δίνει ότι η μεταβολή της απόδοσης και της ροής ακτινοβολίας θα είναι *αντιστρόφως ανάλογη* στην υπόψη περιοχή. Τούτέστιν, η απόδοση φωτοαποδόμησης θα αρχίσει να πέφτει. Πάντως, τουλάχιστον κατά τα πρώτα στάδια αύξησης της ροής ακτινοβολίας στην υπό μελέτη περιοχή, η απόδοση της κατεργασίας θα εξακολουθεί να είναι υψηλή, φτάνοντας μέχρι και την τιμή $3862.8 \mu\text{m}^3 / \text{mJ}$ για πυκνότητα ενέργειας 5 J/cm^2 . Σε αυτή την περιοχή, τόσο ο φωτοθερμικός μηχανισμός όσο και ο εκρηκτικός βρασμός απαντώνται, με το δεύτερο να εμφανίζεται σε όλο και μεγαλύτερη έκταση καθώς η ροή αυξάνει. Ορισμένα άτομα ενδέχεται, κυρίως για ροές ακτινοβολίας κοντά στο άνω όριο της περιοχής, να περιέρχονται σταδιακά σε κατάσταση ιονισμού, δημιουργώντας με αυτό τον τρόπο μία εκτεταμένη στήλη πλάσματος (plasma plume) πάνω από το στόχο, η οποία συμβάλλει στην εξασθένηση της έντασης της προσπίπτουσας δέσμης Laser όταν έρθει σε επαφή

με το πλάσμα (plasma shielding). Από τα παραπάνω μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι και η εμφάνιση του πλάσματος παίζει σημαντικό ρόλο στην ελάττωση της απόδοσης καθώς η ροή αυξάνεται.

- **Περιοχή 3^η (Ροή Ακτινοβολίας Laser 5 – 20 J/cm²).** Και σε αυτή την περιοχή αποβάλλονται σχεδόν όλα τα άτομα του όγκου προσομοίωσης, με αποτέλεσμα η φωτοαποδόμηση να κρίνεται και εδώ ισχυρή. Όμως, το γεγονός ότι έχουμε αυξήσει τη ροή σε πάρα πολύ σημαντικό βαθμό οδηγεί σε πολύ χαμηλές και διαρκώς μειούμενες τιμές για την απόδοση φωτοαποδόμησης, κάτι που εντέλει καθιστά τη διεργασία *μη αποδοτική*, με αποτέλεσμα να μη συνιστώνται τόσο υψηλές τιμές πυκνότητας ενέργειας για την πραγματοποίησή της. Τα όσα ισχύουν για τον εκρηκτικό βρασμό και το σχηματισμό στήλης πλάσματος θα μπορούσαν να παρατηρηθούν και σε αυτή την περιοχή, σε μεγαλύτερη έκταση από ό,τι στην προηγούμενη.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8

8. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΠΕΡΑΙΤΕΡΩ ΜΕΛΕΤΗ

8.1. Παράθεση εξαχθέντων συμπερασμάτων

Σκοπός του παρόντος Κεφαλαίου είναι η παρουσίαση των σημαντικότερων συμπερασμάτων που μπορούν να εξαχθούν από την πειραματική και υπολογιστική υλοποίηση του φαινομένου της φωτοαποδόμησης, καθώς επίσης και η παράθεση ορισμένων προτάσεων για την περαιτέρω διερεύνησή του, τόσο μέσω διεξαγωγής πρόσθετων πειραμάτων όσο και μέσω βελτιστοποίησης των χαρακτηριστικών της θεωρητικής μελέτης και του υπολογιστικού προγραμματισμού.

Στα πλαίσια της Εργασίας επιδιώξαμε να αναπτύξουμε μία εμπειριστατωμένη και αξιόπιστη μεθοδολογία προσδιορισμού της εξέλιξης της φωτοαποδόμησης, του αριθμού των απομακρυνόμενων σωματιδίων και της θερμοκρασίας του συστήματος που περιλαμβάνει τα άτομα της υπό ακτινοβολήσης περιοχής του υλικού. Στη συνέχεια, η μεθοδολογία αυτή προσαρμόζεται στο υπολογιστικό περιβάλλον προγραμματισμού MATLAB, κατά τέτοιον τρόπο ώστε να μπορεί να διεξαγάγει τις επιθυμητές Μοριακές Δυναμικές προσομοιώσεις για βραχείς παλμούς τάξης μερικών nanoseconds. Τέλος, τα αποτελέσματα που ελήφθησαν τόσο από τον κώδικα όσο και από την πειραματική διαδικασία, χρησιμοποιήθηκαν προκειμένου να γίνει προσδιορισμός και κατηγοριοποίηση των μηχανισμών φωτοαποδόμησης, για τις διαφορετικές τιμές της ροής ακτινοβολίας Laser που έχουν εξεταστεί. Κάθε μία από τις διαφορετικές περιπτώσεις φωτοαποδόμησης εξετάστηκαν ξεχωριστά η μία από την άλλη, λαμβάνοντας υπόψη τον υψηλό βαθμό πολυπλοκότητας που χαρακτηρίζει τα αναπτυχθέντα σε MATLAB υπολογιστικά μοντέλα. Είναι πάντως σημαντικό να αναφερθεί ότι η παράθεση αποτελεσμάτων σχετικά τόσο με το βάθος φωτοαποδόμησης όσο και με την κατανομή της θερμοκρασίας των ατόμων στο υλικό (κυρίως κατά το βάθος τους / τη διάσταση Z), μπορεί να βοηθήσει στην καλύτερη ερμηνεία των μηχανισμών της φωτοαποδόμησης.

Έχοντας δώσει πολύ σημαντικό βάρος τόσο στην πειραματική όσο και στην υπολογιστική μελέτη μας, με τη μέγιστη δυνατή λεπτομέρεια που έχει καταστεί εφικτό να διεξαχθεί κατά την εκπόνηση της Εργασίας, μπορούμε να καταλήξουμε σε μία σειρά από ιδιαίτερα σημαντικά αποτελέσματα και συμπεράσματα. Τα κυριότερα εξ αυτών είναι τα εξής:

- Ο μηχανισμός φωτοαποδόμησης, το βάθος αυτής μέσα σε ένα υλικό και η εξέλιξη της θερμοκρασίας τόσο στο σύστημα των ατόμων όσο και από θέση σε θέση μέσα στο ίδιο το σύστημα, είναι στοιχεία που παρουσιάζουν εξάρτηση κατά κύριο λόγο από την πυκνότητα ενέργειας (ροή ακτινοβολίας, σε J/cm^2) του nanosecond παλμού Laser που επιδρά πάνω στο υλικό. Η εξαγωγή αυτού του συμπεράσματος έγινε εξετάζοντας τη διαδικασία φωτοαποδόμησης κυρίως του μολυβδαινίου (Mo), ενώ ορισμένα σχετικά αποτελέσματα παρατέθηκαν και για το αλουμίνιο (Al), του οποίου ο μεταλλικός χαρακτήρας δεν είναι τόσο ισχυρός όσο αυτός του Mo (το Al έχει ιδιότητες που το τοποθετούν μεταξύ ενός μετάλλου και ενός ημιαγωγού). Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα που ελήφθησαν από την ακτινοβολήση Mo και Al, διαπιστώσαμε ότι και η μεγάλη διαφορά στην ανακλαστικότητα των δύο υλικών μπορεί να οδηγήσει σε ιδιαίτερα σημαντικές διαφοροποιήσεις τόσο στην εξέλιξη της φωτοαποδόμησης όσο και στο βάθος στο οποίο μπορεί αυτή να φτάσει.
- Εξετάσαμε, στα πλαίσια της τρέχουσας ανάλυσής μας, ένα ιδιαίτερα μεγάλο εύρος ροών ακτινοβολίας Laser, με χαμηλότερη τα $0.5 J/cm^2$ και υψηλότερη τα $20 J/cm^2$. Εντοπίσαμε τρεις διακριτές περιοχές φωτοαποδόμησης. Η τιμή της φωτοαποδόμησης που σηματοδοτεί την είσοδο στη δεύτερη περιοχή

είναι το 0.8 J/cm^2 , ενώ η τελευταία από τις τρεις περιοχές για τις οποίες γίνεται λόγος παρατηρείται όταν η ροή της ακτινοβολίας ξεπεράσει τα 5 J/cm^2 .

- Κάτω από την τιμή 0.5 J/cm^2 , η φωτοαποδόμηση που παρατηρείται είναι από ελάχιστη ως μηδενική, λόγω πολύ χαμηλής θερμικής επίδρασης. Αυτό σημαίνει ότι το κατώφλι της φωτοαποδόμησης έχει μία τιμή λίγο χαμηλότερη από αυτή που έχει αναφερθεί. Ο προσδιορισμός του κατωφλίου σχετίζεται σε κάποιο βαθμό με το ρυθμό θέρμανσης του υλικού από την ακτινοβολία Laser, ο οποίος έχει προσδιοριστεί ότι είναι γραμμικός πριν αρχίσουν να αφαιρούνται σωματίδια από το υλικό, και ανάλογος της ροής ακτινοβολίας για την ίδια χρονική περιοχή. Το κατώφλι φωτοαποδόμησης, για το οποίο μόλις που αρχίζουν να αφαιρούνται άτομα υλικού-στόχου, έχει υπολογιστεί ίσο με $0.4638 \frac{\text{J}}{\text{cm}^2}$, για το μολυβδαίνιο (Mo) που είναι το υλικό που χρησιμοποιήθηκε κατά κύριο λόγο στην πειραματική διαδικασία και τις προσομοιώσεις (αν και λίγες από τις αναλύσεις μας ασχολήθηκαν και με το αλουμίνιο, Al).
- Αναφέρουμε χαρακτηριστικά ότι, όσο ο όγκος του στόχου ακτινοβολείται από την προσπίπτουσα παλμική δέσμη Laser, η κινητική ενέργεια που έχουν τα άτομα λόγω των αρχικών ταχυτήτων τους αυξάνεται λόγω της αλληλεπίδρασής τους με τα φωτόνια (των οποίων η κινητική ενέργεια μετατρέπεται σε θερμική), οδηγώντας στην τήξη και τη συνακόλουθη εξάτμιση τμημάτων της ακτινοβολούμενης επιφάνειας. Τα παραπάνω συνδέονται με απομάκρυνση ατόμων από την επιφάνεια του στόχου για τιμές που υπερβαίνουν το κατώφλι.
- Η αύξηση της ροής ακτινοβολίας από τα 0.5 στα 0.8 J/cm^2 ωθεί την ποσότητα της απόδοσης φωτοαποδόμησης προς τα πάνω, με πολύ έντονο ρυθμό, με δεδομένο το γεγονός ότι ο αριθμός των φωτοαποδομηθέντων σωματιδίων μετά το πέρας της ακτινοβολήσης αυξάνει με εντονότερο ρυθμό από ό,τι η ροή ακτινοβολίας αυτή καθαυτή. Γι' αυτό το λόγο και η περιοχή αυτή σχετίζεται με τη μετάβαση από την ήπια στην ισχυρή φωτοαποδόμηση, με ολοένα και αυξανόμενη απόδοση κατεργασίας. Σε αυτή την περιοχή, η αύξηση του αριθμού των φωτοαποδομημένων σωματιδίων, αλλά και του βάθους φωτοαποδόμησης, είναι γραμμική. Όσον αφορά τη μεταβολή της μέγιστης παρατηρούμενης θερμοκρασίας στο σύστημα, αυξάνεται και αυτή με τη ροή. Λαμβάνει μία τιμή λίγο πάνω από τους 5600 K για το άνω άκρο της περιοχής ($F = 0.8 \text{ cm}^2$).
- Η μέγιστη απόδοση φωτοαποδόμησης ισούται, για ροή ακτινοβολίας 0.8 J/cm^2 , με λίγο παραπάνω από $20000 \mu\text{m}^3 / \text{mJ}$. Έκτοτε, αρχίζει και μειώνεται με τρόπο σχεδόν αντιστρόφως ανάλογο της ροής ακτινοβολίας, μέχρι να φτάσει την τιμή $3862.8 \mu\text{m}^3 / \text{mJ}$ για ροή ακτινοβολίας 0.5 J/cm^2 , ένα αποτέλεσμα που είναι αρκετά μικρότερο από το αντίστοιχο πειραματικό για παραπλήσια ροή (διαφορά περίπου $1500 \mu\text{m}^3 / \text{mJ}$), λόγω μιας σειράς από παραγόντων όπως διαφορές στην ομογένεια και

ισοτροπία των υλικών που εξετάστηκαν στο πείραμα και στην προσομοίωση, ή ακόμα και διαφόρων απλοποιήσεων στον κώδικα MATLAB, με κυριότερες αυτές που αφορούν την επέκταση των συνοριακών συνθηκών στις τρεις διαστάσεις του χώρου. Η περιοχή ροών ακτινοβολίας μεταξύ 0.8 και 5 J/cm² χαρακτηρίζεται από μία ιδιαίτερα υψηλή ποιότητα και αποτελεσματικότητα της κατεργασίας, ενώ κατά τη διάρκειά της πρακτικά όλος ο όγκος προσομοίωσης (άρα και το βάθος του, το οποίο μας ενδιαφέρει), αποδομείται πλήρως. Για τους παραπάνω δύο λόγους, η περιοχή αυτή χαρακτηρίζεται ως *ισχυρής φωτοαποδόμησης και υψηλής απόδοσης*. Βέβαια, το γεγονός ότι δεν αυξάνεται ιδιαίτερα ο αριθμός των φωτοαποδομημένων σωματιδίων, καθώς η ροή αρχίζει και γίνεται ολοένα και μεγαλύτερη από τα 0.8 cm², οδηγεί στη διαπίστωση ότι μία ροή κοντά σε αυτή την τιμή μπορεί να βελτιστοποιήσει τη φωτοαποδόμηση. Παρατηρούμε, τέλος, ότι η αντιστρόφως ανάλογη μεταβολή απόδοσης φωτοαποδόμησης και ροής ακτινοβολίας οφείλεται και αυτή στο γεγονός ότι ο αριθμός των φωτοαποδομημένων σωματιδίων διατηρείται πρακτικά σταθερός. Η μέγιστη παρατηρούμενη θερμοκρασία στο σύστημα των ατόμων του όγκου προσομοίωσης εξακολουθεί να αυξάνεται με γρήγορους ρυθμούς, όχι όμως ανάλογα με τη ροή ακτινοβολίας (κάτι που ισχύει για όλο το φάσμα των εξεταζόμενων τιμών του F). Για F = 5 J/cm² η υπόψη θερμοκρασία φτάνει στην ιδιαίτερα υψηλή τιμή των 12300 K περίπου.

- Από τα 5 έως και τα 20 J/cm², αναφορικά με την τιμή της ροής ακτινοβολίας, η απόδοση συνεχίζει να πέφτει αλλά έχει γίνει πλέον πολύ μικρή ώστε η αποδόμηση του υλικού να κριθεί αποδοτική. Αυτό ισχύει για το μολυβδαίνιο (Mo) αλλά ακόμα περισσότερο για το αλουμίνιο (Al), το οποίο, όταν ακτινοβοληθεί με παλμούς Laser τόσο υψηλής ενέργειας ανά μονάδα επιφάνειας, οδηγεί σε μερική ακτινοβόληση και ελλιπή φωτοαποδόμηση, με δεδομένη και την υψηλή ανακλαστικότητα του συγκεκριμένου υλικού (συντελεστής ανάκλασης 42.86% για το Mo και 92% για το Al, ή συντελεστής απορρόφησης 57.14% για το Mo και 8% για το Al). Η αύξηση της ροής ακτινοβολίας σε τόσο υψηλό επίπεδο προκαλεί έντονο ιονισμό των ατόμων, τα οποία έχουν προηγουμένως εκτιναχθεί από το υλικό-στόχο λόγω του μηχανισμού του εκρηκτικού βρασμού (explosive boiling) που λαμβάνει χώρα κατά κόρον. Όσο εντονότερος είναι ο ιονισμός των ατόμων, τόσο πιο εκτεταμένη είναι η *στήλη πλάσματος* (plasma plume) που σχηματίζεται. Οι κυρίαρχοι μηχανισμοί φωτοαποδόμησης στο συγκεκριμένο χωρίο είναι ο *φωτομηχανικός μηχανισμός* και ο *εκρηκτικός βρασμός*, με το δεύτερο να αρχίζει σταδιακά να υπερισχύει ολοένα και περισσότερο καθώς αυξάνεται η ροή ακτινοβολίας. Η μέγιστη παρατηρούμενη θερμοκρασία αυξάνεται ολοένα και περισσότερο και εδώ, φτάνοντας μέχρι τους 22850 K περίπου, για F = 20 J/cm².
- Οι ροές ακτινοβολίας που εξετάστηκαν στην πειραματική διαδικασία είναι ιδιαίτερα υψηλές, και κυμαίνονται στην περιοχή 9-14 J/cm² για το Mo και 12-20 J/cm² για το Al. Λαμβάνοντας υπόψη τους

διαφορετικούς συντελεστές απορρόφησης των δύο υλικών (57.14% για το Mo και 8% για το Al), διαπιστώνουμε ότι το λεπτό υμένιο από Mo πάχους 280 nm που χρησιμοποιήθηκε στα πειράματα φωτοαποδομείται πλήρως και σε μεγάλη έκταση κατά το βάθος, ενώ με το Al κάτι τέτοιο ισχύει μόνο για χαμηλότερες τιμές της ροής ακτινοβολίας (μεγαλύτερες τιμές της ενέργειας Laser), καθώς όσο αυξάνεται η ροή ακτινοβολίας τόσο λιγότερο αποδοτική γίνεται η διεργασία, με αποτέλεσμα τη μερική φωτοαποδόμηση κατά το βάθος.

- Η βελτίωση της ποιότητας της επιφάνειας της κατεργασίας εγχάραξης (scribing) με χρήση παλμών Laser, επιτυγχάνεται με ελάττωση της ροής ακτινοβολίας. Με αυτό τον τρόπο, η φωτοαποδόμηση λαμβάνει χώρα με περισσότερο ομοιόμορφο τρόπο, οδηγώντας σε σχετικά λείες επιφάνειες που παρουσιάζουν ένα σχετικά ομοιογενές σχήμα σε όλη τους την έκταση. Συμπερασματικά, η ελάττωση της ροής ακτινοβολίας οδηγεί εν γένει σε βελτίωση της ποιότητας επιφάνειας του στόχου.
- Τα τελικώς φωτοαποδομημένα δοκίμια, όπως προέκυψαν από την ολοκλήρωση της πειραματικής διαδικασίας, εμφανίζουν ορισμένες απολήξεις, μερικές φορές σε μορφή «αυτιού», αριστερά και δεξιά από την κύρια επιφάνεια που σχηματίστηκε ως αποτέλεσμα της ακτινοβολίας. Οι απολήξεις αυτές είναι εντονότερες όσο αυξάνεται η ροή ακτινοβολίας, μία διαπίστωση που συνδέεται άμεσα με την προηγούμενη, σχετικά με τη βελτίωση της ποιότητας επιφάνειας όταν η πυκνότητα ενέργειας του Laser μειώνεται. Ένας λόγος για τον οποίο εμφανίζονται οι απολήξεις είναι η ατελής ευθυγράμμιση και / ή παραμόρφωση της δέσμης Laser που προσπίπτει τελικά στο υλικό, έπειτα από την εκπομπή της από τη συσκευή Nd:YAG Laser και τη διέλευσή της διαμέσου της πειραματικής διάταξης. Ο παράγοντας αυτός, σε συνδυασμό με το Gaussian προφίλ της δέσμης (άρα και των ακτίνων) του Laser κατά το επίπεδο XY, οδηγεί στη διαπίστωση ότι ο συσχετισμός μεταξύ κατευθύνσεων και τελικών θέσεων (πάνω στο στόχο) καθεμιάς από τις ακτίνες Laser δεν υφίσταται επακριβώς, αλλά καταρρίπτεται λόγω της παραμόρφωσης της δέσμης. Εάν δεν υπήρχε, τότε ιδανικά η ένταση της κάθε δέσμης θα ελαττωνόταν όσο απομακρυνόμαστε, κατά τις διαστάσεις X και Y, από το σημείο εφαρμογής της δέσμης. Η παραμόρφωση της δέσμης είναι επίσης υπεύθυνη για την πιθανή εμφάνιση «καψίματος» σε σημεία πολύ κοντά στο σημείο εφαρμογής της δέσμης (λόγω της πολύ υψηλής έντασης της ακτινοβολίας που τελικά προσπίπτει). Τέλος, σημειώνεται ότι η ελάττωση της διαμέτρου του διαφράγματος, στην πειραματική διάταξη εκπομπής και κατεύθυνσης του Laser προς το στόχο, οδηγεί σε μεγαλύτερη συγκέντρωση της δέσμης Laser γύρω από το σημείο εφαρμογής της, συμβάλλοντας με αυτό τον τρόπο στην αυξημένη ομοιομορφία, στην ελάττωση της έκτασης των δημιουργούμενων θερμικά επηρεασμένων ζωνών (HAZ) και, γενικότερα, στη βελτιστοποίηση της κατεργασίας από πλευράς ποιότητας.

- Το υλικό του στόχου παίζει εξέχοντα ρόλο στους συσχετισμούς εκτάσεων μεταξύ της κυρίως ακτινοβολημένης / φωτοαποδομημένης περιοχής και της θερμικά επηρεασμένης ζώνης (Heat-Affected Zone, HAZ). Είναι εμφανές ότι η ακτινοβόληση του υλικού με χρήση Laser προκαλεί θέρμανση των ατόμων του υλικού και αύξηση της ενέργειάς τους λόγω ολοένα και αυξανόμενης απορρόφησης φωτονίων. Αυτή όμως η απορρόφηση φωτονίων είναι σαφώς λιγότερο έντονη στο Al από ό,τι στο Mo, επειδή το Al είναι ένα πολύ πιο ανακλαστικό υλικό από το Mo. Μάλιστα, το γεγονός ότι το Al είναι ιδιαίτερα ανακλαστικό οδηγεί στην εκ νέου πρόσπτωση ορισμένων από τις ακτίνες Laser σε σημεία αρκετά απομακρυσμένα από την κυρίως ακτινοβολημένη περιοχή, αυξάνοντας ακόμα περισσότερο την ήδη διογκωμένη HAZ. Η HAZ έχει, στο Al, μεγαλύτερη έκταση από την κυρίως ακτινοβολημένη περιοχή, επειδή η θερμοκρασιακή ανύψωση που λαμβάνει χώρα σε πολλά σημεία του υλικού δεν είναι αρκετή ώστε να οδηγήσει σε τήξη, εξάτμιση και απομάκρυνση υλικού ένα μεγάλο αριθμό ατόμων. Αυτό έρχεται σε αντίθεση με την περίπτωση του Mo, όπου η υψηλή απορρόφηση φωτονίων από το υλικό οδηγεί γενικά σε αρκετά εκτεταμένες φωτοαποδομημένες περιοχές, μεγαλύτερες των HAZ εκτός της περίπτωσης κατά την οποία τόσο η ενέργεια της προσπίπτουσας ακτινοβολίας, όσο και το η διάμετρος του διαφράγματος από το οποίο διέρχεται η δέσμη, είναι μεγέθη περιορισμένα.
- Ο χρόνος προσομοίωσης μπορεί να ρυθμιστεί μεταβάλλοντας τον αριθμό των ατόμων που απαρτίζουν το μοντέλο. Είναι σημαντικό να επιλεγεί ένας αριθμός ατόμων, σε κάθε μία από τις τρεις διαστάσεις του όγκου προσομοίωσης, ώστε και η διεργασία να αναπαρασταθεί με τη μέγιστη δυνατή αξιοπιστία, αλλά και να μην αυξάνεται σε πολύ μεγάλο βαθμό το υπολογιστικό κόστος και ο χρόνος εκτέλεσης του κώδικα, καθυστερώντας σημαντικά την εξαγωγή των αποτελεσμάτων, που ενδεχομένως να μη χαρακτηρίζονται από αυξημένη ακρίβεια σε σχέση με αυτά που θα μπορούσαν να προκύψουν σε συστήματα μικρότερου όγκου.

8.2. Προτάσεις για περαιτέρω μελέτη και βελτίωση της διερεύνησης σημαντικών πτυχών του φαινομένου

Προκειμένου να βελτιώσουμε, στο μέτρο του δυνατού, τη θεωρητική και πειραματική διερεύνηση της διαδικασίας φωτοαπόδομησης μεταλλικών υλικών με παλμούς Laser, αξίζει, σε μελλοντικές έρευνες και μελέτες, να δώσουμε έμφαση σε μία σειρά από ζητήματα άκρως ενδιαφέροντα, τα οποία και σκοπεύουμε να μας οδηγήσουν στην εξαγωγή πληρέστερων αποτελεσμάτων, όσο πιο κοντά γίνεται σε αυτά που ανταποκρίνονται στην πραγματικότητα. Σκοπός της επέκτασης της τρέχουσας ανάλυσής μας είναι η δημιουργία μίας μεθοδολογίας ευρέος φάσματος, σύμφωνα με την οποία θα καταστεί εφικτός ο προσδιορισμός μίας σειράς από παραμέτρους και αποτελέσματα που σχετίζονται με τη φωτοαπόδομηση

μεταλλικών υλικών κάθε είδους, για διαφορετικές χρονικές διάρκειες παλμών και ροές ακτινοβολίας Laser.

Οι προτεινόμενοι τρόποι με τους οποίους θα μπορούσε να βελτιωθεί και να επεκταθεί αποτελεσματικά η τρέχουσα μελέτη μας, είναι οι εξής:

- Επέκταση της μεθοδολογίας για τη θεωρητική μελέτη του φαινομένου της φωτοαποδόμησης σε ένα ευρύ φάσμα μεταλλικών υλικών. Κάτι τέτοιο θα ασκήσει σημαντική συμβολή στην καλύτερη κατανόηση του φαινομένου, αλλά μπορεί επίσης να οδηγήσει και στη δημιουργία μίας ισχυρής βάσης δεδομένων, στην οποία μπορεί οποιοσδήποτε ερευνητής και αναγνώστης να ανατρέξει μελλοντικά, με σκοπό να προβλέψει τις τιμές σημαντικών παραμέτρων (π.χ. εξέλιξη θερμοκρασίας στο χρόνο, βάθος φωτοαποδόμησης ανά πάχος δοκιμίου) για διάφορα μεταλλικά υλικά, όταν θα έχουν ακτινοβοληθεί με βραχείς παλμούς Laser, διάρκειας κυρίως μερικών nanoseconds αλλά και picoseconds.
- Συνδυαστική χρήση Μοριακής Δυναμικής (MD) ανάλυσης και διθερμοκρασιακού μοντέλου (TTM), με σκοπό την καλύτερη και πληρέστερη διερεύνηση των μεταβολών της θερμοκρασίας εντός του υλικού λόγω της ακτινοβολήσής του με το Laser. Η δυνατότητα προσδιορισμού θερμοκρασιών τόσο για τα ελεύθερα ηλεκτρόνια όσο και για το κρυσταλλικό πλέγμα, μπορούν να μας οδηγήσουν σε σημαντικές διαπιστώσεις σχετικά με την εξέλιξη του θερμοκρασιακού πεδίου αλλά και την κατανομή των ζωνών κύριας φωτοαποδόμησης και θερμικής επιρροής πάνω στο υλικό. Εναλλακτικά, θα μπορούσαν να διατυπωθούν ορισμένες σχέσεις αριθμητικής επίλυσης βασικών ή γενικευμένων εξισώσεων μετάδοσης θερμότητας, και να εφαρμοστούν στον κώδικα προσομοίωσης, με σκοπό να παρατηρηθεί, τόσο αριθμητικά όσο και οπτικά, η κατανομή των θερμοκρασιών μέσα στον ακτινοβολούμενο όγκο.
- Συνδυαστική χρήση Μοριακής Δυναμικής (MD) ανάλυσης και μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων (*Finite Element Method – FEM*), με σκοπό να μπορεί η φωτοαποδόμηση να μελετηθεί σε συστήματα μεγαλύτερου όγκου, χωρίς να υπάρχει η απαίτηση για διεξαγωγή πολύ χρονοβόρων διαδικασιών με αμφίβολο τελικό αποτέλεσμα.
- Διερεύνηση της μεταβολής της ατομικής πυκνότητας του υλικού και των πιέσεων που παράγονται. Κάτι τέτοιο θα μας βοηθήσει να παρατηρήσουμε οπτικά τις αλλαγές φάσης που λαμβάνουν χώρα στα άτομα, καθώς επίσης και το χρόνο παραμονής στη στερεά, υγρή και αέρια φάση, πριν την απομάκρυνσή τους λόγω φωτοαποδόμησης.
- Εφαρμογή της μεθόδου Μοριακής Δυναμικής (MD) για τη διερεύνηση της εξέλιξης της φωτοαποδόμησης σε συστήματα ατόμων που ακτινοβολούνται με υπερβραχείς παλμούς Laser, της τάξης των μερικών femtosecond. Μία τέτοια μελέτη μπορεί να βοηθήσει στην κατανόηση των διαφορετικών μηχανισμών φωτοαποδόμησης που λαμβάνουν χώρα, αλλά και στο πώς επηρεάζονται

άλλα φαινόμενα, όπως αυτό της θερμικής διάχυσης, όταν μειωθεί σε μεγάλο βαθμό η διάρκεια του παλμού.

- Εφαρμογή της έκφρασης δυναμικού πολλών σωματιδίων (MBP – Many-Body Potential), κατά την περιγραφή των δυνάμεων αλληλεπίδρασης των σωματιδίων του υλικού, με σκοπό τον προσδιορισμό των περιοχών στις οποίες κάθε μία από τις εκφράσεις δυναμικού που χρησιμοποιούνται εν γένει σε MD αναλύσεις (π.χ. Lennard-Jones, Morse, Buckingham etc.) μπορεί να περιγράψει τις διατομικές αλληλεπιδράσεις πιο αξιόπιστα.
- Χρήση της Μοριακής Δυναμικής ανάλυσης για την περιγραφή και άλλων κατεργασιών με Laser που συνδέονται με τη φωτοαποδόμηση υλικού, εκτός από την εγχάραξη (scribing) που εξετάστηκε επί του παρόντος. Μία κατεργασία που θα μπορούσε να μοντελοποιηθεί μελλοντικά είναι αυτή της *micro-διάτρησης* (micro-drilling) μεταλλικών επιφανειών, των οποίων το πάχος είναι συγκρίσιμο με τις άλλες δύο διαστάσεις (σε αντίθεση με τα λεπτά υμένια) και στο οποίο πρόκειται να δημιουργηθούν αυλακώσεις, με χρήση περισσότερων του ενός παλμού Laser ανά σημείο. Είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι η παρακολούθηση της εξέλιξης της φωτοαποδόμησης, χρησιμοποιώντας περισσότερους από έναν παλμούς Laser τη φορά, μπορεί να εφαρμοστεί για ένα σαφώς μεγαλύτερο εύρος ροών ακτινοβολίας Laser, αλλά και να χρησιμοποιηθεί αποτελεσματικά για τη διερεύνηση του βάθους φωτοαποδόμησης ακόμα και σε υλικά με ιδιαίτερα μεγάλο πάχος.
- Κατάστρωση του κώδικα προσομοίωσης σε ένα διαφορετικό υπολογιστικό πακέτο, το οποίο ενδέχεται να παρουσιάζει αυξημένες υπολογιστικές δυνατότητες, να είναι εύκολα προσαρμόσιμο στις συνθήκες για τις οποίες το θέλουμε και να μπορεί να μας δώσει εύκολα πληροφορίες για σχεδόν οποιαδήποτε παράμετρο μας ενδιαφέρει κατά τη μελέτη του φαινομένου. Λαμβάνοντας υπόψη ότι, κατά το παρελθόν, έχουν αναπτυχθεί υπολογιστικά μοντέλα τόσο σε ANSYS όσο και σε Java σχετικά με την MD ανάλυση της φωτοαποδόμησης με Laser, θα ήταν μία καλή ιδέα να προσαρμοστεί ο ήδη συντεταγμένος κώδικας σε ένα από αυτά τα πακέτα, ή σε όποιο άλλο θα μπορούσε να μοντελοποιήσει τη διαδικασία σχετικά εύκολα και γρήγορα.

ΠΗΓΕΣ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑΣ

Ελληνική Βιβλιογραφία

E1] *Πειραματική και Θεωρητική Ανάλυση με τη Χρήση Μοριακής Δυναμικής του Μηχανισμού Φωτοαποδόμησης Μεταλλικών Υλικών Προκαλούμενης από Ακτίνες Laser*, Σταυρόπουλος, Π.Γ., Διδακτορική Διατριβή. Πανεπιστήμιο Πατρών, Πολυτεχνική Σχολή, Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών, Εργαστήριο Συστημάτων Παραγωγής & Αυτοματισμού / Δυναμικής & Θεωρίας Μηχανών. Πάτρα, 2007.

E2] *Προσομοίωση της Κοπής σε Νανοκλίμακα με τη Μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής*, Καλτερεμίδου, Α., Διπλωματική Εργασία. Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών, Τομέας Τεχνολογίας των Κατεργασιών. Αθήνα, Οκτώβριος 2012.

E3] *Μικρο-Επεξεργασία Λεπτού Υμενίου Μολυβδαινίου (Μο) με Laser για Εφαρμογή στη Φωτοβολταϊκή Τεχνολογία*, Κοράλλη, Π., Διπλωματική Εργασία. Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών, Τομέας Τεχνολογίας των Κατεργασιών. Αθήνα, 2010.

Ξενόγλωσση Βιβλιογραφία

1] *Thermomechanical Wave Propagation in Gold Films Induced by Ultrashort Laser Pulses*, Gan, Y., & Chen, J.K. *Mechanics of Materials*, Vol. 42 (2010), 491-501.

2] *Computer Simulations of Laser Ablation of Molecular Substrates*, Zhigilei, L.V., Leveugle, E., Garrison, B.J., Yingling, Y.G. & Zeifman, M.I., *Chemical Review Vol. 103* (2003), 321-347. Paper Received on June 5, 2002.

3] *Laser Ablation of Metals: Computational Simulation*, Sonntag, S., *Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart* (2010).

4] *Ultrafast Phase Change During Femtosecond Laser Interaction with Gold Films: Effect of Film Thickness*, Huang, J., Zhang, Y. & Chen, J.K. *Department of Mechanical and Aerospace Engineering, University of Missouri, Columbia, Missouri, USA*. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 57 (2010), 893-910.

5] *Ablation and Spallation of Gold Films Irradiated by Ultrashort Laser Pulses*, Demaske, B.J., Zhakhovsky, V.V., Inogamov, N.A. & Oleynik, I.I. *Physical Review B* 82 (2010), 064113.

6] *Energy Transport Analysis in Ultrashort Pulse Laser Ablation through Combined Molecular Dynamics and Monte Carlo Simulation*, Hu, W.Q., Shin, Y.C., & King, G., *School of Mechanical*

- Engineering, Purdue University, West Lafayette, Indiana 47907, USA. Physical Review B 82 (2010), 094111.*
- 7] ***Molecular Dynamics Simulation of Cluster Distribution from Femtosecond Laser Ablation in Aluminum***, Sonntag, S., Paredes Trichet, C., Roth, J. & Trebin, H.R. *Applied Physics A*, 104 (2011), 559-565. Published online on May 21, 2011, Copyright © Springer-Verlag, 2011.
- 8] ***Molecular Dynamics Simulation of Ultrafast Laser Ablation of Fused Silica Film***, Wang, Y., Xu, X. & Zheng, I., *Applied Physics A*, 92 (2008), 849-852. Published online on May 28, 2008, Copyright © Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008.
- 9] ***Combined Molecular Dynamics – Continuum Study of Phase Transitions in Bulk Metals under Ultrashort Pulsed Laser Irradiation***, Wendelen, W., Dzhurakhalov, A.A., Peeters, F.M., & Bogaerts, A., *J. Phys. Chem. C* 114 (2010), 5652-5660.
- 10] ***A Review on the Molecular Dynamics Simulation of Machining at the Atomic Scale***, Komanduri, R. & Raff, L.M., *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture* 215 (2001), 1639.
- 11] ***Transient Elastic Stress Development during Laser Scribing of Ceramics***, Modest, M.F. & Mallison, T.M., *Department of Mechanical Engineering, The Pennsylvania State University, University Park, PA 16802.*
- 12] ***Atomic/Molecular-Level Simulations of Laser-Materials Interactions***, Zhigilei, L.V., Lin, Z.B., Ivanov, D.S., Leveugle, E., Duff, W.H., Thomas, D., Sevilla, C. & Guy, S.J., *Springer-Verlag*, 2010.
- 13] ***A Combined Molecular Dynamics and Finite Element Method Technique Applied to Laser Induced Pressure Wave Propagation***, Smirnova, J.A., Zhigilei, L.V., Garrison, B.J., *Department of Chemistry, 152 Davey Laboratory, The Pennsylvania State University, University Park, PA 16802, USA. Computer Physics Communications* 118 (1999), 11-16.
- 14] ***Numerical Simulation of Laser Ablation for Photovoltaic Materials***, Stein, P., Garcia, O., Morales, M., Huber, H.P. & Molpeceres, C., *Applied Surface Science, Volume 258, Issue 23 (2012)*, 9288-9291.
- 15] ***Theoretical Models and Qualitative Interpretations of Fs Laser Material Processing***, Bulgakova, N.M., Burakov, I.M., Meshcheryakov, Y., Stoian, R., Rosenfeld, A. & Hertel, I.V., *JLMN-Journal of Laser Micro/Nanoengineering Vol. 2, No. 1, 2007.*
- 16] ***Molecular Dynamics Simulation of Shock Waves in Laser-Material Interaction***, Gacek, S.S., *Iowa State University*, 2009.
- 17] ***Computational Nanotechnology Modeling and Applications with MATLAB***, Musa, S.M., *CRC Press, Taylor & Francis Group, 6000 Broken Sound Parkway NW, Suite 300, Boca Raton, FL 33487-2742 (USA). © 2012.*

- 18] *Molecular Dynamics Simulation*, Ogbonna, N., *African Institute for Mathematical Sciences, Muizenberg, South Africa*, May 2004.
- 19] *Ablation of Metals with Picosecond Laser Pulses: Evidence of Long-Lived Nonequilibrium Conditions at the Surface*, Gamaly, E.G., Madsen, N.R., Duering, M., Rode, A.V., Kolev, V.Z. & Luther-Davies, B., *Physical Review B* 71 (2005), 174405. Published on May 6, 2005.
- 20] *Metal Ablation by Picosecond Laser Pulses: A Hybrid Simulation*, Zhigilei, L.V., *Physical Review B*, Vol. 66 (2002), 115404-1 – 115404-8.
- 21] *Thin-Film Deposition using Laser Ablation – Application to Ferromagnetic Shape-Memory Materials and Methods for Spatial Shaping of Laser Beams*, Hakola, A., *Helsinki University of Technology, Department of Engineering, Physics and Mathematics, Laboratory of Advanced Energy Systems*. TKK Dissertations 38, Espoo (Finland), 2006.
- 22] *Metal Thin Film Ablation with Femtosecond Pulsed Laser*, Kim, J.G., & Na, S.J., *Optics & Laser Technology* 39 (2007), 1443-1448. Available Online from 28 November 2006 onwards.
- 23] *Laser Ablation Efficiency of Metal Samples with UV Laser Nanosecond Pulses*, Sallé, B., Chaléard, C., Detalle, V., Lacour, J.L., Mauchien, P., Nouvellon, C. & Semerok, A., *CEA Saclay, DCC / DPE / SPCP / LSLA, 91191 Gif sur Yvette Cedex, France*. *Applied Surface Science* 138-139 (1999), 302-305.
- 24] *Metal Ablation with Short and Ultrashort Laser Pulses*, Leitz, K-H., Redlingshöfer, B., Reg, Y., Otto, A., Schmidt, M., *Physics Procedia* 12 (2011), 230-238.
- 25] *355 nm Nanosecond Pulsed Nd:YAG Laser Profile Measurement, Metal Thin Film Ablation and Thermal Simulation*, Bozsóki, I., Balogh, B., Gordon, P., *Optics & Laser Technology* 43 (2011), 1212-1218.
- 26] *Thermal Model of Pulsed Laser Ablation under the Conditions of Formation and Heating of a Radiation-Absorbing Plasma*, Bulgakov, A.V., Bulgakova, N.M., *Quantum Electronics* 29 (5) (1999), 433-437.
- 27] *A Brief History of Laser Ablation*, Miller, J.C., *Laser Ablation: Mechanisms and Applications – II: AIP Conference Proceedings, Volume 288* (1993), 619-622.
- 28] *Molecular Dynamics Simulation of Ablation Process with Ultrashort-Pulse Laser*, Ohmura, E., Fukumoto, I., Miyamoto, I., *Riken Review No. 32: Focused on Laser Precision Microfabrication (LPM2000)* (2001), 19-22.
- 29] *Microstructure and Tensile Properties of AISI 316 Stainless Steel Electron-Beam Cladding on C40 Mild Steel*, Tosto, S., Nenci, F. & Hu, J., *Journal of Materials Science*, 29(22) (1994), 5852-5858.
- 30] *Laser Soldering-New Light on an Old Joining Process*, Messler, W.R., & Millard, D.L., *Welding Journal*, 73(10) (1994), 43-48.

- 31] *Laser Forming*, Geiger, M., Arnet, H. & Vollertsten, F., *Proceedings of the LANE'94, I* (1994), 81-92.
- 32] *Surface Treatment Techniques by Laser Beam Machining*, Heuvelman, C.J., Köning, W., Tönshoff, H.K., Meijer, J., Kimer, P.K., Rund, M., Schneider, M.F. & van Sprang, I., (1992), *CIRP Annals*, 41(2) (1992), 657-666.
- 33] *Laser Technology in Processing of Coated Sheets*, Poprawe, R., Klein, R. & Abram, L., *Stahl und Eisen*, 115(7) (1995), 31-37.
- 34] *Model for the Temperature Gradient Mechanism of Laser Bending*, Vollertsten, F., *Proceedings of the LANE'94, I* (1994), 345-360.
- 35] *High Power Laser Beam Machining of Structural Ceramics*, Firestone, R.F. & Vesely, Jr. E.J., *ASME Symposium of Advanced Ceramic Materials* (1988), 215-227.
- 36] *Gas Jet Effects on Laser Cutting*, Chryssolouris, G. & Choi, W.C., *Proceedings of the SPIE Conference on CO₂ Lasers and Applications, Los Angeles, California* (Jan. 15-20, 1989).
- 37] *Improved Manufacturing Processes with High Power Lasers*, Leidinger, D., Penz, A., & Schuöcker, D. (1995), *Infrared Physics Technology*, 36(1) (1995), 251-266.
- 38] *Gas-Jet Laser Cutting*, Babenko, V.P. & Tychinskii, V.P., *Soviet Journal of Quantum Electronics*, 2(5) (1973), 399-410.
- 39] *On Laser Fusion Cutting of Metals*, Schulz, W., Simon, G., Urbassek, H.M. & Decker, I., *Journal Physics D: Applied Physics*, 20 (1989), 481-488.
- 40] *Laser Processing Integrated in Machine Tools-Design, Applications, Economy*. Hügel, H., Rundlaff, T. & Wiedmaier, M., *Proceedings of the LANE '94, I* (1994), 439-453.
- 41] *Principles of Lasers*, Svelto, O., *Plenum Press, New York* (1998).
- 42] *The Physical Mechanisms of Short Pulse Laser Ablation*, von der Linde, D. & Sokolowski Tinten, K., *Applied Surface Science, Vol. 154-155* (2000), 1-10.
- 43] *Introduction to Solid State Physics*, Kittel, C., *John Wiley & Sons* (1976)
- 44] *Mathematical Physics*, Menzel, D.H., *Dover Publications Inc., New York* (1961)
- 45] *Laser-Beam Interaction with Materials*, von Allmen, M., *Springer-Verlag, Germany* (1987)
- 46] *Optical Maser Oscillation from Ni²⁺ in MgF₂ Involving Simultaneous Emission of Phonons*, Johnson, L.F., Dietz, R.E. & Guggenheim H.J., *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 11 (1963), 318-322.
- 47] *Laser Oscillation in Nd:doped Yttrium Aluminium, Yttrium Gallium and Gadolinium Garnets*, Geusic, J.E., Marcos, H.M. & Van Uitert, L.G., *Applied Physics Letters, Vol. 4* (1964), 182.
- 48] *Organic Dye Solution Laser*, Shank, C.V. & Ippen, E.P., *Applied Physics Letters, Vol. 24* (1974), 373.

- 49] *Tunable Laser Performance in $BeAl_2O_4:Cr^{3+}$* , Walling, J.C., Janssen, H.P., Morris, R.C., O'Dell, E.W. & Peterson, O.G., *Optical Letters*, Vol.4 (1979), 182.
- 50] *Spectroscopic and Laser Characteristics of $Ti:Al_2O_3$* , Moulton, P.F., *Journal of the Optical Society of America B*, vol. 3 (1986), 125.
- 51] *Regeneratively Initiated Self-Mode-Locked $Ti:Sapphire$ Laser*, Spence, D.E., Evans, J.M., Sleat, W.E. & Sibbett, W., *Optical Letters*, Vol. 16 (1991), 1762.
- 52] *Self-starting 6.5-fs Pulses from a $Ti:Sapphire$ Laser*, Jung, W.E., Kartner, F.X., Matuschek, N., Sutter, D.H., Morier-Genoud, F., Zhang, G., Keller, U., Scheuer, V., Tilsch, M. & Tschudi, T., *Optical Letters*, Vol. 22 (1997), 1009.
- 53] *Generation of 5 fs Pulses and Octave-Spanning Spectra Directly from a $Ti:Sapphire$ Laser*, Morgner, U., Kartner, F.X., Fujimoto, J.G., Ippen, E.P., Scheuer, V., Angelow, G. & Tschudi, T., *Optics Letters*, Vol. 26 (6) (2001), 373-375.
- 54] *Polarization Effects in Ultrashort-Pulse Laser Drilling*, Nolte, S., Momma, C., Kamlage, G., Ostendorf, A., Fallnich, C., von Alvensleben, F. & Welling, H., *Applied Physics A*, Vol. 68 (1999), 563-567.
- 55] *Subpicosecond Time Resolved Ablation Studies of Submicrometer Gratings on Metals and Semiconductors*, Klein-Wiele, J.-H., Marowsky, G. & Simon, P., *Applied Physics A*, Vol. 69 (1999), 187-190.
- 56] *The Role of Electron-Phonon Coupling in Femtosecond Laser Damage of Metals*, Wellershoff, S.S., Hohlfeld, J., Gdde, J. & Matthias, E., *Applied Physics A*, Vol. 69 (1999), 99-107.
- 57] *Towards Nanostructuring with Femtosecond Laser Pulses*, Korte, F., Serbin, J., Koch, J., Egbert, A., Fallnich, C., Ostendorf, A. & Chichkof, B.N., *Applied Physics A*, Vol. 77 (2003), 229-235.
- 58] *Simulation of Transformations of Thin Metal Films Heated by Nanosecond Laser Pulses*, Balandin, V. Yu., Niedrig, R., Bostanjoglo, O., *Optisches Institut der Technischen Universitt Berlin, Strasse des 17. Juni 135, Berlin 10623, Germany*. *J. Appl. Phys.* 77 (1995), 135-142.
- 59] *Finite Element Analysis of the Initial Stages of the Laser Ablation Process*, Conde, J.C., Lusquios, F., Gonzlez, P., Serra, J., Len, B., Dima, A., Cultrera, L., Guido, D., Zocco, A., Perrone, A., *Thin Solid Films* 453-454 (2004), 323-327.
- 60] *Self-Assembly of Tubular Fullerenes*, Guo, T., Nikolaev, P., Rinzler, D., Tomanek, D.T., Colbert, D.T., Smalley, R.E., *J. Phys. Chem.* 99 (27) (1995), 10694-10697.
- 61] *Catalytic Growth of Single-Walled Nanotubes by Laser Vaporization*, Guo, T., Nikolaev, P., Thess, A., Colbert, D.T., Smalley, R.E., *Chem. Phys. Lett.* 243 (1995), 49.

- 62] *Femtosecond Imaging of Melting and Evaporation at a Photoexcited Silicon Surface*, Downer, M.C., Fork, R.L. & Shank, C.V., *J. Opt. Soc. Am. B* 2 (1985), 595.
- 63] *Plasma Analyses during Femtosecond Laser Ablation of Ti, Zr, and Hf*, Pronko, P.P., Dutta, S.K. & Du, D., *J. Appl. Phys.* 78 (1995), 6233.
- 64] *Optical Ablation by High-Power Short Pulsed Lasers*, Stuart, B.C., Feit, M.D., Herman, S., Rubenchik, A.M., Shore, B.W., & Perry, M.D., *J. Opt. Soc. Am. B* 13 (1996), 459.
- 65] *Machining of Submicro Structures on Metals and Semiconductors by Ultrashort-UV Laser Pulses*, *Appl. Phys. A* 63 (1996), 505.
- 66] *Short-Pulsed Laser Ablation of Solid Targets*, Momma, C., Chichkov, B.N., Nolte, S., von Alvensleben, F., Tünnermann, A., Welling, H. & Welleghausen, B., *Optics Comm.* 129 (1966), 134.
- 67] *Laser Processing of Sapphire with Picosecond and Sub-Picosecond Pulses*, Rosenfeld, A., Ashkenasi, D., Varel, H., Wähler, M. & Campbell, E.E.B., *Appl. Surf. Sci.* 127/129 (1998), 76.
- 68] *Ultra-Short Pulsed Laser Ablation of Highly Oriented Pyrolytic Graphite*, Shirk, M.D. & Molian, P.A., *Carbon*, 39(8) (2001), 1183-1193.
- 69] *A Finite Element Model to Predict the Ablation Depth in Pulsed Laser Ablation*, Vasantgadkar, N.A., Bhandarkar, U.V., Joshi, S.S., *Thin Solid Films* 519 (2010), 1421-1430.
- 70] *Pulsed Laser Deposition of Thin Films*, Chrisey, D.B., Hubler, G.K., *Wiley-Interscience, New York* (1994), 23.
- 71] *The Effects of High-Power Radiation on Metals*, Singh, R.K., Narayan, J., *Phys. Rev. B* 41 (199), 8843.
- 72] *Investigations of Extinction Coefficients During Excimer Laser Ablation and their Interpretation in Terms of Rayleigh Scattering*, *J. Phys. D* 29 (1996), 1564.
- 73] Fang, R., Zhang, D., Li, Z., Yang, F., Li, L., Tan, X., Sun, M., *Solid State Commun.* 145 (2008), 556.
- 74] *Deposition of HTSC YBCO:Ag Thin Films for Microwave Applications*, Lorenz, M., Hochmuth, H., Natusch, D. & Kreber, K., *Appl. Phys. A* 69 (1999), 905.
- 75] *Critical Assessment of the Issues in the Modeling of Ablation and Plasma Expansion Processes in the Pulsed Laser Deposition of Metals*, Marla, D., Bhandarkar, U.V. & Joshi, S.S., *Journal of Applied Physics* 109 (2011), 021101.
- 76] *Estimation of Plasma Absorption Effects during Pulsed Laser Ablation of High-Critical-Temperature Superconductors*, Singh, R., Viatella, J., *J. Appl. Phys.* 75 (1994), 1204.
- 77] Li, L., Zhang, D., Li, Z., Guan, L., Tan, X., Fang, R., Hu, D., Liu, G., *Physica B, Vol.* 383 (2006), 194.
- 78] *Finite Element Simulation of Pulsed Laser Ablation of TiC*, Oliveira, V., Vilar, R., *Appl. Surf. Sci.* 253 (2007), 7810.

- 79] *Pulsed Laser Deposition of Metal and Metal Multilayer Films*, Lunney, J.G., *Appl. Surf. Sci.* 86 (1995), 79.
- 80] *Absorption and Saturation Mechanisms in Aluminum Laser Ablated Plasmas*, Amoruso, S., Armenante, M., Berardi, V., Bruzzese, R., Spinelli, N., *Appl. Phys. A* 65 (1997), 265-271.
- 81] *Thermal Simulation of UV Laser Ablation of Polyimide*, Gordon, P., Balogh, B., Sinkovics, B., *Microelectronics Reliability* 47 (2007), 347-353.
- 82] *In-Situ Investigation of Laser Ablation of Thin Films*, Matthias, E., Siegel, J., Petzoldt, S., Reichling, M., Skurk, H., Käding, O. *et al.*, *Thin Solid Films* 254 (1995), 139-146.
- 83] *Experimental Investigations of Laser Ablation Efficiency of Pure Metals with Femto, Pico and Nanosecond Pulses*, Semerok, A., Chaléard, C., Detalle, V., Lacour, J-L., Mauchien, P., Meynadier, P. *et al.*, *Applied Surface Science*, 138-139 (1999), 311-314.
- 84] *Conduction of Heat in Solids*, Carslaw, H. & Jaeger, J.C., *Oxford University Press* (1959).
- 85] *Time-Resolved Electron-Temperature Measurement in a Highly Excited Gold Target using Femtosecond Thermionic Emission*, Wang, Z.G., Dufour, C., Paumier, E., & Toulemonde, M., *Journal of Physics: Condensed Matter*, 6 (34) (1994), 6733-6750.
- 86] *Theory of Thermal Relaxation of Electrons in Metals*, Allen, P.B., *Physical Review Letters*, 59 (13) (1987), 1460-1463.
- 87] *Electron-Phonon Enhancement of Thermopower: Application to Metallic Glasses*, Kaiser, A.B., *Physical Review B*, 29 (12) (1984), 7088-7091.
- 88] *Electron Emission from Metal Surfaces Exposed to Ultra Short Laser Pulses*, Anisimov, S.I., Kapeliovich, B.L. & Perel'man, T.L., *JETP Lett.*, 39 (2) (1974).
- 89] *Non-Fourier Heat Conduction Studying on High-Power Short-Pulse Laser Ablation Considering Heat Source Effect*, Zhang, D.M., Li, L., Li, Z.H., Guan, L., Tan, X. & Liu, D., *The European Physical Journal Applied Physics*, 33 (2) (2006), 91-96.
- 90] *Thermoelastic Wave Induced by Pulsed Laser Heating*, Wang, X.Y., Riffe, D.M., Lee, Y.-S. & Downer, M.C., *Physical Review B*, 50 (11) (1994), 8016-8019.
- 91] *Stochastic Foundation of Normal and Anomalous Cattaneo-Type Transport*, Metzler, R. & Compte, A., *Physica A*, 268 (1999), 454-468.
- 92] *The Role of Electron-Phonon Coupling in Femtosecond Laser Damage of Metals*, Wellershoff, S.S., Hohlfeld, J., Güdde, J. & Matthias, E., *Applied Physics A*, 69 (1999), 99-107.
- 93] *Femtosecond Electronic Heat-Transport Dynamics in Thin Gold Films*, Brorson, S.D., Fujimoto, J.G. & Ippen, E.P., *Physical Review Letters*, Vol. 59 (17) (1987), 1962-1965.

- 94] *Time-Resolved Thermorefectivity of Thin Gold Films and its Dependence on Film Thickness*, Hohlfeld, J., Müller, J.G., Wellershoff, S.-S. & Matthias, E., *Applied Physics B*, Vol. 64 (1997), 387-390.
- 95] *Photochemical Processing of Electronic Materials*, Boyd, I.A., *Academic Press, London* (1992).
- 96] *Laser Ablation. Principles and Applications*, Miller, C.J., *Springer Ser. Mater. Sci. 28, Springer-Verlag, Berlin* (1994).
- 97] *Homogenous Nucleation of Toluene*, Schmit, J.L., Zalabsky, R.A. & Adams, G.W., *The Journal of Chemical Physics*, 79 (9) (1983), 4496-4501.
- 98] *Cavitation and Bubble Dynamics*, Brennen, C.E., *Oxford University Press* (1995).
- 99] *Bubble Nucleation in Liquids*, Blander, M. & Katz, J., *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 21(5) (1975), 833-848.
- 100] *Manufacturing Systems: Theory and Practice*, Chryssolouris, G., *Second Edition, Second Edition*, Springer, New York (2006).
- 101] *Computer Simulation in Materials Science (Vol. 308)*, Kirchmor, H.O., Kubin, L.P. & Pontikis, V., *NATO ASI Series, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands* (1996)
- 102] *Computer Simulation in Materials Science (Vol. 205)*, Meyer, M. & Pontikis, V., *NATO ASI Series, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands* (1991).
- 103] *Feynman Lectures on Physics*, Feynman, R.P., Leighton, R.B. & Sands, M., *Addison-Wesley* (1964).
- 104] *Studies in Molecular Dynamics. General Method*, Adler, B.J. & Wainwright, T.E., *Journal of Chemical Physics*, Vol. 31 (1959), 459.
- 105] *Numerical Simulation in Molecular Dynamics: Numerics, Algorithms, Parallelization, Applications*, Griebel, M., Knapek, S., Zumbusch, G., *Texts in Computational Science and Engineering*, 5, © Springer-Verlag, Heidelberg, Germany (2007).
- 106] *Numerical Recipes*, Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A. & Vetterling, W.T., *Cambridge University Press, Cambridge* (1986).
- 107] *Estimation of the Chemical Potential of Chain Molecules by Simulation*, de Pablo, J., Laso, M. & Suter, U.W.J., *Journal of Chemical Physics*, Vol. 96 (1992), 57-61.
- 108] *Configurational Bias Monte Carlo: A New Sampling Scheme for Flexible Chains*, Siepmann, J.I. & Frenkel, D., *Molecular Physics*, Vol. 75 (1992), 59-70.
- 109] *Recent Contributions of Statistical Mechanics in Chemical Engineering*, Deem, M.W., *AIChE Journal*, 44 (1998), 2569-2596.

- 110] *Thermodynamics of Chain Fluids from Atomistic Simulation: A Test of the Chain Increment Method for Chemical Potential*, Spyriouni, T., Economou, I.G. & Theodorou, D.N., *Macromolecules*, Vol. 30 (1997), 4744.
- 111] *Equations of State Calculations by Fast Computing Machines*, Metropolis, H., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H. & Teller, E.J., *Chem. Phys.*, SI (1953), 1087.
- 112] *Phase Transition of a Hard Sphere System*, Alder, B.J. & Wainwright, T.E., *Journal of Chemical Physics*, Vol. 27 (1957), 1208-1209.
- 113] *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Rapaport, D.C., *Cambridge University Press*, Cambridge, UK (1995).
- 114] *Computer Simulation of Liquids*, Allen, M.P. & Tildesley, D., *Oxford University Press* (1987).
- 115] *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*, Frenkel, D. & Smit, B., *Academic Press*, San Diego (1996).
- 116] *Studies in Molecular Dynamics: General Method*, Adler, B.J. & Wainwright, T.E., *Journal of Chemical Physics*, Vol. 31 (1959), 459.
- 117] *Mechanisms of Laser Ablation from Molecular Dynamics Simulations: Dependence on the Initial Temperature and Pulse Duration*, Zhigilei, L.V. & Garrison, B.J., *Appl. Phys. A. 69 [Suppl.]* (1999), 75-80.
- 118] *Thermal Conductivity of Crystals: A Molecular-Dynamics Study of Heat Flow in a Two-Dimensional Crystal*, Mountain, R.D., & McDonald, R.A., *Physics Reviews B*, Vol. 28 (6) (1983), 3022-3025.
- 119] *Interplay of Disorder and Anharmonicity in Heat Conduction: Molecular-Dynamics Study*, Poetsch, R.H. & Böttger, H., *Physics Reviews B*, Vol. 50 (21) (1994), 15575-15763.
- 120] *Molecular Dynamics Study of Solid Thin-Film Thermal Conductivity*, Lukes, J.R., Li, D.Y., Liang, X.G. & Tien, C.L., *Journal of Heat Transfer*, Vol. 122 (2000), 536.
- 121] *Atomistic Modeling of Finite Temperature Properties of β -SiC. I. Lattice Vibrations, Heat Capacity and Thermal Expansion*, Porter, L.J., Li, J. & Yip, S., *Journal of Nuclear Materials*, Vol. 246 (1997), 53-59.
- 122] *Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon*, Rahman, A., *Physical Reviews* Vol. 136 (1964), 405-411.
- 123] *Improved Simulation of Liquid Water by Molecular Dynamics*, Stillinger, F.H. & Rahman, A., *Journal of Chemical Physics*, Vol. 60 (1974), 1545-1557.
- 124] *Dynamics of Folded Proteins*, McCammon, J.A., Gelin, B.R. & Karplus, M., *Nature* Vol. 267 (1977), 585-590.

- 125] *Computer Simulation of Local Order in Condensed Phases of Silicon*, Stillinger, F.H. and Weber, T.A., *Physics Reviews B*, Vol. 31 (8) (1985), 5262-5271.
- 126] *Heat Conduction in Novel Electronic Films*, Goodson, K.E., & Ju, Y.S., *Annual Reviews of Materials Science*, Vol. 29 (1999), 261-293.
- 127] *A Simple Nonequilibrium Molecular Dynamics Method for Calculating the Thermal Conductivity*, Muller-Plathe, F., *Journal of Chemical Physics*, Vol. 106 (1997), 6082-6085.
- 128] *Molecular Dynamics Simulation Study of Deep Hole Drilling in Iron by Ultrashort Laser Pulses*, Nedialkov, N.N. & Atanasov, P.A., *Applied Surface Science*, Vol. 252 (13), 4411-4415.
- 129] *Heat Transport Analysis for Femtosecond Laser Ablation with Molecular Dynamics – Two Temperature Model Method*, Yamashita, Y., Yokomine, T., Ebara, S. & Shimizu, A., *Fusion Engineering and Design*, Vol. 81 (2006), 1695-1700.
- 130] *Molecular Dynamics Calculations for Nanostructured Systems*, Rieth, M., *University of Patras, School of Engineering, Engineering Science Department, PhD Thesis* (2000).
- 131] *Atom-Atom Structure Factors of Hydrogen Halides: A Molecular Approach Revisited*, Alvarez, M., Lomba, E., Martin, C. & Lombardero, M., *Journal of Chemical Physics* Vol. 103, Issue 9 (1995), 3680-3685.
- 132] *Ablation of Solids under Femtosecond Laser Pulses*, Perez, D. & Lewis, L.J. *Physical Review Letters*, Vol. 89 (25) (2002), 255504 1-4.
- 133] *Molecular Dynamics Study of Ablation of Solids under Femtosecond Laser Pulses*, Perez, D., & Lewis, L.J., *The 17th Annual International Symposium on High Performance Computing Systems and Applications, Session D17.014*.
- 134] *Molecular Dynamics Simulation of Thermal and Thermomechanical Phenomena in Picosecond Laser Material Interaction*, Wang, X. & Xu, X., *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 46 (2003), 45-53.
- 135] *Molecular Dynamics Simulation of Heat Transfer and Phase Change During Laser-Material Interaction*, Wang, X. & Xu, X., *Journal of Heat Transfer*, Vol. 124 (2002), 265-274.
- 136] *Computer Simulation Study of Damage and Ablation of Submicron Particles from Short-Pulse Laser Irradiation*, Zhigilei, L.V. & Garrison, B.J., *Applied Surface Science*, Vol. 127-129 (1998), 142-150.
- 137] *Molecular Dynamics Model for Laser Ablation and Desorption of Organic Solids*, Zhigilei, L.V., Kodali, P.B.S. & Garrison, B.J., *Journals of Physics Chemistry B*, Vol. 101 (1997), 2028-2037.
- 138] *On the Threshold Behavior in Laser Ablation of Organic Solids*, Zhigilei, L.V., Kodali, P.B.S. & Garrison, B.J., *Chemical Physics Letters*, Vol. 276 (1997), 269-273.

- 139] *Laser Ablation in a Model Two-Phase System*, Williams, G.J., Zhigilei, L.V. & Garrison, B.J., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, Vol. 180 (2001), 209-215.
- 140] *A Microscopic View of Laser Ablation*, Zhigilei, L.V., Kodali, P.B.S. & Garrison, B.J., *Journal of Physics and Chemistry B*, Vol. 102 (1998), 2845-2853.
- 141] *Multiscale Simulation of Laser Ablation of Organic Solids Evolution of the Plume*, Zeifman, M.I., Garrison, B.J. & Zhigilei, L.V., *Applied Surface Science*, Vol. 197-198 (2002), 27-34.
- 142] *Dynamics of the Plume Formation and Parameters of the Ejected Clusters in Short-Pulsed Laser Ablation*, Zhigilei, L.V., *Applied Physics A*, Vol. 76 (2003), 339-350.
- 143] *Velocity Distributions of Molecules Ejected in Laser Ablation*, Zhigilei, L.V. & Garrison, B.J., *Applied Physics Letters*, Vol. 71 (4) (1997), 551-553.
- 144] *Mechanisms of Decomposition of Metal During Femtosecond Laser Ablation*, Cheng, C., & Xu, X., *Physical Review B*, Vol. 72 (2005), 1-15.
- 145] *Molecular Dynamic Study of Volumetric Phase Change Induced by a Femtosecond Laser Pulse*, Cheng, C., & Xu, X., *Applied Physics A*, Vol. 79 (2004), 761-765.
- 146] *Mechanism of Ultrashort Laser Ablation of Metals: Molecular Dynamics Simulation*, Nedialkov, N.N., Imamova, S.E., Atanasov, P.A., Berger, P. & Dausinger, F., *Applied Surface Science*, Vol. 247 (2005), 243-248.
- 147] *Laser Ablation of Iron by Ultrashort Laser Pulses*, Nedialkov, N.N., Imamova, S.E., Atanasov, P.A., Heusel, G., Breitling, D., Ruf, A., Hugel, H., Dausinger F. & Berger, P., *Thin Solid Films*, Vol. 453-454 (2004), 496-500.
- 148] *An Atomistic Simulation Method Combining Molecular Dynamics with Finite Element Technique*, Wu, H.A., Liu, G.R., Han, X., & Wang, X.X., *Chaos, Solutions and Fractals*, Link: [doi:10.1016/j.chaos.2005.08.161](https://doi.org/10.1016/j.chaos.2005.08.161) (2005).
- 149] *Computational Model for Multiscale Simulation of Laser Ablation*, Zhigilei, L.V., *Materials Research Society Symposium Proceedings*, Vol. 677 (2001), AA2.1.1.-AA2.1.11.
- 150] *Computer Modeling of Laser Melting and Spallation of Metal Targets*, Zhigilei, L.V., Ivanov, D.S. & Leveugle, E., *Proceedings of SPIE*, Vol. 5448 (2004), 505-519.
- 151] *Heat Transport Analysis for Femtosecond Laser Ablation with Molecular Dynamics-Two Temperature Model Method*, Yamashita, Y., Yokomine, T., Ebara, S. & Shimizu, A., *Fusion Engineering and Design*, Vol. 81 (2006), 1695-1700.
- 152] *Molecular Dynamics Simulation, Elementary Methods*, Haile, J.M., *John Wiley & Sons* (1997).
- 153] *Application of the Morse Potential Function to Cubic Metals*, Girifalco, L.A. & Weizer, V.G., *Phys. Rev.*, 114(3) (1959), 687-690.

- 154] *Computer ‘Experiments’ on Classical Fluids*, Verlet, L., *Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules*, *Physics Review*, Vol. 159 (1967), 98-103.
- 155] *A Narrow-Band Wavelength-Tunable Laser System Delivering High-Energy 300 ps Pulses in the Near-Infrared*, Brandi, F., Velchev, I., Neshev, D., Hogervorst, W. & Ubachs, W., *Laser Centre, Department of Physics and Astronomy, Vrije Universiteit, De Boelelaan 1081, 1081 HV Amsterdam, The Netherlands*. *Review of Scientific Instruments*, Vol. 74, Issue 1 (2003), 32-37.
- 156] *Vaporization and Plasma Shielding during High Power Nanosecond Laser Ablation of Silicon and Nickel*, Liu, D. [a] & Zhang, D.M. [b], [a]: *Department of Physics and Electronic Engineering, Hubei University of Education, Wuhan 430205*. [b]: *Department of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074*. *Chin. Phys. Lett.* Vol. 25, No. 4 (2008), 1368.
- 157] *The Potential Calculation and Some Applications*, Hockney, R.W., *Methods of Computational Physics*, Vol. 9 (1970), 136-211.
- 158] *Molecular Dynamics Study of Solid Melting and Vaporization by Laser Irradiation*, Kotake, S. & Kuroki, M., *International Journal of Heat Mass Transfer*, Vol. 36 (8) (1993), 2061-2067.
- 159] *LIA Handbook of Laser Materials Processing*, Ready, J.F., *Magnolia Publishing Inc., Orlando* (2001).
- 160] *πShaper: Family of High Efficient Laser Beam Shaping Systems*, *PiShaper.com Online Article*, Internet Link: http://www.pishaper.com/shaping_system.php [31 May 2013].
- 161] *Prediction of the Bulk Elastic Constant of Metals using Atomic-Level Single-Lattice Analytical Method*, Chiang, K.N., Chou, C.Y., Wu, C.J. & Yuan, C.A., *Advanced Microsystem Packaging and Nano-Mechanics Research Laboratory, Department of Power Mechanical Engineering, National Tsing Hua University, HsinChu 30013, Taiwan*. *Applied Physics Letters* 88, 171904 (2006).
- 162] *Molybdenum*, *ESPI Metals Online Article*, Internet Link: <http://www.espimetals.com/tech/molybdenum.pdf> [31 July 2013].
- 163] *Modeling and Simulation of the Tool Wear in Nanometric Cutting*, Cheng, K., Luo, X., Ward, E. & Holt, R. *Wear*, Vol. 225 (2003), 1427-1432.
- 164] *Atomic Force Microscopy-Based Nano-Lithography for Nano-Patterning; A Molecular Dynamic Study*, Kim, Y.S., Na, K.H., Choi, S.O. & Yang, S.H., *Journal of Materials Processing Technology*, Vol. 155-156 (2004), 1847-1854.
- 165] *APS News*, May 2003.
- 166] *Lecture Notes*, Grigoropoulos, C.P., *Berkeley University, California (USA)*, 2004.
- 167] *Handbook of Optics: Fundamentals, Techniques & Design*, Bass, M., Van Stryland, E.W., Williams, D.R., Wolfe, W.L., *Second Edition, Volume I*, Published by McGraw-Hill, Inc. (USA), 1995.

- 168] *List of Thermal Conductivities*, Wikipedia.org Online Encyclopedia Article, Link: http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_thermal_conductivities.
- 169] *Thermal Diffusivity*, Wikipedia.org Online Encyclopedia Article, Link: http://en.wikipedia.org/wiki/Thermal_diffusivity.
- 170] *Theoretical and Experimental Studies on Molybdenum and Stainless Steel Mirrors Cleaning by High Repetition Rate Laser Beam*, Leontyev, A., Semerok, A., Farcage, D., Thro, P.-Y., Grisolia, C., Widdowson, A., Coad, P., Rubel, M., and JET EFDA Contributors, *JET-EFDA, Culham Science Centre, OX14 3DB, Abingdon, UK*. Presented during the Proceedings of the 22nd IAEA Fusion Energy Conference in Geneva, Switzerland (2008).
- 171] *Dynamics of Laser-Induced Plume Expansion into an Ambient Gas during Film Deposition*, Bulgakov, A.V., & Bulgakova, N.M., *Journal of Physics D: Applied Physics*, 28 (1995), 1710-1718.
- 172] *Modeling of Gas Dynamics for a Laser-Generated Plasma: Propagation into Low-Pressure Gases*, Le, H.C., Zeitun, D.E., Parisse, J.D., Sentis, M. & Marine, W., *Physical Review E*, 62 (2000), 4152-4161.
- 173] *Theory of Shock Wave Propagation during Laser Ablation*, Zhang, L., & Gogos, G., *Physical Review B*, 69 (2004), 235403-1-9.
- 174] *Transport of Neutral Atoms, Monoxides and Clusters in the Plume Produced by Laser Ablation of $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ in Oxygen Environment*, Bulgakov, A.V., Predtechensky, M.R. & Mayorov, A.P., *Applied Surface Science*, 96-98 (1996), 159-163.
- 175] *Modeling of Plume Dynamics in Laser Ablation Processes for Thin Film Deposition of Materials*, Leboeuf, J.N., Chen, K.R., Donato, J.M., Geohegan, D.B., Liu, C.L., Poretzky, A.A., & Wood, R.F. *Physics of Plasmas*, 3 (1996), 2203-2206.
- 176] *Internal Structure and Expansion Dynamics of Laser Ablation Plumes into Ambient Gases*, Harilal, S.S., Bindhu, C.V., Tillack, M.S., Najmabadi, F., & Gaeris, A.C., *Journal of Applied Physics*, 93 (2003), 2380-2388.
- 177] *KLA-Tencor Alpha-Step IQ Surface Profiler (User Manual)*, Copyright © 2004 KLA-Tencor Corporation, All Rights Reserved. Printed in San Jose, CA, USA.
- 178] *Time-of-Flight and Emission Spectroscopy of Femtosecond Laser Ablation of Titanium*, Ye, M., & Grigoropoulos, C.P., *Journal of Applied Physics*, Vol. 89 (2001), 5183-5190.
- 179] *Dynamics of the Ejected Material in Ultra-Short Laser Ablation of Metals*, Nedialkov, N.N., Atanasov, P.A., Imamova, S.E., Ruf, A., Berger, P. & Dausinger, F. *Applied Physics A*, Vol. 79 (2004), 1121-1125.

180] *Bulk and Surface Properties of Metallic Aluminium: DFT Simulations*, Jacobs, P.W.M., Zhukovskii, Y.F., Mastrikov, Y., Shunin, Y.N., *Computer Modeling & New Technologies Volume 6, No. 1* (2002), 7-28. *Transport and Telecommunication Institute, Lomonosov Str. 1, Riga, LV-1019, Latvia.*

181] *Structural Phase Transition of Aluminum Induced by Electronic Excitation*, Guo, C., Rodriguez, G., Lobad, A. & Taylor, A.J., *Physical Review Letters*, 84 (19) (2000), 4493-6.

ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ (CURRICULUM VITAE)

Ο Γεώργιος Κυριακάκης, του Χαραλάμπου και της Γιαννούλας (το γένος Μητροδήμου), είναι γεννηθείς στο Αμαρούσιο Αττικής στις 14 Αυγούστου του 1988.

Έχει αποφοιτήσει και παραλάβει Απολυτήριο Λυκείου από το Αμερικανικό Κολλέγιο Ελλάδος (The American College of Greece – Pierce College) τον Ιούνιο του 2006, με Βαθμό Απολυτηρίου 19.6 / 20.

Είναι Διπλωματούχος Μηχανολόγος Μηχανικός του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου από τον Ιούλιο του 2011, έχοντας ολοκληρώσει πενταετείς σπουδές και αποφοιτήσει με χαρακτηρισμό *Λίαν Καλώς* και συγκεντρωτική βαθμολογία 8.29 με άριστα το 10.

Από το Σεπτέμβριο του 2011 και έπειτα, είναι Μεταπτυχιακός φοιτητής στο Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών (Δ.Π.Μ.Σ.) «Επιστήμη και Τεχνολογία Υλικών» του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, με Συντονίζουσα Σχολή αυτή των Χημικών Μηχανικών.

Στα πλαίσια της απόκτησης του Διπλώματος Μηχανολόγου Μηχανικού, εκπόνησε και παρουσίασε Διπλωματική Εργασία στον Τομέα Τεχνολογίας των Κατεργασιών της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών του ΕΜΠ, με Επιβλέποντα Καθηγητή τον κ. Δ.Ε. Μανωλάκο και συνεργαζόμενα μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής τους κ.κ. Γ. Βοσνιάκο (Καθηγητή Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών ΕΜΠ) και Δ. Παντελή (Καθηγητή Σχολής Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ). Η υπόψη Διπλωματική Εργασία τιτλοφορείται **«Επίδραση της Διάταξης Συστήματος Μεταλλικών Ορθογωνικών Σωλήνων στην Ικανότητα Απορρόφησης Ενέργειας σε Αξονική Καταπόνηση: Πειραματική και Αριθμητική Διερεύνηση»** και παρουσιάστηκε ενώπιον της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής στις 21 Ιουλίου 2011, στο Κτίριο Ξ (Μηχανουργείο) της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών του ΕΜΠ.

Αναφέρεται εδώ ότι δεν έχει προκύψει ανακοίνωση σε συνέδριο ή εργασία σε επιστημονικό περιοδικό, στα πλαίσια της εν λόγω Μεταπτυχιακής Εργασίας.