



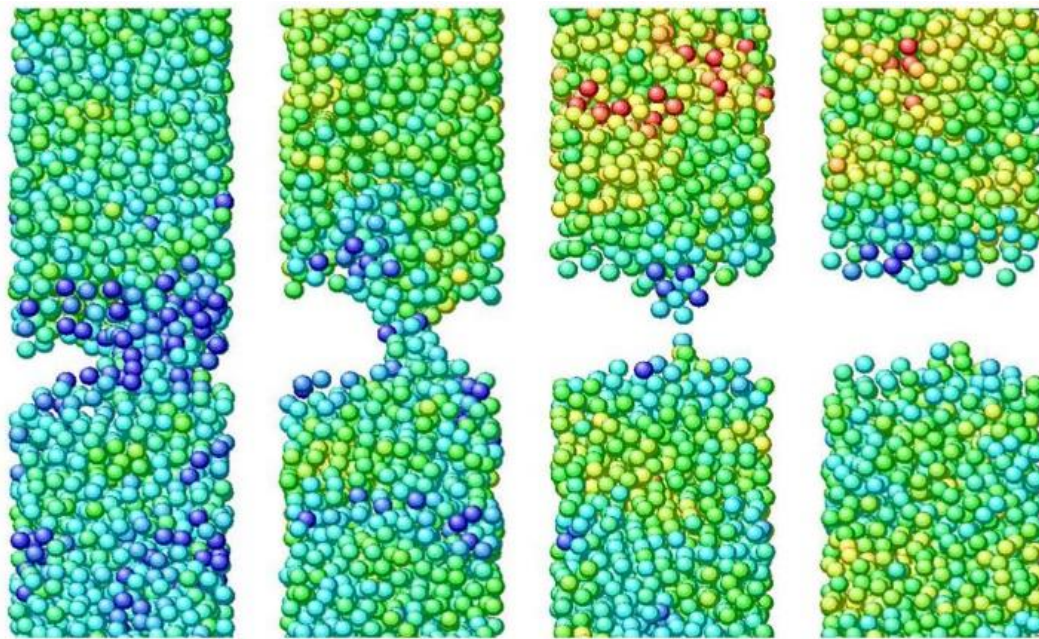
ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Διερεύνηση της επίδρασης της διάρκειας του παλμού κατά την κατεργασία
αφαίρεσης υλικού με laser με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής



(a) 30.4 ps

(b) 33.4 ps

(c) 35.0 ps

(d) 35.8 ps

ΧΑΡΑΛΑΜΠΟΥΣ ΤΑΞΙΑΡΧΗΣ

ΑΜ:02110637

Επιβλέπων : Μανωλάκος Δημήτριος , Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Ιούλιος 2016

Πρόλογος

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου, κ. Δημήτρη Μανωλάκο για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε, αναθέτοντάς μου αυτή την εργασία, καθώς και για τις βάσεις και τα κεντρίσματα που μου έδωσε μέσω των διδασκόμενων μαθημάτων κατά την κανονική περίοδο φοίτησης μου στο ΕΜΠ, δίνοντας μου έτσι την αφορμή να ασχοληθώ με το συγκεκριμένο αντικείμενο διπλωματικής.

Επίσης,θερμές ευχαριστίες θα ήθελα να απευθύνω στον υποψήφιο διδάκτορα Νικόλαο Κάρκαλο για την αμέριστη βοήθεια και τις καίριες παρατηρήσεις του σε όλη τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας διπλωματικής, τόσο στο υπολογιστικό μέρος όσο και κατά τη συγγραφή της.

Τέλος,θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου και τους συμφοιτητές μου για την αμέριστη συμπαράσταση και τις προϋποθέσεις που μου παρείχαν κατά τη φοίτηση μου στη σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών του Ε.Μ.Π.



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ

Διερεύνηση της επίδρασης της διάρκειας του παλμού κατά την κατεργασία
αφαίρεσης υλικού με laser με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής

Διπλωματική εργασία
του
Ταξιάρχη Χαραλάμπους

Περίληψη

Στην παρούσα διπλωματική εργασία γίνεται περιγραφή της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής για χρήση της στην προσομοίωση της φωτοαποδόμησης με χρήση laser και εφαρμογή της στην περίπτωση φωτοαποδόμησης φιλμ νικελίου, χαλκού και άργυρου στη νανοκλίμακα με υπερβραχείς παλμούς laser (ultrashort-femtosecond pulse). Μελετάται κυρίως η επίδραση που έχει η διάρκεια του παλμού laser στο αποτέλεσμα της κατεργασίας για διάφορες συνθήκες κατεργασίας και υλικά. Συγκεκριμένα:

Στο **Κεφάλαιο 1** πραγματοποιείται μία σύντομη εισαγωγή στη χρήση των lasers.

Στο **Κεφάλαιο 2** γίνεται μία αναλυτική περιγραφή των ειδών laser και που βρίσκει εφαρμογή το κάθε είδος.

Στο **Κεφάλαιο 3** γίνεται η βιβλιογραφική ανασκόπηση εφαρμογών Μοριακής Δυναμικής στις φωτοαποδόμησης με laser, αναλύονται δηλαδή υπάρχουσες πειραματικές περιπτώσεις με διαφορετικές συνθήκες και υλικά.

Το **Κεφάλαιο 4** περιγράφεται η ανάπτυξη κώδικα σε προγραμματιστικό περιβάλλον Matlab, καθώς και οι αλλαγές και τροποποιήσεις που έγιναν σε αυτόν για να πετύχουμε την αποτελεσματική προσομοίωση φωτοαποδόμησης των τριών υλικών (του νικελίου, χαλκού και άργυρου).

Στο **Κεφάλαιο 5** παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των συνολικά 45 προσομοιώσεων για διαφορετικά υλικά, διαφορετικές τιμές ροής ενέργειας και διαφορετικές τιμές διάρκειας παλμού. Γίνεται σχολιασμός των αποτελεσμάτων όσον αφορά τη μέση θερμοκρασία, τον αριθμό των φωτοαποδομημένων ατόμων και το χρονικό ρυθμό φωτοαποδόμησης σε σχέση με τα χαρακτηριστικά της κατεργασίας σε κάθε περίπτωση.

Τέλος, στο **Κεφάλαιο 6** εξάγονται τα συμπεράσματα με βάση τις προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν.



**NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING
SECTION OF MANUFACTURING TECHNOLOGY**

**Investigation of pulse duration effect on laser ablation process using the
Molecular Dynamics method**

Diploma Thesis
of
Taxiarchis Charalampous

Abstract

In the present thesis, a description of the method of Molecular Dynamics for laser ablation simulations at the nanoscale is presented and application of this method in the case of ultrashort laser ablation of nickel, copper and silver nano-films is conducted. The effect of laser pulse duration on the outcome of the ablation process for various process parameters and materials is mainly studied. More specifically:

In **Chapter 1**, a brief introduction to the use of lasers is conducted.

In **Chapter 2** a more detailed description of laser types and in which case each type is being mostly used, is conducted.

In **Chapter 3** a description of the theory of Molecular Dynamics (MD) method and its characteristics is presented, showing previous experimental cases for different materials under various process conditions.

In **Chapter 4** the development of a MD code in Matlab environment is described. Also, the additions and amendments made to the code in order to achieve an effective simulation of laser ablation process of the three materials are presented.

In **Chapter 5** the results of the simulations for different material, various values of laser fluence and pulse duration are being presented. Discussion on the results concerning average temperature, number of ablated particles and ablation rate in relation to process characteristics in each case is also conducted.

Finally, in **Chapter 6** general conclusions and remarks based on the simulations carried out, are being presented.

Περιεχόμενα

Πρόλογος.....	3
Περίληψη	5
Abstract.....	6
Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή.....	9
Κεφάλαιο 2: Θεωρητική ανάλυση φωτοαποδόμησης με χρήση laser.....	10
2.1 Ορισμός-Ιστορικά.....	10
2.2 Είδη laser	14
2.2.1 Laser αέριας κατάστασης.....	15
2.2.2 Laser στερεής κατάστασης.....	23
2.2.3 Laser διόδων(ημιαγωγοί-έγχυση).....	25
2.2.4 Laser υγρού(dye-χρωστικών).....	28
2.2.5 Laser ειδικής σύστασης.....	30
2.3 Χαρακτηριστικά μεγέθη Φαινομένου.....	31
2.3.1. Παράμετροι εξάρτησης της διαδικασίας φωτοαποδόμησης.....	31
2.3.2. Χαρακτηριστικά μεγέθη για τη μελέτη του φαινομένου της φωτοαποδόμησης.....	32
2.4 Μηχανισμοί απομάκρυνσης υλικού.....	34
2.4.1. Φωτοθερμικός μηχανισμός.....	38
2.4.2. Φωτομηχανικός μηχανισμός.....	40
2.4.3. Φωτοχημικός μηχανισμός.....	42
2.5 Εφαρμογές της φωτοαποδόμησης με laser.....	44
2.6 Πλεονεκτήματα-Μειονεκτήματα της φωτοαποδόμησης με laser.....	47
Κεφάλαιο 3: Σύντομη Βιβλιογραφική Ανασκόπηση Εφαρμογών Μοριακής Δυναμικής στις φωτοαποδόμηση με laser.....	48
3.1 Συνοπτική περιγραφή διάφορων ερευνητικών μελετών.....	48
3.2 Συνοπτικός πίνακας διάφορων ερευνητικών μελετών.....	59
Κεφάλαιο 4: Θεωρία Μοριακής Δυναμικής.....	61
4.1Εισαγωγή.....	61
4.2Είδη Ατόμων.....	63

4.2.1 Νευτώνεια Άτομα.....	63
4.2.2 Άτομα Θερμοστάτες.....	64
4.2.3 Συνοριακά Άτομα.....	65
4.3 Συναρτήσεις Δυναμικού Ενέργειας.....	66
4.3.1 Δυναμικό Morse.....	71
4.3.2 Δυναμικό Lennard– Jones.....	71
4.4 Υπολογισμοί Τροχιών με χρήση Αριθμητικής Ολοκλήρωσης.....	71
4.4.1 Μέθοδος Βατραχοδρασκελισμών(Leapfrog-Type Method).....	72
4.5 Συναρτήσεις Επανακαθορισμού Ταχυτήτων.....	74
4.5.1 Συνάρτηση Επιθυμητής Θερμοκρασίας.....	75
4.5.2 Επαναπροσδιορισμός ταχυτήτων.....	76
4.6 Μέθοδοι υπολογισμών αλληλεπιδράσεων.....	76
Κεφάλαιο 5:Αποτελέσματα-Προσομοιώσεις.....	77
5.1 Συνοπτική περιγραφή κώδικα προσομοίωσης.....	77
5.2 Χαρακτηριστικά προσομοιώσεων.....	84
5.3 Αποτελέσματα προσομοιώσεων	88
5.3.1 Αποτελέσματα προσομοιώσεων Ni.....	88
5.3.1.1 Διαγράμματα μέσης θερμοκρασίας και σχολιασμός.....	88
5.3.1.2 Διαγράμματα φωτοαποδόμημένων ατόμων και σχολιασμός.....	90
5.3.1.3 Διαγράμματα ρυθμού φωτοαποδόμησης και σχολιασμός.....	91
5.3.2 Αποτελέσματα προσομοιώσεων Cu.....	93
5.3.2.1 Διαγράμματα μέσης θερμοκρασίας και σχολιασμός.....	93
5.3.2.2 Διαγράμματα φωτοαποδόμημένων ατόμων και σχολιασμός.....	95
5.3.2.3 Διαγράμματα ρυθμού φωτοαποδόμησης και σχολιασμός.....	96
5.3.3 Αποτελέσματα προσομοιώσεων Ag.....	98
5.3.3.1 Διαγράμματα μέσης θερμοκρασίας και σχολιασμός.....	98
5.3.3.2 Διαγράμματα φωτοαποδόμημένων ατόμων και σχολιασμός.....	100
5.3.3.3 Διαγράμματα ρυθμού φωτοαποδόμησης και σχολιασμός.....	101
Κεφάλαιο 6:Συμπεράσματα και προτάσεις για μελλοντική έρευνα.....	104
Βιβλιογραφία.....	106

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Η χρήση των laser βρίσκεται στο επίκεντρο της καθημερινότητας της σύγχρονης κοινωνίας, με χιλιάδες εφαρμογές σε διάφορους τομείς όπως στην ιατρική, στην έρευνα, σε ηλεκτρονικές συσκευές, σε στρατιωτικές εφαρμογές κ.α. Μεταξύ των άλλων, τα laser βρίσκουν εδώ και καιρό, εφαρμογή και στον τομέα των κατεργασιών. Οι κατεργασίες των υλικών αποτελούν έναν πολύ σημαντικό τομέα της τεχνολογίας. Τα τελευταία κυρίως χρόνια, πέραν των συνεχώς αυξανόμενων απαιτήσεων για υψηλής ποιότητας κατασκευές, τίθεται και το ζήτημα της κατεργασίας σε ολοένα και μικρότερη κλίμακα (μικροκατεργασίες) για εφαρμογές σε διάφορους τεχνολογικούς τομείς όπως ιατρικά εξαρτήματα, συστήματα επικοινωνίας, εξαρτήματα Η/Υ, αεροδιαστημική κλπ. Η χρήση των laser παρουσιάζει αρκετά πλεονεκτήματα σε σχέση με άλλες μεθόδους κατεργασίας σε αυτούς τους τομείς και κυρίως η χρήση laser μικρής διάρκειας παλμού όπως τα femtosecond lasers.

Ένα από τα βασικά χαρακτηριστικά του laser που πρέπει να είναι γνωστά για την επίτευξη μιας μικροκατεργασίας με υψηλή ακρίβεια, είναι η ικανότητα αφαίρεσης υλικού, που έχει άμεση σχέση με τον μηχανισμό που προκαλεί την αφαίρεση του υλικού. Η ικανότητα αφαίρεσης υλικού από μια δέσμη laser, καθώς και οι κύριοι μηχανισμοί που την προκαλούν, αποτελούν σημαντικό κομμάτι της έρευνας σε αυτούς τους τομείς εδώ και καιρό. Η έρευνα αυτή, τις τελευταίες δύο δεκαετίες, δεν περιορίζεται μόνο σε πειραματικές και θεωρητικές μελέτες, αλλά και σε προσομοίωση του φαινομένου με Η/Υ.

Η παρούσα εργασία αφορά κυρίως παλμικά laser και έχει δύο στόχους. Ο ένας είναι η σύνοψη των κυριότερων μελετών, πειραματικών αλλά και προσομοιώσεων με Η/Υ, πάνω στην ικανότητα αφαίρεσης υλικών από παλμούς laser, συναρτήσει της ενέργειας της δέσμης, αλλά και γενικότερα στους κύριους μηχανισμούς που προκαλούν την εκτόξευση υλικού. Ο δεύτερος, είναι η διερεύνηση διαφόρων παραμέτρων σχετικές με την φωτοαποδόμηση με laser με βάση τις αντίστοιχες μελέτες που προαναφέρθηκαν, με προσομοίωση Η/Υ, μέσω κώδικα που έχει ήδη αναπτυχθεί σε παλαιότερες εργασίες του τομέα κατεργασιών της σχολής μηχανολόγων μηχανικών του Ε.Μ.Π.

Κεφάλαιο 2

Θεωρητική ανάλυση φωτοαποδόμησης με χρήση laser (laser ablation)

2.1 Ορισμός-Ιστορικά

Κατά τα γνωστά από τη θεωρία των Κατεργασιών με Δέσμες Μεγάλης Ενέργειας [1][2], ο όρος **LASER** αποτελεί ακρωνύμιο για τη φράση **L**ight **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation, 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 ακτινοβόληση, είτε μπορούν να ενσωματωθούν σε δέσμες χαμηλής απόκλισης ώστε να επιτευχθεί συγκέντρωση ισχύος σε μεγαλύτερη επιφάνεια.

Ήδη από το 1917 ο Albert Einstein είχε δείξει τη δυνατότητα ύπαρξης της λεγόμενης εξαναγκασμένης εκπομπής ακτινοβολίας στην οποία στηρίζεται η λειτουργία των Laser, αλλά μόλις το 1960 ο T. H. Maiman πέτυχε πρώτος τη λειτουργία Laser Ρουμπινίου. Ενώ η αυστηρή ανάλυση της Φυσικής του Laser είναι αρκετά δύσκολη, η βασική αρχή λειτουργίας και η κατασκευή του είναι σχετικά εύκολη και αυτός είναι ο λόγος που δημιουργεί την απορία γιατί καθυστέρησε στο ξεκίνημά της η εφεύρεση του Laser. Πάντως η ανάπτυξη των Laser από το 1960 και πέρα υπήρξε εκπληκτικά ραγδαία, ενώ σήμερα παρουσιάζονται νέες εφαρμογές των Laser σχεδόν καθημερινά.

Όπως προαναφέραμε, στο Laser χρησιμοποιείται το φαινόμενο της εξαναγκασμένης εκπομπής ακτινοβολίας σε διηγεμένα άτομα υλικού. Αυτό οδηγεί σε παραγωγή οπτικής ακτινοβολίας που διαφέρει δραστικά από εκείνη που εκπέμπουν οι συμβατικές πηγές φωτός, των οποίων η λειτουργία στηρίζεται στο φαινόμενο της αυθόρμητης εκπομπής ακτινοβολίας.

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 [3].

Η παραγωγή των υπέρστενων παλμών της τάξεως *picoseconds* και *femtoseconds* γίνεται δυνατή από μία τεχνική που καταδεικνύεται πρώτα στα μέσα της δεκαετίας του '60. Γύρω σε αυτή την περίοδο, η ανάπτυξη των πηγών *Laser* στερεάς κατάστασης άρχισε με το πρώτο *Laser* ιόντων - μετάλλων [46]. Το 1964 τα παραπάνω αντικαταστάθηκαν από το *Laser Nd:YAG* [47] και τα *Laser* χρωστικών ουσιών [48] (*dye Lasers*). Τη δεκαετία του '70 δημιουργήθηκαν οι πρώτοι *femtosecond* παλμοί *Laser* (~300 fs) που παρήχθησαν χρησιμοποιώντας *Laser* χρωστικών ουσιών [48][49]. Όμως, κυρίως η αναξιοπιστία αυτών των *Laser* οδήγησε σε ένα ανανεωμένο ενδιαφέρον για τα *Laser* στερεάς κατάστασης που παρήγαγαν το *Laser Alexandrite*(*Cr:BeAl2O2*) το 1979 [50] και το *Laser Ti:Sapphire* (*Ti:Al2O3*) το 1982 [51]. Κατά τη διάρκεια της δεκαετίας του '80 αναπτύχθηκαν νέα υλικά στερεάς κατάστασης ευρείας ζώνης τα οποία ανανέωσαν το ενδιαφέρον για την παραγωγή υπερβραχέων παλμών δεδομένου ότι η ευρεία εκπομπή φθορισμού τους έδινε τη δυνατότητα να υποστηριχθούν παλμοί που διαρκούν μόνο μερικά *femtoseconds*. Τα τελευταία χρόνια οι διάφορες τεχνικές εγκλειδωσης ρυθμών

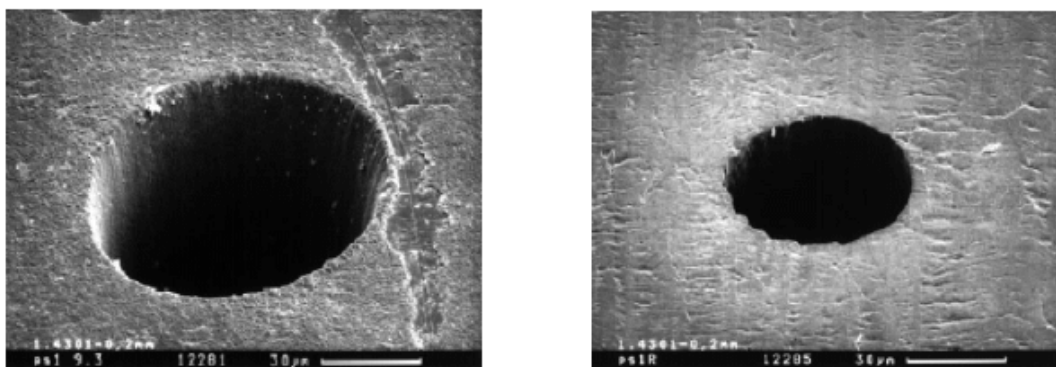
(*modelocking*) έχουν χρησιμοποιηθεί για την παραγωγή υπερβραχέων παλμών από *Ti:Sapphire*. Η σημαντικότερη τεχνική *modelocking* παρουσιάστηκε το 1991 από τους *Spence, Kean* και *Sibbett*[52][53] και ονομάστηκε *Kerr-lensmodelocking*. Η ουσιαστική διαφορά μεταξύ αυτής και των προηγούμενων καθιερωμένων τεχνικών *modelocking* είναι η απουσία ενός πρόσθετου *modelocking* στοιχείου εντός της οπτικής κοιλότητας.

Η φωτοαποδόμηση υλικών με *Laser femtosecond* χρησιμοποιεί παλμούς διάρκειας τάξης από δεκάδες έως εκατοντάδες *femtoseconds*. Κατά την διάρκεια των πρόσφατων ετών η *femtosecond* φωτοαποδόμηση έχει εξελιχθεί ταχύτατα και χρησιμοποιείται ευρέως στην κατεργασία υλικών λόγω των σημαντικών προτερημάτων σε σύγκριση με τα *Laser* μακρύτερων παλμών, όπως για παράδειγμα τα *nanosecond Laser* [56]-[58]. Επίσης ένα γεγονός που χαρακτηρίζει τους υπέρστενους παλμούς *Laser* είναι και η απορρόφησή τους από την ύλη που πραγματοποιείται σε μία κλίμακα χρόνου πολύ πιο σύντομη από την μεταφορά ενέργειας των διεγερμένων ηλεκτρονίων στο ατομικό πλέγμα (τυπικά 10 ps). Έτσι μπορεί να αποφευχθεί ουσιαστικά η επιφανειακή αποδόμηση των υλικών με τη βοήθεια ενός προστατευτικού καλύμματος προερχόμενο από το πλάσμα, γεγονός όμως που πραγματοποιείται με τη χρήση *nanosecond Laser*. Ως εκ τούτου, η χρήση *femtosecond* παλμών *Laser* έχει πολλά πλεονεκτήματα για την ακριβή επεξεργασία υλικών και βρίσκει πολλές εφαρμογές ως αποτέλεσμα της αποδοτικής ενεργειακής εναπόθεσης και ταυτόχρονης ελαχιστοποίησης της μεταφοράς θερμότητας και θερμικής ζημιάς στην περιβάλλουσα περιοχή του υλικού. Εντάσεις μεγαλύτερες από 10¹³ W/cm² τοπικά, μπορούν να επιτευχθούν εύκολα με παλμούς ενέργειας μόλις μερικών μJ, και η επεξεργασία διαφανών διηλεκτρικών να πραγματοποιηθεί μέσω της

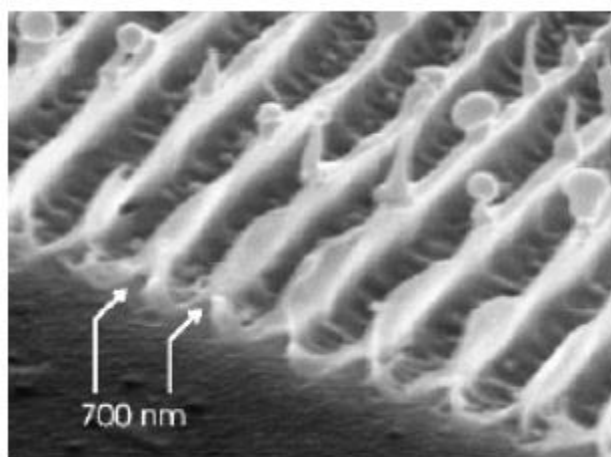
πολυφωτονικής απορρόφησης. Σύγχρονες έρευνες μελετούν τη χρήση fs παλμών *Laser* σε μια σειρά υλικών (π.χ. μέταλλα, πολυμερή σώματα, γυαλιά κλπ.) για την κατανόηση των εξαιρετικά σύντομων αλληλεπιδράσεων υλικών - *Laser* με σκοπό την εφαρμογή αυτού του νέου καθεστώτος επεξεργασίας σε ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών.

Λόγω του εξαιρετικά βραχύ παλμού των *femtosecond Laser* η διάχυση της θερμότητας είναι περιορισμένη και η ζώνη θερμικής επιρροής (*Heat Affected Zone-HAZ*) είναι ιδιαίτερα μικρή. Αυτή η υψηλά συγκεντρωμένη θέρμανση έχει σαν αποτέλεσμα την απομάκρυνση λιγότερου όγκου υλικού για κάθε κύκλο διεργασίας και συνεπώς πολύ ακριβή αποτελέσματα σε σύγκριση με αυτά που δίνουν τα *Laser* μακρύτερων παλμών.

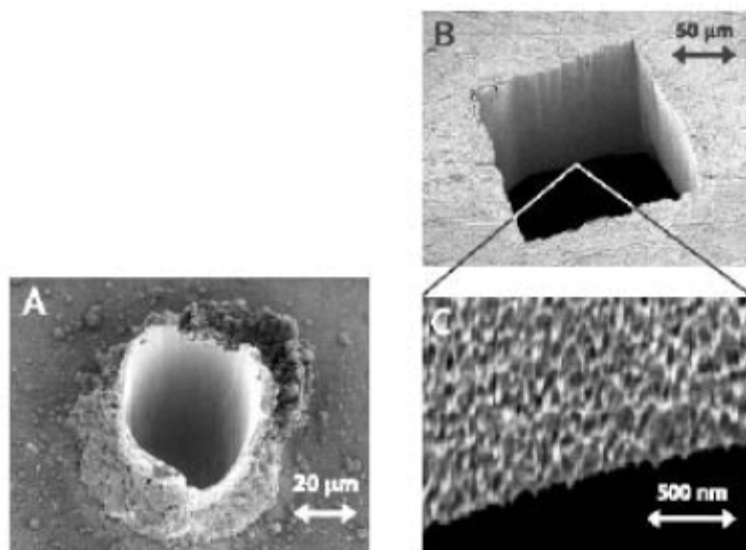
Διάφορα πειραματικά αποτελέσματα από την βιβλιογραφία παρουσιάζονται στα Σχήματα από 2.1 έως 2.4. Στην μελέτη [59] ο *Nolte et al.* χρησιμοποίησε παλμούς με διάρκεια 170 fs, 780 nm μήκος κύματος και ένταση $2.5\text{J}/\text{cm}^2$, αποσκοπώντας στη δημιουργία οπών της τάξης των 100 μm σε έλασμα χάλυβα πάχους 200 μm .



Σχήμα 2.1: SEM φωτογραφίες οπών που δημιουργήθηκαν από παλμούς με διάρκεια 170 fs, 780 nm μήκος κύματος και πυκνότητα ενέργειας $2.5\text{J}/\text{cm}^2$ σε έλασμα χάλυβα πάχους 200 μm [58][59]. Αριστερά είσοδος οπής, δεξιά έξοδος.



Σχήμα 2.2: SEM φωτογραφίες αυλακώσεων σε χρυσό με παλμούς *Laser* διάρκειας 490 fs και μήκους κύματος 248nm [60].

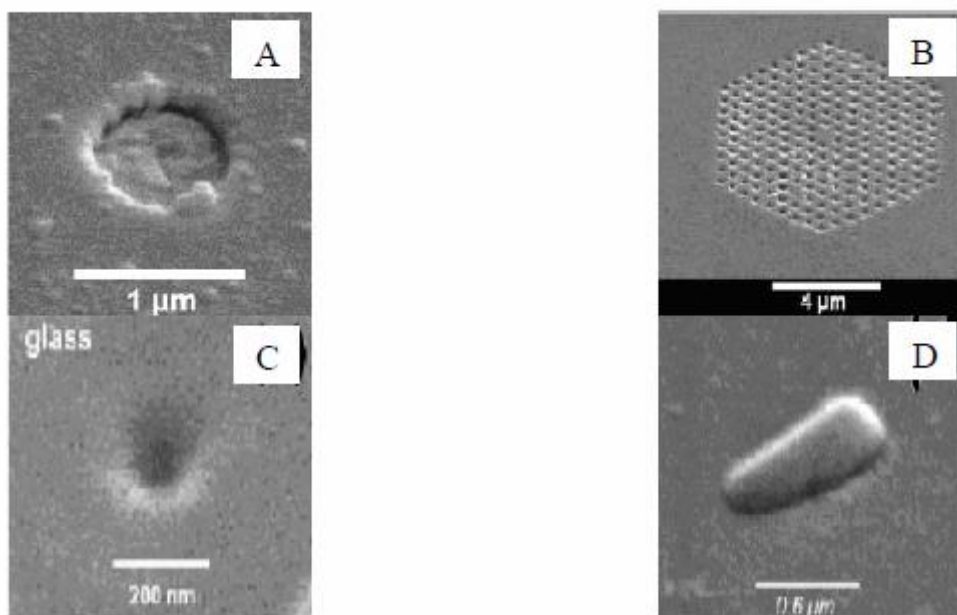


Σχήμα 2.3: SEM φωτογραφίες διεργασιών με παλμούς *Laser* διάρκειας 25 ns (A) και 120 fs (B, C) [61].

Παρομοίως στην μελέτη [60], παλμοί *Laser* διάρκειας 490 fs και μήκους κύματος 248nm χρησιμοποιήθηκαν για να παραχθούν αυλακώσεις σε χρυσό. Η μορφολογία της παραγόμενης επιφάνειας φαίνεται στο Σχήμα 2.2.

Στη μελέτη [61] δημιουργήθηκαν ορθογώνιες οπές σε χάλυβα με 120 fs *Laser* στα 248nm μήκος κύματος με αποτέλεσμα υψηλής ποιότητας μικροκατασκευές, όπως φαίνεται στα Σχήματα 2.3 B και 2.3 C

Για να υπάρξει σύγκριση μεταξύ των παραγόμενων κατασκευών, μεταξύ *femtosecond* και *nanosecond Laser* μια οπή που δημιουργήθηκε με χρήση 20ns *Laser* παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.3 A. Πρόσφατα οι μελέτες [61][62] παρουσίασαν πολλά αποτελέσματα διεργασιών με *femtosecond Laser*, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.4. Μια οπή δημιουργήθηκε σε μια στρώση χρωμίου πάχους 100nm κάνοντας χρήση παλμών διάρκειας 2 fs (Σχήμα 2.4 A). Κατεργασίες διαφανών διηλεκτρικών πραγματοποιούνται με χρήση *femtosecond Laser*. Το Σχήμα 2.4 B παρουσιάζει μια περιοδική νανο-κατασκευή σε κρύσταλλο ζαφειριού που δημιουργήθηκε από *femtosecond Laser*, με διάρκεια παλμού τα 30fs, μήκος κύματος τα 800nm και ένταση 1mJ. Δέκα παλμοί χρησιμοποιήθηκαν για την δημιουργία κάθε οπής. Ο ολικός χρόνος κατεργασίας για τις 216 οπές είναι ίσος με 30sec. Οπές με τάξη μεγέθους υπο-μικρού (*sub-micron*) έχουν δημιουργηθεί και πάνω σε επιφάνεια γυαλιού (Σχήματα 2.4 C και 2.4 D).



Σχήμα 2.4: SEM φωτογραφίες οπών που δημιουργήθηκαν από παλμούς διάρκειας fs, σε μεταλλικά (A) και διηλεκτρικά (B, C, D) υλικά.

Τα Σχήματα που παρουσιάστηκαν δείχνουν ότι τα *femtosecond Laser* παράγουν πιο ακριβή και πιο καθαρά αποτελέσματα, τα οποία δεν μπορούν να παραχθούν με χρήση συμβατικών εργαλείων ή *Laser* μακρύτερης διάρκειας παλμών. Επίσης *femtosecond Laser* μπορούν να χρησιμοποιηθούν και για τις διεργασίες σε διαφανή υλικά, όπως το γυαλί και ο ζέφυρος, τα οποία είναι πολύ δύσκολο, αν όχι αδύνατο, να υποστούν διεργασίες με ευρέως χρησιμοποιημένα άλλα *Laser*. Είναι προφανές ότι τα *femtosecond Laser* αποτελούν πανίσχυρα εργαλεία για τις κατεργασίες υλικών, ιδιαίτερα στην μικρο-κλίμακα.

2.2 Είδη laser

Τα Laser διαιρούνται σε ομάδες σύμφωνα με:

- (α) την κατάσταση του ενεργού υλικού (στερεό, υγρό, αέριο, πλάσμα)
- (β) την ζώνη μήκους κύματος (ορατό, υπέρυθρο, υπεριώδες...)
- (γ) τη μέθοδο διέγερσης του ενεργού υλικού (οπτική, ηλεκτρική,...)
- (δ) τα χαρακτηριστικά της εξερχόμενης HMA Laser
- (ε) τον αριθμό των ενεργειακών επιπέδων που παίρνουν μέρος στη διαδικασία.

Το ενεργό υλικό καθορίζει:

- το μήκος κύματος της εξερχόμενης δέσμης
- τη μέθοδο διέγερσης που ενδείκνυται
- την τάξη μεγέθους της εξερχόμενης ισχύος
- την αποδοτικότητα του συστήματος

Το ενεργό υλικό καθορίζει πολλές ιδιότητες του Laser και επί πλέον πρέπει να είναι «διαφανές» στο μήκος κύματος που το ίδιο «παράγει».

A. Τα αέρια Laser χωρίζονται σε τέσσερις υπο-ομάδες

- (i) ατομικά (π.χ. He-Ne και He-Cd)
- (ii) ατμών μετάλλου (Cu, Au)
- (iii) μοριακά (CO₂, N₂, χημικά, μακρινού υπέρυθρου, excimer)
- (iv) ιοντικά (Ar⁺, Kr⁺)

B. Τα υγρά Laser είναι κυρίως χρωστικών dye

Γ. Τα στερεά Laser χωρίζονται σε:

- (i) μονωτών (ρουβινίου, νεοδυμίου, αλεξανδρίτη, σαπφείρου)
- (ii) ημιαγωγών (διόδων)

Δ. Ειδικά Laser

- (i) ακτίνων X
- (ii) ελεύθερου ηλεκτρονίου

2.2.1. Laser αέριας κατάστασης

Τα περισσότερα αέρια (άτομα ή μόρια) μπορούν να οδηγηθούν σε κατάσταση κατάλληλη για εκπομπή ΗΜΑ Laser, κυρίως όταν βρίσκονται υπό χαμηλή πίεση.

Οι κύριοι λόγοι για τους οποίους διευκολύνει η χαμηλή πίεση είναι:

- (α) για να είναι δυνατή η ηλεκτρική εκκένωση μακράς πορείας, κατά μήκος του σωλήνα με το ενεργό υλικό, στα δυο άκρα του οποίου εμβαπτίζονται τα δύο ηλεκτρόδια.
- (β) για να παραχθεί ΗΜ φάσμα πολύ μικρού εύρους, το οποίο ευρύνεται όταν παρεμβάλλονται συγκρούσεις μεταξύ των ατόμων.

Το πρώτο αέριο Laser κατασκευάστηκε από τους Maiman TH και Javan A, το 1961, ήταν He-Ne, εξέπεμπε στο κοντινό υπέρυθρο (1152 nm). (Το πρώτο Laser ήταν ρουβινίου και είχε κατασκευαστεί ένα χρόνο νωρίτερα).

Τα αέρια Laser μπορούν να διεγερθούν με ηλεκτρική εκκένωση που προκαλείται με εφαρμογή υψηλού δυναμικού στα ηλεκτρόδια στα άκρα του σωλήνα. Ηλεκτρόνια αποσπώνται από την κάθοδο, επιταχύνονται προς την άνοδο, συγκρούονται με τα μόρια του αερίου και τους μεταδίδουν μέρος της κινητικής τους ενέργειας διεγείροντάς τα (η ίδια μέθοδος χρησιμοποιείται στις λάμπες φθορισμού).

Η οπτική άντληση ως μέθοδος διέγερσης είναι δύσκολη για τα Laser αερίου. Για να απορροφηθεί αρκετό ποσό ενέργειας απαιτείται το φάσμα απορρόφησης του υλικού να είναι παρόμοιο με το φάσμα εκπομπής της πηγής. Όμως οι κοινές πηγές φωτός έχουν ευρύ φάσμα εκπομπής, ενώ τα άτομα του αερίου απορροφούν σε «λεπτές γραμμές». Γενικά η οπτική άντληση δεν επιλέγεται για τη διέγερση του ενεργού υλικού αερίων Laser. Εξάιρεση είναι η χρήση της δέσμης Laser CO₂ για την οπτική άντληση του ενεργού υλικού του μακρινού υπέρυθρου αερίου Laser.

Αέρια ατόμων

Το ενεργό υλικό είναι ένα ευγενές αέριο σε ουδέτερη κατάσταση ή ατμοί μετάλλου.

Το ενεργό αέριο είναι αναμεμιγμένο με δεύτερο αέριο, που βοηθά στην αύξηση της απόδοσης της διαδικασίας. Για μεγαλύτερη ενίσχυση απαιτείται μικρή διάμετρος του σωλήνα. Τα αέρια Laser ατόμων συνήθως λειτουργούν με συνεχή τρόπο.

Laser He-Ne

Ήταν το πιο διαδεδομένο Laser μέχρι πριν λίγα χρόνια που εμφανίστηκε το Laser διόδων. Το ενεργό υλικό είναι το νέον (Ne) που έχει τέσσερα ενεργειακά επίπεδα.

Δύο μετασταθερά ενεργειακά επίπεδα δρουν ως άνω επίπεδα, ενώ υπάρχουν άλλα δυο που δρουν ως κάτω επίπεδα. Δηλαδή έχουμε τρία εκπεμπόμενα μήκη κύματος: $\lambda 54$, $\lambda 52$, $\lambda 32$.

Η παρουσία του αερίου He βοηθά για δύο κύριους λόγους:

(α) η απευθείας διέγερση του Ne είναι πολύ λιγότερο αποδοτική σε σχέση με το He (περίπου 1:200)

(β) το ενεργειακό επίπεδο 5 του ηλίου είναι πολύ κοντά στο αντίστοιχο 5 του νέου. Επομένως από την ηλεκτρική εκκένωση (περίπου 2000 V) τα αποσπώμενα ηλεκτρόνια συγκρούονται κυρίως με τα άτομα He τα οποία διεγείρονται και με συγκρούσεις διεγείρουν με τη σειρά τους τα άτομα του Ne (αναλογία: He ~ 85-90%, Ne ~ 10-15%).

Οι περισσότερες εφαρμογές του Laser He-Ne βασίζονται στο ορατό κόκκινο $\lambda 52$ που έχει και τη μεγαλύτερη ένταση, η οποία θα ήταν ακόμη εντονότερη αν δεν υπήρχε η αποδιέγερση $\lambda 54$ που μειώνει και αυτή (παράλληλα) τον πληθυσμό του E5.

Ειδική επικάλυψη των καθρεφτών πριμοδοτεί την ανάκλαση των $\lambda 52$ και απορροφά τα υπόλοιπα, έτσι ώστε να ενισχυθεί μόνο το επιλεγμένο μήκος κύματος.

Στο Laser He-Ne ο χρόνος ημιζωής του χαμηλού Laser ενεργειακού επιπέδου δεν είναι αρκετά σύντομος, όμως βελτιώνεται με τις συγκρούσεις. Οι συγκρούσεις πολλαπλασιάζονται όταν τα τοιχώματα του σωλήνα πλησιάζουν, επομένως η απόδοση του Laser αυξάνει όσο ο σωλήνας έχει μικρότερη διάμετρο (π.χ. 2 mm).

Laser ατμών μετάλλου

Διακρίνονται σε δύο είδη: (α) ουδέτερα (χαλκού Cu, χρυσού Au) και (β) ιοντισμένα (ηλίου-καδμίου He-Cd) και εκπέμπουν (με υψηλή απόδοση) ΗΜΑ ορατού με τη μορφή πυκνών παλμών.

Στο Laser ατμών μετάλλου ο σωλήνας είναι γεμάτος με ένα αδρανές αέριο (π.χ. νέον) και με μικρή ποσότητα του καθαρού μετάλλου, π.χ. χαλκού, που για να βρεθεί σε κατάσταση ατμών θα πρέπει να επικρατούν συνθήκες, πολύ υψηλής θερμοκρασίας. Ο σωλήνας είναι κατασκευασμένος από υλικό ιδιαίτερα ανθεκτικό σε αυτές τις θερμοκρασίες (π.χ. αλουμίνια).

Ένα κομμάτι καθαρού χαλκού εισάγεται στο μέσο του σωλήνα ο οποίος μετά γεμίζει με αέριο νέον. Εφαρμόζεται υψηλό δυναμικό στα ηλεκτρόδια στα άκρα του σωλήνα και η θερμοκρασία αυξάνει πολύ, ξεπερνώντας τους 1083 °C, σημείο τήξης του χαλκού, που αρχίζει να εξατμίζεται. Έξω από τον σωλήνα μετράται θερμοκρασία της τάξης του 1400-1500 °C.

Καθ' όλη τη διαδικασία, μικρό ποσοστό των ατόμων Cu ιοντίζεται και κινείται προς το αντίθετο ηλεκτρόδιο. Το σύνολο του ατμού ψύχεται και μετατρέπεται σε στερεό μέταλλο. Μετά από εκατοντάδες ώρες λειτουργίας το Laser πρέπει να ανανεωθεί με άλλο κομμάτι χαλκού. Στα ηλεκτρόδια εφαρμόζονται παλμοί υψηλού δυναμικού και τα επιταχυνόμενα ηλεκτρόνια συγκρούονται με τα άτομα του αερίου Cu (το ενεργό υλικό) που διεγείρονται στα (2) επιθυμητά ενεργειακά επίπεδα. Εκπέμπονται 2 ΗΜ κύματα, ένα πράσινο ($\lambda=511$ nm) και ένα κίτρινο ($\lambda=578$ nm).

Το Laser ατμών χαλκού λειτουργεί μόνον κατά παλμούς, επειδή τα δυο χαμηλά ενεργειακά επίπεδα (μετά την εκπομπή) είναι μετασταθερά, δηλαδή έχουν μακρύ χρόνο ημιζωής και λήγει πολύ σύντομα η συνθήκη της αντιστροφής πληθυσμών. Κάθε παλμός Laser διαρκεί περί τα 100 ns.

Τα Laser ατμών χαλκού βρίσκουν εφαρμογή:

- (α) ως πηγή ενέργειας για Laser χρωστικής
- (β) για φωτισμό αντικειμένων στη φωτογράφιση μεγάλης ταχύτητας (π.χ. μιας σφαίρας όπλου)
- (γ) στην ιατροδικαστική για ταυτοποίηση δακτυλικών αποτυπωμάτων και ανίχνευση ειδικών χημικών στοιχείων στον τόπο εγκλήματος: φωτίζεται ένα δείγμα και εξετάζεται ο φθορισμός του. Βοηθά ο ισχυρός παλμός Laser
- (δ) στη φωτοδυναμική θεραπεία: ειδικό φάρμακο χορηγείται στον καρκινοπαθή και το φως Laser καταστρέφει επιλεκτικά καρκινικά κύτταρα (όσα έχουν απορροφήσει το φάρμακο)
- (ε) στο εμπλουτισμό ουρανίου (^{235}U): το φυσικό ουράνιο περιέχει πολύ μικρή ποσότητα ^{235}U . Με το Laser χαλκού είναι δυνατός ο επιλεκτικός ιοντισμός μόνο του ^{235}U και η συλλογή του σε ηλεκτρικά φορτισμένες πλάκες.

Στο εμπόριο η ισχύς των Laser χαλκού φτάνει μέχρι 100 W, αλλά σε ειδικά εργαστήρια έχει φτάσει και 6000 W.

Το Laser ατμών χρυσού έχει πολλά στοιχεία και ιδιότητες κοινά με το Laser χαλκού. Το Laser χρυσού εκπέμπει στο κόκκινο ($\lambda=628$ nm).

Ηλίου Καδμίου

Το Laser ηλίου-καδμίου περιέχει-βασίζεται στο μέταλλο κάδμιο, η λειτουργία του όμως είναι παρόμοια με τη λειτουργία του Laser He-Ne. Τα ελαφρά ιοντισμένα άτομα καδμίου δίνουν πολλά εκπεμπόμενα μήκη κύματος Laser στην περιοχή του ιώδους και του υπεριώδους. Η κύρια εφαρμογή τους είναι στην οπτική, ειδικότερα στην ολογραφία

Αέρια ιόντων

Τα πιο κοινά είναι τα ιόντα των ευγενών αερίων αργόν (Ar^+) και κρυπτόν (Kr^+). Ο σωλήνας π.χ. του πρώτου περιέχει αέριο αργόν που μετατρέπεται σε πλάσμα όταν διεγερθεί. Πλάσμα είναι η κατάσταση της ύλης κατά την οποία τα ηλεκτρόνια είναι αποσπασμένα από τα άτομα ή τα μόρια και συμπεριφέρονται ως ελεύθερα. Το θεμελιώδες ενεργειακό επίπεδο του ιόντος Ar είναι ψηλότερο από το αντίστοιχο θεμελιώδες του ατόμου Ar . Η «χαμένη» αυτή ενέργεια που πρέπει να ξοδευτεί είναι η αιτία της μικρής απόδοσης του Laser Ar^+ .

Τα βασικά μήκη κύματος του Laser Ar^+ είναι ένα μπλε ($\lambda=0,488 \mu m$) και ένα πράσινο ($\lambda=0,515 \mu m$), υπάρχουν όμως και δυο υπεριώδη.

Από τις ελκυστικές εφαρμογές του Laser Ar^+ είναι η δημιουργία οπτικών εφέ για τέχνη και διασκέδαση, επειδή ήταν το μόνο Laser με πολλά χρώματα με αξιόλογη ισχύ (μερικά W).

Η συσκευή Laser Ar^+ απαιτεί μεγάλη πυκνότητα ρεύματος ($100-500 A/cm^2$), (επομένως και στενό σωλήνα) και συνεχές δυναμικό μερικών εκατοντάδων Volts. Παράγονται μεγάλα ποσά θερμότητας, που καθιστούν απαραίτητη την ύπαρξη συστημάτων ψύξης και ανθεκτικών υλικών κατασκευής (οξείδιο βυρηλίου). Όποιος δουλεύει με Laser αργού πρέπει να μην παραλείπει ειδικά μέτρα προστασίας (π.χ. ειδικά γυαλιά).

Τα Laser Ar^+ βρίσκουν εφαρμογή:

- (α) ως πηγή ενέργειας για Laser χρωστικής
- (β) στη διασκέδαση (π.χ. δισκοτέκ)
- (γ) στη γενική χειρουργική (απορρόφηση ενέργειας σε συγκεκριμένα μήκη κύματος)
- (δ) στην οφθαλμολογία (στην αποκόλληση του αμφιβληστροειδή)
- (ε) στην τοξικολογία – ιατροδικαστική (μετρήσεις με φθορισμό υλικών)
- (στ) στην ολογραφία (επειδή έχει αρκετή ισχύ στο ορατό μέρος του φάσματος)

Το Laser Kr^+ έχει παρόμοιο τρόπο δημιουργίας και ιδιότητες, αλλά ακόμη χαμηλότερη απόδοση και ισχύ εξόδου της τάξης των 100 mW.

Η κύρια εφαρμογή του είναι στη διασκέδαση (φανταστικά οπτικά εφέ στην περιοχή του κίτρινου-κόκκινου).

Αέρια μορίων

Κατά την μέχρι τώρα ανάλυση των ειδών Laser η δημιουργία της δέσμης Laser βασιζόταν στη μεταπήδηση ηλεκτρονίων μεταξύ διαφορετικών κύριων ενεργειακών επιπέδων.

Στα μόρια όμως, τα κύρια ενεργειακά επίπεδα υποδιαιρούνται και σε ενεργειακά επίπεδα ταλάντωσης-δόνησης, το καθένα των οποίων υποδιαιρείται και σε ενεργειακά επίπεδα περιστροφής.

Τα επίπεδα ταλάντωσης-δόνησης σχετίζονται με την ταλάντωση των ατόμων γύρω από μια θέση ισορροπίας μέσα στο μόριο.

Τα επίπεδα περιστροφής σχετίζονται με την περιστροφή του μορίου στο χώρο.

Εφόσον πρόκειται για υποδιαιρέσεις, οι ενεργειακές διαφορές μεταξύ τους είναι πολύ μικρότερες και το Laser που δημιουργούν έχει μεγάλο μήκος κύματος, συνήθως στην περιοχή του υπέρυθρου.

Laser CO2

Χαρακτηριστικό παράδειγμα αυτής της κατηγορίας είναι το Laser CO2. Το CO2 είναι το ενεργό υλικό και δω όμως προστίθενται, άλλα αέρια που αυξάνουν την αποδοτικότητα της συσκευής: N2 (άζωτο) και He, η αναλογία των οποίων εξαρτάται από τον μηχανισμό διέγερσης και το είδος της λειτουργίας (π.χ. συνεχής).

Το μόριο του CO2 παρουσιάζει τρεις δυνατούς τρόπους ταλάντωσης-δόνησης:

- (α) τον συμμετρικό (κατά μήκος του άξονα του επιμήκους μορίου) με συχνότητα ν_1
- (β) τον με κάμψη (σε διεύθυνση κάθετη ως προς τον άξονα) με συχνότητα ν_2
- (γ) τον ασύμμετρο (όπως ο πρώτος τρόπος αλλά με διαφορετική κατεύθυνση) με συχνότητα ν_3

Η αποδιέγερση που δημιουργεί την HMA Laser, ξεκινά από υψηλό ενεργειακό επίπεδο του τρίτου τρόπου και καταλήγει σε έναν από τους άλλους δύο. Επειδή κάθε ενεργειακό επίπεδο ταλάντωσης-δόνησης υποδιαιρείται σε επίπεδα περιστροφής, οι μεταπηδήσεις είναι -κάθε φορά- πολλαπλές.

Η ηλεκτρική εκκένωση στο σωλήνα του Laser CO2 επιταχύνει ηλεκτρόνια των οποίων η κινητική ενέργεια μεταφέρεται σε συγκρούσεις στα μόρια του N2 και του CO2. Τα μόρια του N2 βοηθούν τη διαδικασία διέγερσης των CO2. Τα μόρια/άτομα He βοηθούν κυρίως στην απομάκρυνση των «ενοχλητικών» ποσών θερμότητας (έχουν ειδική θερμότητα 5 φορές μεγαλύτερη από την αντίστοιχη του N2).

Τυπική αναλογία αέριων όγκων: 10% CO2, 10 % N2 και 80% He.

Υπάρχουν διάφοροι τύποι Laser CO2:

- (i) συνεχούς ροής/τροφοδοσίας, που επιλέγεται όταν απαιτείται ισχύς (μερικές εκατοντάδες Watts)
- (ii) σφραγισμένου αερίου, που απαιτεί την ύπαρξη καταλύτη, επειδή με το χρόνο το CO2 διασπάται σε CO + O2. Ισχύς < 200 Watts. Σύγχρονα Laser αυτής της κατηγορίας διεγείρονται με ραδιοκύματα και αποδεικνύονται φθηνά και αξιόπιστα.
- (iii) Έχουν κατασκευασθεί Laser CO2 με σωλήνα διαμέτρου 1 mm, ώστε το ΗΜ κύμα να κινείται κατά μήκος του με πολύ μικρές απώλειες.

Η ροή του αερίου και η διεύθυνση της εφαρμοζόμενης υψηλής τάσης μπορεί να είναι κάθετες στον άξονα του σωλήνα, οπότε η ψύξη του μίγματος είναι αποτελεσματικότερη και η εξερχόμενη ισχύς Laser πολύ μεγαλύτερη (της τάξης των 10 kWatts), ακόμη και με μεγάλες πιέσεις των αερίων στο εσωτερικό.

Η ακτινοβολία από το Laser CO₂ συνήθως είναι συνεχής.

Ενώ θεωρούμε ότι τα Laser είναι αποτέλεσμα τεχνολογίας, επιστήμονες ανακάλυψαν CO₂ Laser που υπάρχει στη φύση. Μπορεί να δημιουργηθεί αντιστροφή πληθυσμών κάτω από πολύ ειδικές συνθήκες, όπως στην καυτή ατμόσφαιρα (ενεργό υλικό) του πλανήτη Αφροδίτη. Το φως του ήλιου διεγείρει μόρια της ατμόσφαιρας που αποδιεγειρόμενα μπορεί να καταλήγουν σε μετασταθερά ενεργειακά επίπεδα. Αν τα μόρια αυτά διαθέτουν και κατάλληλο «χαμηλό» επίπεδο, το ποσό της εκπεμπόμενης ΗΜΑ θα είναι τεράστιο. Μόνο που η ακτινοβολία δεν θα έχει κατευθυντικότητα, αλλά θα διαδίδεται προς όλες τις κατευθύνσεις στο χώρο.

Παρόμοιο στη λειτουργία και τις ιδιότητες είναι και το Laser CO, με μόνη (τη σημαντική) διαφορά ότι το αέριό του είναι δηλητηριώδες και επικίνδυνο, ενώ το CO₂ δεν έχει καμία τοξικότητα.

Laser N₂

Και σε αυτό το Laser, το ενεργό υλικό άζωτο μπορεί να έχει συνεχή παροχή ή μπορεί ο σωλήνας του να είναι σφραγισμένος.

Διεγείρεται με ηλεκτρικό παλμό και η Laser ακτινοβολία προκύπτει από μεταπηδήσεις μεταξύ ενεργειακών επιπέδων ταλάντωσης-δόνησης. Βραχείς παλμοί υψηλής τάσης (30-40 kV) προκαλούν ηλεκτρική εκκένωση και στιγμιαία αντιστροφή πληθυσμών.

Το Laser αζώτου είναι Laser παλμών. Ο χρόνος ημιζωής του ανώτερου «Laser» επιπέδου είναι μικρότερος από τον χρόνο του κατώτερου επιπέδου. Η ενίσχυση της ακτινοβολίας μέσα στο σωλήνα είναι τόσο αποδοτική που με μήκος σωλήνα ενός μέτρου δεν θα χρειαζόταν να τον επαναδιασχίζει, δηλαδή οι καθρέφτες δεν είναι απαραίτητοι. Στην πράξη υπάρχει μόνο ο «πίσω» καθρέφτης με την 100% ανακλαστικότητα.

Το Laser N₂ εκπέμπει στην υπεριώδη περιοχή, είναι απλό και φθινό. Η ακτινοβολία του δίνει μερικά mJ ανά παλμό, με διάρκεια παλμού της τάξης των ns και πυκνότητα περίπου 1000 Hz.

Εφαρμογές του Laser N₂:

- (α) προσφορά ενέργειας για τη διέγερση Laser χρωστικής
- (β) φασματοσκοπία υπεριώδους
- (γ) αντοχή υλικών στη θερμότητα

(δ) μέτρηση φθορισμού υλικών

(ε) μέτρηση πολύ ταχέων διαδικασιών (φωτογράφιση με βραχείς παλμούς)

Laser (διεγερμένων) διμερών (excimer)

Υπάρχει μια οικογένεια Laser των οποίων η ακτινοβολία εκπέμπεται από ένα μόριο με πολύ σύντομη ζωή. Αποτελείται από ένα άτομο ευγενούς αερίου (Ar, Kr, Xe) και ένα άτομο αλογόνου (F, Cl, Br, I). Το μόριο αυτό υπάρχει μόνο σε διεγερμένη κατάσταση. Όταν αποδιεγερθεί, τα άτομα διαχωρίζονται. Η διεγερμένη κατάσταση διαρκεί περίπου 10 ns. Excimer είναι ο συνδυασμός των λέξεων excited και dimmer, δηλαδή ένα μόριο, δύο άτομα, κατάσταση διεγερμένη.

Τα ευγενή αέρια είναι αδρανή και δεν συνδέονται χημικά με ίδια ή άλλα άτομα, τουλάχιστον στη θεμελιώδη κατάσταση. Αν όμως δεχθούν σημαντική ποσότητα ενέργειας και ανέβουν σε ένα διεγερμένο (ιοντισμένο) ενεργειακό επίπεδο, δημιουργούνται οι συνθήκες για συνδέσεις. Καθώς από το μόριο εκπέμπεται ακτινοβολία (Laser σε αυτές τις περιπτώσεις), τα άτομα επανέρχονται στη βασική ενεργειακή κατάσταση, δηλαδή τα άτομα γίνονται πάλι ανεξάρτητα. Επομένως σαν μόριο έχει ένα διεγερμένο ενεργειακό επίπεδο με κάποιο πληθυσμό και ένα θεμελιώδες επίπεδο χωρίς καθόλου πληθυσμό. Δηλαδή, αμέσως με τη διέγερση υπάρχει και αντιστροφή πληθυσμών.

Για τη λειτουργία του Laser excimer έχει βρεθεί πως ο σωλήνας πρέπει να περιέχει:

- πολύ λίγο αλογόνο (π.χ. από HCl, NF₃)
- λίγο αδρανές αέριο (αργό, κρυπτό ή ξένο)
- σχεδόν 90% νέον ή ήλιον

Η διέγερση γίνεται με σύντομους παλμούς ηλεκτρικής ισχύος ως μερικά MW/cm³.

Η απόδοση είναι σημαντική ακόμη και χωρίς καθρέφτες. Χρησιμοποιείται όμως ο 100% ανακλών πίσω καθρέφτης. Τα αέρια μέσα στο σωλήνα είναι τοξικά, άρα ο σωλήνας του Laser σφραγίζεται καλά μετά την πλήρωσή του. Το excimer Laser εκπέμπει στο υπεριώδες και μόνο με βραχύχρονους παλμούς. Η εξερχόμενη ισχύς φτάνει τα 100 W. Είναι σχετικά ακριβό. Το excimer Laser έχει συμπυκνωμένη ενέργεια και χρησιμοποιείται ως κοπτικό εργαλείο για σχεδόν όλα τα υλικά.

Έχει επίσης εφαρμογή

(α) στην φωτολιθογραφία (πολύ μεγάλη ακρίβεια)

(β) στην κοπή βιολογικού ιστού (δεν επηρεάζονται γειτονικά κύτταρα)

(γ) στην διορθωτική της όρασης (αλλαγή της καμπυλότητας του κερατοειδή)

(δ) σημάδεμα οποιουδήποτε υλικού (πλαστικό, γυαλί, μέταλλο) (επειδή η ακτινοβολία του μικρού μήκους κύματος απορροφάται από την ύλη).

Χημικό Laser

Είναι παράδειγμα συσκευής Laser της οποίας η ενέργεια για τη διέγερση του ενεργού υλικού προέρχεται από χημική αντίδραση μεταξύ δύο ατόμων.

Ανήκει στην οικογένεια των δυναμικών Laser με αέριο, των οποίων η λειτουργία βασίζεται στην ταχεία εκτόνωση θερμού αερίου υπό πίεση, καθώς περνά σε σχεδόν κενό θάλαμο μέσω ειδικής βελόνας. Η ταχεία εκτόνωση ψύχει το αέριο. Η εκτόνωση είναι ταχύτερη από την αποδιέγερση, επομένως μεσολαβεί κατάσταση διεγερμένων μορίων σε χαμηλή θερμοκρασία, δηλαδή συνθήκη αντιστροφής πληθυσμών.

Το αέριο του σωλήνα μπορεί να περνά από πολλές βελόνες ταυτόχρονα προς τον κενό θάλαμο, αυξάνοντας σημαντικά την απόδοση του Laser. Οι βελόνες συνήθως τοποθετούνται στην παράπλευρη επιφάνεια του σωλήνα και με διεύθυνση κάθετη προς τον κύριο άξονα.

Το ενεργό υλικό είναι διατομικό μόριο και οι μεταπηδήσεις γίνονται μεταξύ ενεργειακών επιπέδων ταλάντωσης-δόνησης. Το πιο συνηθισμένο είναι το υδροφθόριο (HF) ή σπανιότερα το φθοριούχο δευτέριο (DF) και το υδροχλώριο (HCl). Εκπέμπουν στην υπέρυθη ζώνη.

Ως πηγή υδρογόνου χρησιμοποιούνται υδρογονάνθρακες.

Φθοριούχο θείο (SF₆) ή φθοριούχο άζωτο (NF₃) χρησιμεύουν ως πηγή φθορίου.

Στα χημικά Laser του εμπορίου προστίθεται οξυγόνο για να αντιδράσει με το θείο και να δώσουν μόρια SO₂. Στο μίγμα προστίθεται και ήλιον, ίσως και άλλα αέρια, ανάλογα με τον συγκεκριμένο τύπο του Laser. Παρόλα αυτά, η συνολική πίεση στο εσωτερικό του Laser χαρακτηρίζεται χαμηλή.

Το χημικό Laser, έχει μεγάλη ισχύ στην έξοδο και γίνεται καλύτερη εκμετάλλευση στο Laser DF (σε σχέση με το HF) επειδή η ατμόσφαιρα είναι πιο διαφανής στη συγκεκριμένη συχνότητα.

Μειονεκτήματα είναι ότι το δευτέριο είναι ακριβό, το φθόριο αντιδρά πολύ εύκολα με άλλα μόρια και το υδρογόνο θέλει προσοχή για να μην εκραγεί.

Στα χημικά Laser του εμπορίου εφαρμόζεται δυναμικό περίπου 8kV και σε μερικά προηγείται έκθεση του αερίου σε HMA υπεριώδους για να προ-ιοντιστεί και να αυξηθεί η απόδοση της συσκευής.

Τα χημικά Laser βρίσκουν εφαρμογή στο στρατιωτικό πεδίο, όπως το εξελιγμένο μέσο-υπέρυθρο (MIRACL, Mid Infra Red Advanced Chemical Laser) σχεδιασμένο να καταστρέφει εχθρικούς πυραύλους στον αέρα (συνεχές Laser ισχύος μέχρι 2 MW και

διάρκειας της τάξης του λεπτού). Μπορεί να ακολουθήσει τα ίχνη τους (με τη βοήθεια υπολογιστών) ακόμη και για 50 km.

Ακόμη μικρότερου μήκους κύματος (~1 μm) είναι το Laser COIL Chemical Oxygen Iodine Laser) (χημικό Laser ιωδίου οξυγόνου), που χρησιμοποιείται επίσης για στρατιωτικούς σκοπούς.

Laser μακρινούπέρυθρου (FIR, Far Infra Red)

Είναι επίσης Laser αερίου και έχει μήκος κύματος μέχρι και 1000 μm (~1 mm). Οι μεταπηδήσεις συμβαίνουν μεταξύ των υπο-επιπέδων περιστροφής των μορίων του ενεργού υλικού, συνήθως του ίδιου επιπέδου ταλάντωσης-δόνησης. Το ενεργό υλικό είναι ένα απλό, οργανικό μόριο, όπως C_2H_4 , CF_4 , NH_3 , με πολύ λεπτά ενεργειακά επίπεδα. Η αντιστροφή πληθυσμών επιτυγχάνεται με Laser μικρότερου μήκους κύματος, όπως το CO_2 .

Επειδή το Laser που προσφέρει την ενέργεια δρα κατά μήκος του άξονα στο σωλήνα, το υλικό του καθρέφτη στο τέλος της διαδρομής πρέπει να είναι διαφανές π.χ. στο CO_2 και μη διαφανές στο Laser του ενεργού υλικού, το οποίο παγιδεύεται και ενισχύεται μετά από πολλές εσωτερικές διαδρομές.

2.2.2. Laser στερεής κατάστασης

Τα άτομα στη στερεά κατάσταση βρίσκονται πολύ κοντά μεταξύ τους και αλληλοεπιδρούν. Γι' αυτό το εύρος των γραμμών στα φάσματα εκπομπής και απορρόφησης είναι σημαντικά μεγαλύτερο από το αντίστοιχο των αερίων.

Ευρύ φάσμα απορρόφησης σημαίνει πως η προσφορά ενέργειας μπορεί να γίνει από πηγή φωτός και μάλιστα όχι απαραίτητα Laser.

Το ενεργό υλικό στο Laser στερεής κατάστασης είναι ένα συγκεκριμένο υλικό, όπου όμως έχει γίνει έγχυση άλλου υλικού με τη μορφή ιόντων. Τα ιόντα του υλικού πρόσμιξης αντικαθιστούν άτομα του υλικού βάσης και είναι αυτά που παρέχουν τα κατάλληλα ενεργειακά επίπεδα για τη μεταπήδηση Laser. Το υλικό βάσης επηρεάζει λίγο το μήκος κύματος της HMA εκπομπής. Το ίδιο υλικό πρόσμιξης σε δύο διαφορετικά υλικά βάσης έχει ως αποτέλεσμα παρόμοια HMA Laser. Το υλικό βάσης καθορίζει όμως τις φυσικές ιδιότητες του ενεργού υλικού, όπως θερμοχωρητικότητα, διαστολή και επομένως τη μέγιστη δυνατή εκπεμπόμενη ισχύ.

Το στερεό ενεργό υλικό που διεγείρεται με οπτική ακτινοβολία είναι κρύσταλλος ή γυαλί, συνήθως σε σχήμα κυλινδρικό ή παραλληλεπίπεδο. Η ενέργεια εισέρχεται από την παράπλευρη επιφάνεια, ενώ η HMA Laser εξέρχεται από μια από τις βάσεις.

Η προσφερόμενη ενέργεια για εκπομπή Laser με παλμούς είναι συνήθως από λάμπες ξένου ή κρυπτού χαμηλής πίεσης.

Η προσφερόμενη ενέργεια για εκπομπή συνεχούς Laser είναι συνήθως από λάμπες αλογόνου ή υδραργύρου υψηλής πίεσης. Τα τελευταία χρόνια εξελίχθηκε και η τεχνολογία των Laser διόδων τα οποία έχουν εφαρμογή και στην προσφορά ενέργειας για Laser στερεάς κατάστασης, επειδή το μήκος κύματος των Laser διόδων μπορεί να προσαρμοστεί και να ταιριάζει στο φάσμα απορρόφησης του ενεργού (στερεού) υλικού.

Laser ρουβινίου

Πρωτοκατασκευάστηκε το 1960. Το ρουβίνιο είναι ένας συνθετικός κρύσταλλος οξειδίου του αλουμινίου (Al_2O_3) και είναι περισσότερο γνωστό ως πολύτιμος λίθος. Καλείται και σάφειρος (ζαφείρι). Το ρουβίνιο υφίσταται έγχυση ιόντων χρωμίου (Cr^{+3}) -ως πρόσμιξη- που αντικαθιστούν άτομα Al.

Μια λάμπα ξέnon προσφέρεται ενέργεια στο ενεργό υλικό και τα ιόντα Cr απορροφούν μήκη κύματος της περιοχής 500-600 nm και μεταβαίνουν στο ενεργειακό επίπεδο E3, από το οποίο, αποδιεγείρομενα «πέφτουν» στο μετασταθερό επίπεδο E2 χωρίς εκπομπή ακτινοβολίας, αλλά με δονήσεις που μετατρέπονται σε θερμότητα. Ο χρόνος ημιζωής του E2 είναι 5 ms.

Το Laser ρουβινίου είναι τριών επιπέδων και άρα δύσκολο να εκπέμψει συνεχή ακτινοβολία. Η λάμπα ενεργοποίησης φορτίζεται με ειδικό πυκνωτή που εκφορτίζεται για μερικά μsec. Επομένως και η διάρκεια των Laser (ερυθρών) παλμών του ρουβινίου θα είναι της ίδιας τάξης μεγέθους.

Τα παραγόμενα φωτόνια εξαναγκάζονται από τους καθρέφτες και διασχίζουν το ενεργό υλικό μπρος-πίσω πολλές φορές, αυτο-πολλαπλασιαζόμενα. Όσα όμως φωτόνια παρεκκλίνουν της παράλληλης προς τον κύριο άξονα πορείας, απορροφώνται από το υλικό της παράπλευρης επιφάνειας.

Η ράβδος – ενεργό υλικό – του Laser ρουβινίου μπορεί να έχει διάμετρο από 0,6-2,0 cm και μήκος από 7-20 cm.

Laser νεοδυμίου

Τα ιόντα νεοδυμίου Nd^{+3} προστίθενται ως προσμίξεις και αντικαθιστούν άτομα τριών (βασικά) στερεών σωμάτων.

- ύαλος
- YAG (Yttrium Aluminum Garnet) κρύσταλλος
- YLF ($LiYF_4$) κρύσταλλος

(α) Ο ύαλος (γυαλί) προτιμάται όταν η εφαρμογή απαιτεί ισχυρούς και αραιούς παλμούς. Το ενεργό υλικό μπορεί να έχει μορφή δίσκου ή κυλίνδρου, διαμέτρου ακόμα και μισού μέτρου και μήκους αρκετών μέτρων, επειδή το γυαλί είναι ισότροπο υλικό και εύκολο στη διαμόρφωση του επιθυμητού σχήματος. Μειονέκτημα της υάλου είναι η μικρή της θερμο-αγωγιμότητα, δηλαδή είναι δύσκολη η απομάκρυνση των παραγόμενων ποσών θερμότητας.

(β) Για συχνούς παλμούς προτιμάται ο κρύσταλλος YAG με μεγαλύτερη θερμική αγωγιμότητα, αλλά οι διαστάσεις του είναι περιορισμένες (διάμετρος μέχρι 15 mm και μήκος μέχρι 30 cm) και η τιμή του υψηλή.

Laser Αλεξανδρίτη (Cr+3: BeAl₂O₄)

Ο κρύσταλλος είναι BeAl₂O₄ και έχει προσμίξεις ιόντων Cr⁺³. Η ενεργειακή του διάταξη μοιάζει με την αντίστοιχη του ρουβινίου. Μπορεί όμως να λειτουργήσει είτε ως Laser τριών επιπέδων στα 680 nm είτε ως Laser τεσσάρων επιπέδων στα 720-800 nm.

Με τις προσμίξεις του χρωμίου ο κρύσταλλος γίνεται ασύμμετρος και ουσιαστικά δημιουργείται πηγή ταλαντώσεων-δονήσεων με αποτέλεσμα το Laser Αλεξανδρίτη (όπως και του σαπφείρου-τιτανίου) να μπορεί να εκπέμψει πολλά συνεχόμενα μήκη κύματος. Με ειδικό φίλτρο (π.χ. ένα πρίσμα) στην έξοδο της οπτικής κοιλότητας, επιλέγεται κάθε φορά το ένα μήκος κύματος, το κατάλληλο για κάθε εφαρμογή.

Laser τιτανίου – σαπφείρου

Το υλικό βάσης είναι κρύσταλλος σάπφειρος (Al₂O₃) και οι προσμίξεις είναι ιόντα Ti⁺³, που αντικαθιστούν άτομα Al.

Εκπέμπουν συνεχές ή παλμικό Laser στην περιοχή του εγγύς υπέρυθρου και συχνά οι χρήστες τα προτιμούν από τα Laser χρωστικών (dye Lasers), επειδή είναι πιο αξιόπιστα και εύκολα στους χειρισμούς. Με κατάλληλη ρύθμιση εκπέμπουν και στο ορατό. Η προσφορά ενέργειας γίνεται συνήθως με οπτική άντληση με άλλο Laser - όπως π.χ. Laser Ar⁺ - και έχει πολύ καλή απόδοση.

Τα χρησιμοποιούν σε ερευνητικά εργαστήρια και ειδικότερα στη φασματοσκοπία. Βοηθούν όμως και στη μέτρηση υδρατμών και αερολυμάτων στην ατμόσφαιρα, όπως και στη μελέτη των επιπτώσεών τους.

Με προσεκτική ενίσχυση μπορούν να δώσουν παλμούς Laser ισχύος και μέχρι 1012 W και διάρκειας ως 10-15 sec, επαλαμβανόμενους με 10 Hz.

2.2.3. Laser διόδων (ημιαγωγοί-έγχυση)

Καλούνται και (α) Laser ημιαγωγών από το υλικό κατασκευής τους, (β) Laser επαφής εξαιτίας της ζώνης επαφής p-n και (γ) Laser έγχυσης επειδή το εφαρμοζόμενο δυναμικό εγχύει ηλεκτρόνια στη ζώνη της επαφής.

Είναι τα πλέον διαδεδομένα στο εμπόριο. Χρησιμοποιούνται σε ποικιλία καταναλωτικών προϊόντων: compact disks, Laser printers, bar code scanners και γενικά στην «οπτική επικοινωνία».

Σύντομη υπενθύμιση:

Τα στερεά σώματα χωρίζονται σε τρεις ομάδες:

(α) οι μονωτές, μέσα από τους οποίους το ηλεκτρικό ρεύμα περνά πολύ δύσκολα (χαλαζία, διαμάντι, ρουβίνιο, πλαστικό)

(β) οι αγωγοί, οι οποίοι άγουν πολύ εύκολα το ηλεκτρικό ρεύμα (όλα τα μέταλλα)

(γ) οι ημιαγωγοί με «ενδιάμεση» απόδοση στη δίοδο του ηλεκτρικού ρεύματος (γερμάνιο Ge, πυρίτιο Si, GaAs, InP, GaAlAs). Η αγωγιμότητα στους ημιαγωγούς αυξάνεται με την θερμοκρασία, ενώ στους αγωγούς μειώνεται.

Η πολυπλοκότητα στα ενεργειακά επίπεδα – ενεργειακές ζώνες

Τα άτομα ή τα μόρια των αερίων έχουν μεταξύ τους μεγάλες αποστάσεις και μπορούν να θεωρηθούν ως ενεργειακά μεμονωμένα. Με παρόμοια θεώρηση, μεμονωμένες ενεργειακά βρίσκονται και οι προσμίξεις – άτομα ενός υλικού μέσα σε ένα στερεό σώμα. Σε ένα αέριο τα ενεργειακά επίπεδα είναι καλά διαχωρισμένα μεταξύ τους. Τα ηλεκτρόνια όμως ενός ημιαγωγού ανήκουν σε ευρείες ζώνες ενέργειας, κάθε μια εκ των οποίων περιέχει πολλά ενεργειακά επίπεδα.

Αυτές οι ζώνες ενέργειας ανήκουν σε ολόκληρο το υλικό και δεν σχετίζονται με μεμονωμένα άτομα. Το εύρος της ζώνης αυξάνεται όταν η απόσταση μεταξύ των ατόμων μειώνεται και η αλληλεπίδραση των γειτονικών ατόμων αυξάνεται.

Οι ενεργειακές ζώνες είναι δύο ειδών:

(i) η ζώνη σθένους (τα ηλεκτρόνια αυτής της ζώνης είναι «δεμένα» στα άτομα)

(ii) η ζώνη αγωγιμότητας (τα ηλεκτρόνια αυτής της ζώνης κινούνται ελεύθερα μέσα στο υλικό)

Η απόσταση που χωρίζει τις δυο αυτές ζώνες καλείται «ενεργειακό κενό», επειδή δεν μπορεί να υπάρχουν ηλεκτρόνια με ενέργεια αυτής της ενδιάμεσης περιοχής. Αν κάποιο ηλεκτρόνιο της «κάτω» ζώνης σθένους αποκτήσει πρόσθετη ενέργεια, θα προσπεράσει το κενό και θα φτάσει στη ζώνη αγωγιμότητας. Μόνον εάν υπάρχουν ηλεκτρόνια στη ζώνη αγωγιμότητας μπορεί το ηλεκτρικό ρεύμα να διαπεράσει το υλικό. Το ενεργειακό κενό στα υλικά-μονωτές είναι πολύ μεγάλο και δύσκολα περνούν ηλεκτρόνια στη ζώνη αγωγιμότητας. Στα υλικά-αγωγούς οι δυο ζώνες κατά ένα μέρος αλληλοεπικαλύπτονται. Ουσιαστικά δεν υπάρχει κενό και τα ηλεκτρόνια με λίγη πρόσθετη ενέργεια άγουν το ηλεκτρικό ρεύμα. Οι ημιαγωγοί βρίσκονται στην ενδιάμεση κατάσταση. Μερικά υλικά άγουν ακόμη και σε θερμοκρασία δωματίου. Όμως γενικά, όσο αυξάνεται η θερμοκρασία τόσο αυξάνεται και ο πληθυσμός της ζώνης αγωγιμότητας. Όταν ένα ηλεκτρόνιο εγκαταλείπει τη ζώνη σθένους για να «ανέβει» στη ζώνη αγωγιμότητας, στη ζώνη σθένους μένει-δημιουργείται μια οπή. Οι οπές έχουν συμπεριφορά θετικών φορτίων κινούμενων στη ζώνη σθένους όταν εφαρμοσθεί ηλεκτρικό δυναμικό. Στη διαδικασία της αγωγιμότητας μετέχουν και τα ηλεκτρόνια της ζώνης αγωγιμότητας, και

οι οπές της ζώνης σθένους. Για τον έλεγχο του είδους και της πυκνότητας των φορέων φορτίου σε έναν ημιαγωγό, προστίθενται προσμίξεις ουδέτερων ατόμων.

Προσμίξεις

Σε ένα «καθαρό» ημιαγωγίμο υλικό η θέση και η απόσταση των ζωνών ενέργειας καθορίζονται από το υλικό. Προσθέτοντας υλικό πρόσμιξης με δικούς του φορείς φορτίων, εμφανίζονται νέα ενεργειακά επίπεδα στο ενεργειακό κενό.

Εάν το υλικό πρόσμιξης περιέχει περισσότερα ηλεκτρόνια από το βασικό υλικό, οι επιπλέον φορείς φορτίου είναι αρνητικοί (ηλεκτρόνια) και το υλικό-σύνολο καλείται ημιαγωγός «τύπου n, δότης». Στον ημιαγωγό αυτό τα επιπλέον ενεργειακά επίπεδα βρίσκονται πλησιέστερα στη ζώνη αγωγιμότητας. Με μικρή (εξωτερική) προσφορά ενέργειας τα ηλεκτρόνια μεταπηδούν στη ζώνη αγωγιμότητας και διευκολύνεται η διέλευση του ηλεκτρικού ρεύματος.

Εάν το υλικό πρόσμιξης περιέχει λιγότερα ηλεκτρόνια από το βασικό υλικό, τα επιπλέον ενεργειακά επίπεδα βρίσκονται πλησιέστερα στη ζώνη σθένους. Με προσφορά εξωτερικής ενέργειας ηλεκτρόνια από τη ζώνη σθένους διεγείρονται προς τα πρόσθετα επίπεδα, αφήνοντας πίσω τους «θετικές οπές». Το υλικό-σύνολο καλείται ημιαγωγός «τύπου p, δέκτης».

Όταν ένας ημιαγωγός n και ένας ημιαγωγός p έρθουν σε επαφή, σχηματίζεται η επαφή p-n, η οποία άγει το ηλεκτρικό ρεύμα κατά προτίμηση προς τη μία κατεύθυνση. Αυτή η κατευθυνόμενη αγωγιμότητα είναι το κύριο χαρακτηριστικό στις διόδους και τριόδους της ηλεκτρονικής και ερμηνεύεται με την κατανόηση της διαμόρφωσης των ενεργειακών ζωνών.

Εκπομπή HMA Laser

Όταν ο θετικός πόλος πηγής δυναμικού συνδεθεί στη μεριά του υλικού p, η επαφή p-n άγει το ρεύμα. Όταν ο θετικός πόλος συνδεθεί στη μεριά του υλικού n, δημιουργείται ένα φράγμα δυναμικού στην επαφή που εμποδίζει τη διέλευση του ρεύματος.

Στην πρώτη περίπτωση το δυναμικό δημιουργεί επιπλέον φορείς φορτίου, ηλεκτρόνια της ζώνης αγωγιμότητας του υλικού “n” διαπερνούν τη ζώνη επαφής και συναντούν οπές p στη ζώνη σθένους του υλικού “p”, επανενώνονται και απελευθερώνεται ενέργεια.

Στα Laser διόδων, η ενέργεια που απελευθερώνεται είναι HMA, με μέγιστη απόδοση όταν η προσφερόμενη ενέργεια (μέσω της διαφοράς δυναμικού που εφαρμόζεται) είναι περίπου ίση με την ενεργειακή διαφορά μεταξύ ζώνης αγωγιμότητας και ζώνης σθένους. Το ενεργειακό υλικό βρίσκεται στην επαφή p-n και το μήκος του καθορίζεται από τις θέσεις όπου τοποθετούνται οι δυο καθρέφτες. Το μήκος κύματος της HMA Laser καθορίζεται από τη χημική σύσταση των υλικών p και n, καθώς και από την

κρυσταλλική δομή τους. Αν δεν δημιουργηθεί αντιστροφή πληθυσμών τα φωτόνια παράγονται με αυθόρμητη εκπομπή, δεν έχουμε Laser, αλλά δίοδο LED (Light Emitting Diode). Όταν η τιμή του ηλεκτρικού ρεύματος περάσει ένα κατώφλι, δημιουργούνται οι συνθήκες για αντιστροφή πληθυσμών και παραγωγή φωτός Laser, οπότε η απόδοση της συσκευής αυξάνεται σημαντικά.

Πρόβλημα στα Laser διόδων είναι η εξάρτηση της τιμής ρεύματος κατωφλίου από τη θερμοκρασία. Όσο περισσότερο ηλεκτρικό ρεύμα διέρχεται στην επαφή p-n, τόσο μεγαλύτερο ποσό θερμότητας παράγεται και τόσο αυξάνεται και η τιμή του ρεύματος κατωφλίου, διαταράσσοντας την ομαλή λειτουργία του Laser, μεταβάλλοντας και το μήκος κύματος.

Διάχυση της HMA Laser διόδων

Η εξερχόμενη δέσμη Laser από το ενεργό υλικό της διόδου διαχέεται προς όλες τις κατευθύνσεις, σε γωνίες το μέγεθος των οποίων εξαρτάται από τις διαστάσεις της ενεργής περιοχής.

Εξελίχθηκε τεχνολογία για τον περιορισμό της διάχυσης, επιλέγοντας τα υλικά που «αγκαλιάζουν» την ζώνη επαφής. Το υλικό της επαφής είναι συνήθως p-GaAs και αναπτύχθηκαν τα υλικά p-GaAlAs και n-GaAlAs που, κατάλληλα «στρωμένα» στις δυο πλευρές της επαφής, (αλλά και στο κάθετο προς αυτήν επίπεδο) διαμορφώνουν το ενεργειακό κενό (χάσμα) και τον δείκτη διάθλασης της όλης περιοχής με τρόπο που η εξερχόμενη HMA να έχει ελάχιστη γωνία απόκλισης και να παραμένει συγκεντρωμένη στον άξονα διάδοσης.

Πλεονεκτήματα του Laser διόδων

- Μεγάλη απόδοση
- Υψηλή αξιοπιστία
- Μεγάλη διάρκεια ζωής (100 χρόνια συνεχούς λειτουργίας)
- Οικονομικό (μαζική παραγωγή και μικρή κατανάλωση ενέργειας)
- Εφικτός ρυθμός δεκάδων GHz (ισοδυναμεί με ταυτόχρονη μετάδοση 5000 τηλεφωνικών κλήσεων σε μια οπτική ίνα)
- Μικρός όγκος και βάρος
- Λεπτή δέσμη συχνοτήτων

2.2.4. Laser υγρού (dye-χρωστικών)

Το Laser χρωστικών μπορεί να θεωρηθεί ως ειδική συσκευή μετατροπής ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας ενός μήκους κύματος σε ένα άλλο και μάλιστα προσαρμόσιμο κατά το επιθυμητό. Η περιοχή συχνοτήτων μέσα στην οποία μπορεί να γίνει η προσαρμογή, εξαρτάται από τη χρωστική.

Μόρια χρωστικής (dye) συνήθως είναι οργανικά φθορίζοντα συμπλέγματα, που περιέχουν μεγάλο αριθμό κυκλικών δομών. Το ενεργό υλικό Laser χρωστικής είναι τέτοια μόρια χρωστικής διαλελυμένα συνήθως σε αλκοόλη. Από την αλληλεπίδραση των μορίων χρωστικής με το διαλύτη διευρύνεται η ζώνη των ενεργειακών επιπέδων ταλάντωσης-δόνησης και σχηματίζεται ευρεία ζώνη εκπεμπομένων (αλλά και απορροφούμενων) συχνοτήτων.

Το διάγραμμα των ενεργειακών επιπέδων στα Laser χρωστικών είναι ιδιαίτερα πολύπλοκο. Ο χρόνος ημιζωής του διεγερμένου επιπέδου είναι σύντομος, επειδή υπάρχουν πολλοί δρόμοι αποδιέγερσης και παράλληλα ο αριθμός συγκρούσεων μεταξύ των μορίων στην υγρή κατάσταση είναι μεγάλος. Με κάθε σύγκρουση διαρρέει ενέργεια από τη διεγερμένη κατάσταση.

Στο Laser χρωστικής η προσφορά ενέργειας γίνεται με οπτική άντληση: φωτισμός με HMA κατάλληλου μήκους κύματος. Η προσφερόμενη ενέργεια είναι μεγαλύτερη της εκπεμπόμενης επειδή υπάρχει απώλεια ενέργειας κατά τη διαδικασία της «μεταφοράς». Επομένως τα εκπεμπόμενα μήκη κύματος είναι μεγαλύτερα των αντίστοιχων της απορρόφησης.

Είναι εφικτή σημαντική ισχύς της HMA Laser στην έξοδο επειδή υπάρχουν πολλά μόρια χρωστικής (ενεργό υλικό), σε σχέση με το μικρό ποσοστό των ιόντων στο ενεργό υλικό των Laser στερεής κατάστασης. Απαραίτητες προϋποθέσεις λειτουργίας του Laser υγρής κατάστασης είναι να απορροφά έντονα τα μήκη κύματος που προκαλούν τη διέγερσή του και να μην απορροφά τα μήκη κύματος που το ίδιο εκπέμπει. Ο φωτισμός του ενεργού υλικού μπορεί να γίνει εξωτερικά ή όλου του υγρού που βρίσκεται σε διαφανές δοχείο ή του μέρους του υγρού που κατά τη διάρκεια ροής του περνά από ειδικά διαμορφωμένο ακροφύσιο. Η επιλογή του επιθυμητού μήκους κύματος εξόδου γίνεται με κατάλληλη τοποθέτηση ενός πρίσματος ή ενός πλέγματος.

Πλεονεκτήματα του dye Laser είναι η έμφυτη ομοιογένεια, η εύκολη επιλογή του επιθυμητού μήκους κύματος (καταρχήν με επιλογή του είδους του υγρού), η εύκολη απομάκρυνση του περισσού ποσού θερμότητας (με ροή του ίδιου του υγρού), η λεπτή ζώνη εξερχομένων συχνοτήτων και η πολύ μικρή διάρκεια των παραγόμενων παλμών Laser.

Μειονεκτήματα του dye Laser είναι η δύσκολη συντήρηση της συσκευής, η παρουσία-χρήση δεύτερου Laser ως πηγή ενέργειας, ο μικρός χρόνος ζωής της χρωστικής, η χρήση, συχνά τοξικών χημικών και εξατμιζόμενων διαλυτών.

Νέα τεχνολογία οδηγεί προς Laser χρωστικών στερεής κατάστασης. Χαρακτηριστικές εφαρμογές του Laser χρωστικών είναι (α) η καταστροφή καρκινικών όγκων που απορροφούν εκλεκτικά συγκεκριμένα μήκη κύματος (β) η φωτοδυναμική θεραπεία (γ) η κονιορτοποίηση λίθων στους νεφρούς με κρουστικά κύματα που δημιουργούν οι βραχείς παλμοί του Laser.

2.2.5. Laser ειδικής σύστασης

Ειδική σύσταση μπορεί να έχει το σύστημα προσφοράς ενέργειας (Laser ελεύθερου ηλεκτρονίου), η ενέργεια της εξερχόμενης ακτινοβολίας (Laser ακτίνων X) ή το ενεργό υλικό (Laser ινών). Υπό έρευνα βρίσκεται η κατασκευή Laser που να «προσπερνά» τη διαδικασία της αντιστροφής πληθυσμών, όπως και ατομικό Laser πολύ χαμηλής θερμοκρασίας.

Laser ελεύθερου ηλεκτρονίου

Το Laser ελεύθερου ηλεκτρονίου είναι μια συσκευή υψηλής απόδοσης που εκπέμπει ΗΜΑ Laser οπουδήποτε μήκους κύματος το οποίο εξαρτάται από το σχεδιασμό της συσκευής και όχι από τις ιδιότητες του ενεργού υλικού. Τα ελεύθερα ηλεκτρόνια ανήκουν σε δέσμη ηλεκτρονίων και επιταχύνονται σε κενό. Τα ηλεκτρόνια δεν ανήκουν σε άτομα ή μόρια, επομένως μπορούν να μεταπηδούν μεταξύ οποιωνδήποτε ενεργειακών επιπέδων-καταστάσεων. Τα ηλεκτρόνια έχουν ταχύτητα κοντά στην ταχύτητα του φωτός. Υπάρχει ΗΜΑ που κινείται προς την ίδια κατεύθυνση με τα ηλεκτρόνια. Υπάρχει και ειδικά διαμορφωμένο περιοδικά μεταβαλλόμενο μαγνητικό πεδίο, από σειρά μαγνητών τοποθετημένων σε κατάλληλες θέσεις.

Σύμφωνα με τη δύναμη Lorenz $F = qu * B$, εάν το μαγνητικό πεδίο (B) είναι κάθετο στην ταχύτητα (u) του φορτίου q (ηλεκτρόνιο), του ασκεί δύναμη F κάθετα στο επίπεδο των u, B. Περιοδικά ασκούμενο μαγνητικό πεδίο μεταβάλλει κατά βήματα τη διεύθυνση κίνησης του ηλεκτρονίου, που χάνει ενέργεια με μορφή ΗΜΑ (επιτάχυνση ηλεκτρικού φορτίου → εκπομπή ΗΜΑ). Το εκπεμπόμενο μήκος κύματος καθορίζεται από την περιοδικότητα του μαγνητικού πεδίου και την κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων.

Τα επιταχυνόμενα ηλεκτρόνια μεταδίδουν μέρος της ενέργειάς τους στο «συμπορευόμενο» ΗΜ κύμα και ειδικότερα στην «ηλεκτρική» συνιστώσα του, εφόσον είναι πολωμένο για να διατηρείται η ταλάντωσή του σε ένα συγκεκριμένο επίπεδο, κάθετο προς το επίπεδο του επιπρόσθετου περιοδικού μαγνητικού πεδίου.

Αρχικά οι εφαρμογές του Laser ελεύθερου ηλεκτρονίου ήταν στον στρατιωτικό τομέα, αλλά σήμερα έχει εφαρμογές και στον ιατρικό τομέα, κυρίως επειδή μπορεί να γίνει επιλογή του μήκους κύματος ώστε να αλληλεπιδρά κατάλληλα με βιολογικούς ιστούς. Υπάρχουν όμως μειονεκτήματα επειδή η συσκευές αυτές απαιτούν ηλεκτρικό ρεύμα χιλιάδων Amperes και υψηλό δυναμικό χιλιάδων Volts για να επιτευχθούν οι απαιτούμενες ταχύτητες των ηλεκτρονίων. Η συσκευή έχει μεγάλες διαστάσεις, υψηλό κόστος και αναπόφευκτα δημιουργούνται επικίνδυνες ακτίνες X. Βέβαια η εξερχόμενη ΗΜΑ μπορεί να έχει ισχύ ακόμη και Giga Watt.

Laser ακτίνων X

Θεωρητικά η HMA Laser μπορεί να έχει μήκος κύματος της περιοχής των ακτίνων X ή γ. Όμως το HMA Laser στο ορατό ή στο εγγύς υπέρυθρο δημιουργείται από μεταπηδήσεις ηλεκτρονίων μεταξύ «εξωτερικών» ενεργειακών επιπέδων στα άτομα ή στα μόρια.

Για τη δημιουργία HMA στην περιοχή των ακτίνων X απαιτείται μεταπήδηση πολύ μεγαλύτερης ενεργειακής απόστασης, δηλαδή από τα «εξωτερικά» ενεργειακά επίπεδα προς τα «εσωτερικά». Απαιτείται προσφορά πολύ μεγαλύτερης ενέργειας για τη διέγερση του ενεργού υλικού και μάλιστα σε πολύ σύντομο χρονικό διάστημα, καθόσον ο χρόνος ημιζωής των διεγερμένων καταστάσεων, είναι πολύ μικρός.

Τέτοια ενέργεια μπορεί να αποσπασθεί από πυρηνική έκρηξη, η οποία θα ήταν ικανή να «οπλίσει» ταυτόχρονα πολλά Laser ακτίνων X.

Το τεράστιο ποσό ενέργειας εξατμίζει το ενεργό υλικό, το μετατρέπει σε πλάσμα (κατάσταση υλικού όπου ηλεκτρόνια και ιόντα παραμένουν χωριστά) και όταν μερικά από τα «ελεύθερα» ηλεκτρόνια «νιώσουν» την έλξη του θετικού πυρήνα και παγιδευτούν σε εσωτερικές τροχιές, απελευθερώνεται HMA ακτίνων X. Η κατάσταση πλάσματος είναι από «φύση της» κατάσταση αντιστροφής πληθυσμών. Η διαδικασία είναι σημαντικά αποδοτική και δεν χρειάζονται καθρέφτες για ενίσχυση. Από τη γεωμετρία του όγκου του πλάσματος στο χώρο εξαρτάται η τάση διασποράς της δημιουργούμενης δέσμης Laser.

2.3. Χαρακτηριστικά μεγέθη Φαινομένου

2.3.1. 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. 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 υπερχειλίσισης 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.

2.3.2. 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) [11] ή *κατώφλιου πυκνότητας ενέργειας Laser*. Το μέγεθος αυτό συμβολίζεται με $th F$ και ορίζεται ως η κρίσιμη τιμή πυκνότητας ενέργειας (σε J/cm²), 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 απορρόφησής 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:

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

όπου F_{th} είναι η πυκνότητα ενέργεια -κατώφλι.

Με την αύξηση της πυκνότητας ενέργειας, η σχέση αυτή μεταβάλλεται από λογαριθμική σε σχεδόν γραμμική:

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

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 μεγαλύτερο 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, 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:

$$L_d = \sqrt{4K\tau}$$

Όπου:

- $K = k / \rho c$ η θερμική διαχυσιμότητα,
- τ η διάρκεια παλμού,
- k η θερμική αγωγιμότητα,
- ρ η πυκνότητα
- 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:

$$L_a = \frac{1}{a}$$

2.4 Μηχανισμοί απομάκρυνσης υλικού

Η ιδιαίτερα σύντομη περίοδος θέρμανσης και ο υψηλός ρυθμός αυτής κατά την αποδόμηση με *FS Laser* συμβάλλουν στο να θεωρείται η διαδικασία μεταβολής της θερμότητας σημαντικά διαφορετική με αυτή που παρατηρείται μακροσκοπικά. Για τα μεταλλικά υλικά τόσο κατά την διάρκεια όσο και μετά το πέρας της απορρόφησης *FS* παλμών, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.6 υπάρχουν τρεις κύριες διεργασίες [21]. Κατά την πρώτη (3.6α) τα ηλεκτρόνια διεγείρονται από την δέσμη του *Laser* και κινούνται μέσα στο μεταλλικό υλικό με ταχύτητες της τάξης των 10⁶ m/s. Τα ελεύθερα αυτά ηλεκτρόνια χαρακτηρίζονται ως ηλεκτρόνια υψηλής αστάθειας και η θερμοκρασία τους δεν είναι καθορισμένη, αφού η κατανομή ενέργειας δεν ακολουθεί την κατανομή ισορροπίας *Fermi*. Εκτόνωση αυτών των ηλεκτρονίων συντελείται με εσωτερικές κρούσεις. Η διαδικασία αυτή είναι γνωστή ως «*Ballistic Energy Transport*» κατά τους *Brorson et al.* και *Hohlfield et al.* [28][3]. Μετά την παρέλευση συγκεκριμένης περιόδου κρούσεων η δεύτερη διαδικασία (Σχήμα 3.6β) ξεκινάει και χαρακτηρίζεται από διάχυση ηλεκτρονίων. Η κατανομή *Fermi* ισχύει και άρα η θερμοκρασία των ηλεκτρονίων μπορεί τώρα να προσδιοριστεί. Η θερμοκρασία των ηλεκτρονίων μειώνεται, ενώ η θερμοκρασία της κρυσταλλικής δομής αυξάνεται λόγω της αλληλεπίδρασής τους. Το φαινόμενο αυτό συνεχίζεται έως ότου τα δυο συστήματα ηλεκτρονίων και κρυσταλλικής δομής φτάσουν σε θερμική ισορροπία (Σχήμα 2.6γ) και η μετάδοση ενέργειας πλέον καθορίζεται από τις κοινές μακροσκοπικές θερμικές διαχύσεις. Το φαινόμενο «*Ballistic Electron Transport*» θεωρείται πολύ σημαντικό για ευγενή μέταλλα, όπως ο χρυσός, αλλά λιγότερο σημαντικό για μέταλλα μετάπτωσης όπως το Ni [21]. Τα ηλεκτρόνια φτάνουν σε κατάσταση ισορροπίας μέσα σε κάποια *picosecond* [27][7], ενώ η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων και κρυσταλλικής δομής πραγματοποιείται σε κλίμακα

μερικών δεκάδων *picosecond*, επομένως το φαινόμενο «*Ballistic Electron Transport*» μπορεί να αγνοηθεί κατά την μελέτη μετάλλων μεταπτώσεως. Η κυρίαρχη θεωρία που εξηγεί την απορρόφηση της ενέργειας του *Laser* και της θέρμανσης μεταλλικών υλικών από αυτή ονομάζεται διθερμοκρασιακό μοντέλο. Τα ελεύθερα ηλεκτρόνια και η κρυσταλλική δομή σε μεταλλικά υλικά μελετώνται ως δυο ξεχωριστά υποσυστήματα με τα δικά του χαρακτηριστικά το καθένα. Οι θερμοκρασίες των ηλεκτρονίων και της κρυσταλλικής δομής περιγράφονται από τις αντίστοιχες εξισώσεις. Η ενέργεια που μεταφέρεται από την ακτίνα του *Laser* απορροφάται μόνο από τα ελεύθερα ηλεκτρόνια και μεταδίδεται στην κρυσταλλική δομή μέσω της αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίων κρυσταλλικής δομής [4]-[6].

Στο διθερμοκρασιακό μοντέλο, τα ελεύθερα ηλεκτρόνια και η κρυσταλλική δομή είναι αρχικά σε ισορροπία και στην ίδια θερμοκρασία. Όταν η δέσμη του *Laser* προσπίπτει στην επιφάνεια του υλικού τα ελεύθερα ηλεκτρόνια απορροφούν την ενέργεια αυτή και κατά συνέπεια η θερμοκρασία τους αυξάνεται. Μιας και η ειδική θερμοκρασία των ηλεκτρονίων είναι κατά κύριο λόγο μικρό μέγεθος και η ακτίνα του *Laser* ιδιαίτερα σφοδρή τα ηλεκτρόνια αποκτούν ιδιαίτερα υψηλή θερμοκρασία, ενώ ακόμη η θερμοκρασία της κρυσταλλικής δομής παραμένει χαμηλή. Με την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων και κρυσταλλικής δομής παρατηρείται μεταφορά θερμότητας μεταξύ των δυο αυτών συστημάτων. Με την πάροδο μερικών *picosecond* τα δυο συστήματα θα φτάσουν σε κατάσταση ισορροπίας. Κατόπιν η μεταφορά ενέργειας στο υλικό ακολουθεί την κλασική διαδικασία μετάδοσης θερμότητας. Εφόσον η ενέργεια του *Laser* είναι ιδιαίτερα υψηλή στο υλικό θα υπάρξουν αλλαγές φάσεων κατά την διάρκεια της περιόδου ακτινοβολήσής του.

Μετά την απορρόφηση της ενέργειας του *Laser* από το υλικό η θερμοκρασία ηλεκτρονίων και κρυσταλλικής δομής αυξάνουν ραγδαία. Όταν η θερμοκρασία είναι αρκετά υψηλή συγκεκριμένες αλλαγές φάσης λαμβάνουν χώρα και μέρος του υλικού απομακρύνεται από τον αρχικό όγκο. Σύνθετα θερμικά και μηχανικά φαινόμενα συμβαίνουν κατά την διάρκεια αυτής της περιόδου και όπως θα εξηγηθεί στην συνέχεια πολλοί παράγοντες συμβάλλουν στην απομάκρυνση του υλικού. Η θερμοκρασία είναι ο πιο σημαντικός παράγοντας, έτσι ώστε να υπάρξει αποκόλληση υλικού. Τα ηλεκτρόνια και η κρυσταλλική δομή θερμαίνονται από την ακτινοβολήση με *Laser*, γεγονός που οδηγεί στην αύξηση της θερμοκρασίας της κρυσταλλικής δομής και κατά συνέπεια παρατηρούνται φαινόμενα τήξης και εξάτμισης. Συνήθως το τηγμένο υλικό κατόπιν της αποδόμησης στερεοποιείται και εναποτίθεται στην στερεά κατάσταση. **Οι ερευνητές ενδιαφέρονται περισσότερο για την μετάβαση από τη στερεά ή υγρή κατάσταση στην αέρια, η οποία είναι και υπεύθυνη για την απομάκρυνση του υλικού.** Υπάρχουν διάφορες καταστάσεις στις οποίες υπεισέρχεται το υλικό κατά τη μετάβαση από την υγρή στην αέρια φάση, ανάλογα με το ρυθμό θέρμανσης, την αρχική θερμοκρασία του υλικού προ της αποδόμησης κ.α..

1. Η πρώτη είναι η συνήθης εξάτμιση, κατά την οποία τα μόρια ή άτομα περνούν

από την υγρή στην αέρια φάση. Για την *FS* αποδόμηση ο ρυθμός κανονικής/συνήθους εξάτμισης είναι ιδιαίτερα μικρός [6][7] σε σύγκριση με την ογκομετρική αλλαγή φάσης.

Συνεπώς η απομάκρυνση υλικού μέσω κανονικής εξάτμισης μπορεί να αγνοηθεί για την FS Laser αποδόμηση.

2. Ο συνήθης βρασμός είναι ένας άλλος τρόπος κατά τον οποίο τα μόρια και άτομα περνούν από την υγρή στην αέρια φάση. Αέριες φυσαλίδες προκαλούνται σε όλο τον όγκο του υγρού υλικού. Συνήθης βρασμός συμβαίνει όταν η θερμοκρασία του υγρού είναι ίση ή ελαφρώς μεγαλύτερη από αυτή του σημείου ισορροπίας μεταξύ υγρού και αερίου. Έρευνες έχουν δείξει ότι συνήθης βρασμός δεν μπορεί να υπάρξει σε χρονικές κλίμακες κατώτερες των 100 *nanoseconds* [8]. Οι αλλαγές φάσης κατά την αποδόμηση με FS Laser συμβαίνουν σε πολύ μικρότερα διαστήματα του ενός *nanosecond*, άρα ο **συνήθης βρασμός δεν είναι ένας από τους κυρίαρχους παράγοντες για την απομάκρυνση υλικού κατά την FS αποδόμηση.**

3. Στην περίπτωση που ο ρυθμός θέρμανσης είναι ιδιαίτερα υψηλός, ομογενής πυρήνωση φυσαλίδων αερίου παρουσιάζεται μέσα στον όγκο του υλικού, όταν η θερμοκρασία φτάσει στο διπλό σημείο. Αυτή η διαδικασία ονομάζεται έκρηξη φάσης ή εκρηκτικός βρασμός.

Όπως ήδη αναφέρθηκε παραπάνω, το κυριότερο ερώτημα είναι το πως κατά την φωτοαποδόμηση ενός υλικού αυτό θα καταφέρει να περάσει στην αέρια φάση και κατά συνέπεια να απομακρυνθεί από τον αρχικό όγκο. Έως τώρα έχουν πραγματοποιηθεί πολλές μελέτες ώστε να κατανοηθούν οι διαδικασίες οι οποίες ευθύνονται για αυτό και έχουν προκύψει κάποια βασικά περιγραφικά χαρακτηριστικά του φαινομένου.

Η διαδικασία της φωτοαποδόμησης χαρακτηρίζεται από ένα συγκεκριμένο “κατώφλι” πυκνότητας ενέργειας Laser. Σε εντάσεις κάτω από αυτό, παρατηρείται αφαίρεση απειρολάχιστου πάχους υλικού μικρότερο από 0.01 μm ανά παλμό. Όταν όμως αυτό ξεπεραστεί, το βάθος αφαίρεσης (*etch depth*) ανά παλμό αυξάνεται έντονα με τη πυκνότητα ενέργεια του Laser.

- Το κατώφλι αυτό εξαρτάται κυρίως από τη δομή του υλικού-στόχου και το συντελεστή απορρόφησης του στα μήκη κύματος ακτινοβολίας.
- Όταν η πυκνότητα ενέργειας του Laser F , είναι μόλις πάνω από το κατώφλι, το βάθος αφαίρεσης d , ανά παλμό, μεταβάλλεται λογαριθμικά με αυτή:

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

όπου F_{th} είναι η πυκνότητα ενέργεια -κατώφλι.

Με την αύξηση της πυκνότητας ενέργειας, η σχέση αυτή μεταβάλλεται από λογαριθμική σε σχεδόν γραμμική:

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

όπου F_0 είναι μια χαρακτηριστική πυκνότητα ενέργειας *Laser*, συνήθως μεγαλύτερη από το κατώφλι. Πάντως, το επακριβές σχήμα της εξάρτησης διαφοροποιείται αρκετά από υλικό σε υλικό και ανάλογα με το μήκος κύματος της ακτινοβολίας που χρησιμοποιείται. Επιπλέον, υπάρχουν και διάφορες πειραματικές παράμετροι (όπως ο αριθμός παλμών) που επηρεάζουν το σχήμα της εξάρτησης. Έτσι έχει παρατηρηθεί ότι:

Το φαινόμενο της φωτοαποδόμησης, όταν πραγματοποιείται στον αέρα, συνοδεύεται και από ένα ακουστικό κύμα.

- Κατά την εκρηκτική αποδόμηση σχηματίζεται πληθώρα φωτοπροϊόντων, η φύση και η ποσότητα των οποίων είναι σε άμεση εξάρτηση με το υλικό, το μήκος κύματος και την ένταση ακτινοβολήσης.
- Μια τυπική θερμοκρασία που επιτυγχάνεται κατά τη διάρκεια της φωτοαποδόμησης σε μεταλλικά υλικά είναι της τάξης των 40000K. Η θερμοκρασία αυτή παρατηρείται να αυξάνεται με την ένταση ακτινοβολήσης.

Γενικά, η αναπτυσσόμενη θερμοκρασία διαφέρει σε άλλα συστήματα.

- Οι τυπικές ταχύτητες των προϊόντων της *Laser* φωτοαποδόμησης κυμαίνονται από 1000 m/s μέχρι 2000 m/s. Ενώ η ποσότητα του υλικού που αφαιρείται είναι σε άμεση εξάρτηση με την προσπίπτουσα ένταση ακτινοβολήσης, η κατανομή των ταχυτήτων εξαρτάται ελάχιστα από αυτή την παράμετρο. Επίσης, είναι κυρίως κάθετη προς την επιφάνεια του ακτινοβολούμενου υποστρώματος.
- Η ταχύτερη έναρξη της διαδικασίας εκτίναξης του υλικού, σε συνδυασμό με την πολύ μεγάλη ταχύτητα εκτίναξης, οδηγεί στο σχηματισμό ενός διαστελλόμενου αερίου όγκου, από προϊόντα της φωτοαποδόμησης, κατά τη διάρκεια του παλμού *Laser*.

Παρόλο που τα προηγούμενα χαρακτηριστικά της φωτοαποδόμησης είναι κοινά για όλα τα συστήματα που έχουν μελετηθεί, υπάρχουν σημαντικές άλλες διαφοροποιήσεις ανάλογα με την φύση του υποστρώματος (π.χ. χωρική σύσταση, κρυσταλλική δομή), οπότε ο ακριβής μηχανισμός ακόμη παραμένει αντικείμενο εντατικής έρευνας και επιστημονικής διαμάχης. Με βάση τις μέχρι τώρα θεωρητικές και πειραματικές μελέτες, έχουν προταθεί διάφοροι πιθανοί μηχανισμοί, οι οποίοι και θα παρουσιαστούν στην συνέχεια. Οι επικρατέστεροι από αυτούς [8][10] που έχουν προταθεί για την επεξήγηση την διαδικασίας της εκτίναξης του υλικού είναι κυρίως τέσσερις

- Φωτοθερμικός μηχανισμός
- Φωτοχημικός
- Φωτομηχανικός.
- Εκρηκτικός βρασμός-*Explosive boiling*

2.4.1 Φωτοθερμικός μηχανισμός

Με βάση το φωτοθερμικό μηχανισμό η αρχική ηλεκτρονική διέγερση των σωματίδιων στο υπόστρωμα μετατρέπεται πολύ γρήγορα σε θερμική (δηλαδή τα σωματίδια αποδιεγείρονται και η ενέργεια κατανέμεται στατιστικά στους διάφορους βαθμούς ελευθερίας των σωματίδιων της ακτινοβολούμενης περιοχής) με αποτέλεσμα η αύξηση της θερμοκρασίας να δίνεται με βάση την ακόλουθη σχέση:

$$\Delta T = \frac{\alpha F_{\text{LASER}}}{\rho C_p} e^{-\alpha z}$$

όπου α είναι ο συντελεστής απορρόφησης των σωματίδιων, ρ η πυκνότητα και C_p η θερμοχωρητικότητα ανά μονάδα όγκου και z βάθος της οπτικής διείσδυσης. Ο συντελεστής απορρόφησης μετριέται σε cm^{-1} , άρα το γινόμενο $\alpha \cdot FLASER$ παριστάνει την ενέργεια που απορροφάται ανά μονάδα όγκου από το υλικό. Η αύξηση αυτή γίνεται στο χρόνο της διάρκειας του παλμού. Σύμφωνα με το θερμικό μηχανισμό δεν υπάρχει συγκεκριμένο κατώφλι φωτοαποδόμησης. Κι αυτό επειδή στην Εξίσωση 3.44 η μέγιστη θερμοκρασία T_a που επιτυγχάνεται είναι γραμμική συνάρτηση του $FLASER$, οπότε ο ρυθμός αποδόμησης ανά παλμό θα είναι $K \sim (-\Delta E_{\text{activation}} / RF(T))$, που είναι επίσης απλή συνάρτηση της θερμοκρασίας T . Ο θερμικός μηχανισμός επεξηγεί ορισμένα χαρακτηριστικά της φωτοαποδόμησης:

1. Τη γραμμική, περίπου, αύξηση του όγκου του υλικού που απομακρύνεται ως συνάρτηση της έντασης του *Laser*. Η γραμμική αυτή αύξηση θεωρείται, εν γένει, μια από τις σημαντικότερες ενδείξεις υπέρ του θερμικού μηχανισμού. Θα πρέπει όμως να τονισθεί ότι οι τιμές $\Delta E_{\text{activation}}$ αποδόμησης που προσδιορίζονται από την ανάλυση της εξάρτησης διαφέρουν, συνήθως αρκετά, από τις θερμοδυναμικές τιμές (π.χ. ενέργεια διάσπασης, ενέργεια εξάχνωσης κλπ).
2. Τη γενική παρατήρηση, ότι υποστρώματα με μικρή ενέργεια συνοχής (*cohesive energy*) έχουν μικρότερο κατώφλι αποδόμησης και ότι η ακτινοβολούμενη περιοχή έχει ομοιόμορφη επιφάνεια, η οποία πολλές φορές μοιάζει με λειωμένη.

Η παρατήρηση “περιοχής λιωμένου υλικού” είναι συνηθισμένη. Ιδιαίτερα όταν το ακτινοβολούμενο υλικό δεν απορροφάει έντονα στο μήκος κύματος που χρησιμοποιείται, εμφανίζει εξαιρετικά ανώμαλη επιφάνεια. Εσωτερικά, μάλιστα, διακρίνονται φυσαλίδες, οι οποίες θεωρείται ότι περιέχουν αέριο όπως CO, CO₂ ή και O₂. Στην περίπτωση, όμως, που στο χρησιμοποιούμενο μήκος κύματος απορροφάται έντονα η ενέργεια από το υλικό, τότε γίνεται καθαρό ‘φάγωμα’ (οι άκρες και γενικά η επιφάνεια της τρύπας είναι εξαιρετικά ομαλές). Ο λόγος για τη διαφορά στην έκταση των αλλαγών έχει να κάνει με το μέγεθος της θερμικής διάχυσης *thermal diffusivity* σε σχέση με το συντελεστή απορρόφησης. Συγκεκριμένα, η έκταση της περιοχής στην

οποία αυξάνει η θερμοκρασία και, επομένως, η έκταση της περιοχής που πιθανόν να έχουμε θερμική καταστροφή *Heat Affected Zone* δίνεται από τη σχέση:

$$HAZ = 2\sqrt{Dt}$$

όπου D η *thermal diffusivity* του υλικού και t το χρονικό διάστημα στο οποίο η ενέργεια μπορεί να διαχυθεί. Αν τώρα θεωρήσουμε ότι η ενέργεια (θερμότητα) διαχέεται μόνο κατά τη διάρκεια του παλμού, τότε για τυπικές τιμές D , βρίσκεται ότι η *Heat Affected Zone* κυμαίνεται μεταξύ 1.5 και 25 μm . Έτσι, αν το βάθος οπτικής διείσδυσης (*optical penetration depth*) είναι μεγάλο, έχουμε καταστροφή σε μεγάλο βάθος. Επομένως, οι μορφολογικές παρατηρήσεις παρέχουν ενδείξεις για θερμικό μηχανισμό, αλλά επηρεάζονται από τις οπτικές και άλλες ιδιότητες του υλικού και δεν μπορούν να θεωρηθούν ως βασικό αποδεικτικό στοιχείο. Για να κατανοηθεί περαιτέρω η διαδικασία της θερμικής διάσπασης των δεσμών πρέπει να επιλυθεί το πρόβλημα της θερμικής αγωγιμότητας, λαμβάνοντας υπόψιν την θερμική αποσύνθεση του υλικού. Συνήθως η περιγραφή της θερμικής εξίσωσης γίνεται με την μορφή της ενθαλπίας που αναπαριστά κατάλληλα την αλλαγή φάσης κατά το 'λιώσιμο' του υλικού. Αν θεωρήσουμε ότι η κίνηση της διεπιφάνειας γίνεται στον z-άξονα, η διαφορική εξίσωση που περιγράφει το πρόβλημα είναι της μορφής:

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

με κύρια οριακή συνθήκη την απώλεια ενέργειας στην επιφάνεια που οφείλεται στην εκτίναξη του υλικού:

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

Στις παραπάνω εξισώσεις με v εκφράζεται ο ρυθμός απομάκρυνσης του υλικού, με k η θερμική αγωγιμότητα, με D ο συντελεστής θερμικής διάχυσης και ο όρος μέσα στην παρένθεση εκφράζει την διαφορά ενθαλπίας μεταξύ ατμών και συμπυκνωμένης φάσης. Είναι δηλαδή η ενθαλπία στο υπόστρωμα της διεπιφάνειας και η ενθαλπία ατμών:

$$H_s^v = \rho \int_{T_0}^{T_s} c_p^{(v)}(T') dT'$$

2.4.2 Φωτομηχανικός μηχανισμός

Σύμφωνα με τον μηχανισμό αυτό η μεγάλη και ταχύτατη αύξηση της θερμοκρασίας του υλικού, ως συνέπεια της ακτινοβόλησης, συνεπάγεται απότομη διαστολή της περιοχής. Το περιβάλλον υλικό δεν έχει χρόνο να προσαρμοστεί στην αλλαγή αυτή του όγκου, με αποτέλεσμα να αναπτύσσονται ισχυρές απωστικές δυνάμεις στη θερμαινόμενη ζώνη που οδηγούν στην εκτίναξη του υλικού πριν αυτό λιώσει [9]-[10]. Το μέγεθος αυτών των τάσεων εξαρτάται από τη σχέση ανάμεσα στο ρυθμό εναπόθεσης της ενέργειας και το χαρακτηριστικό χρόνο μηχανικής ισορροπίας του απορροφούντος όγκου, τ_s . Όταν η διάρκεια του παλμού *Laser* είναι μικρότερη ή συγκρίσιμη με το χρόνο που απαιτείται για την ‘μηχανική’ ισορροπία μέσα στον απορροφούντα όγκο, η θέρμανση λαμβάνει χώρα υπό συνθήκες σχεδόν σταθερού όγκου, με αποτέλεσμα την ανάπτυξη υψηλής θερμοελαστικής πίεσης. Αυτή η συνθήκη, η οποία είναι γνωστή σαν ‘**συνθήκη αδρανούς περιορισμού ή περιορισμού υπό πίεση (*inertial or stress confinement*)**’, μπορεί να εκφραστεί από τη σχέση:

$$\tau_{pulse} < \tau_{ac} \sim L_p / c_s$$

όπου c_s είναι η ταχύτητα του ήχου στο ακτινοβολούμενο υλικό και L_p το βάθος διείσδυσης της ακτινοβολίας του *Laser* σε αυτό. Έχει αποδειχθεί, με μια σειρά από αναλυτικούς υπολογισμούς, ότι η θερμοελαστική πίεση που αναπτύσσεται στην περιοχή απορρόφησης μπορεί να οδηγήσει στη δημιουργία τάσεων, αρκετά ισχυρών, ώστε να προκληθεί ένα είδος ‘κατακερματισμού’ του εύθραυστου υλικού. Η συνένωση των μικρορωγμών αυτών ή των κοιλοτήτων σε όλη τη γύρω ακτινοβολούμενη περιοχή μπορεί με τη σειρά της να οδηγήσει στη μηχανική διάσπαση και εκτίναξη μεγάλων και, σχετικά κρύων, κομματιών υλικού. Όλη αυτή η διαδικασία, λογικά, θα έπρεπε να απαιτεί πυκνότητα ενέργειας αρκετά μικρότερη από την αντίστοιχη που απαιτείται για εξάτμιση. Η αλλαγή στον όγκο οδηγεί στη ‘γένεση’ ωστικών κυμάτων (*shock waves*) τα οποία διαδίδονται στο υλικό. Πράγματι, με τη χρήση πιεζοηλεκτρικών κρυστάλλων/ανιχνευτών έχει προσδιορισθεί η ανάπτυξη ισχυρών ακουστικών κυμάτων κατά τη φωτοαποδόμηση υλικών.

Όμως, ωστικά κύματα παράγονται επίσης από την ανάκρουση του εκτινασσόμενου υλικού *plume* και δεν έχει προσδιορισθεί κατά πόσο ευθύνονται για την αρχική εκτίναξη του υλικού. Πιο συγκεκριμένα μπορούμε να διακρίνομε τρεις πηγές ‘γένεσης’ αυτών των κυμάτων:

1. Η πρώτη πηγή του κύματος πίεσης συσχετίζεται με την οπισθο-ανάκρουση που ασκείται κατά την εκτίναξη του υλικού. Αυτό επιφέρει ένα κύμα συμπίεσης που

διαδίδεται προς το υπόστρωμα. Η ακριβής εξάρτηση του πλάτους αυτού του κύματος εξαρτάται από τον χρόνο εκτίναξης του υλικού και τη φύση της διαδικασίας (επιφανειακή εξάτμιση, εκτίναξη μεγάλου όγκου υλικού). Συνήθως εκφράζεται με την εξίσωση κίνησης του πιστονιού:

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

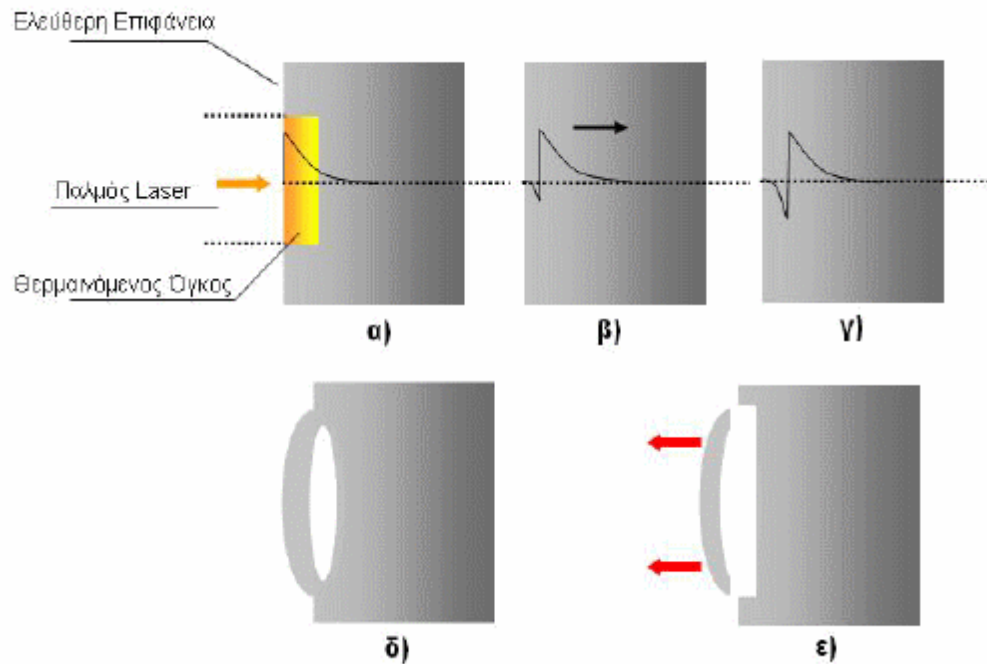
όπου F_0 παριστάνει την ενέργεια που παραμένει στο υπόστρωμα ως θερμότητα, $f = 2 \text{ } \nu / R$ με ν την ειδική μοριακή θερμότητα των ιδανικών αερίων. Στις υψηλές πυκνότητες ενέργειας, λόγω της εκπομπής πλάσματος, η παραπάνω σχέση έχει τη μορφή $p_{\max} \propto F^{3/4}$.

2. Μια δεύτερη εξήγηση της γένεσης κύματος πίεσης είναι το γεγονός ότι η γρήγορη εναπόθεση θερμότητας από το *Laser* επιφέρει αύξηση της πίεσης, ανάλογη της πυκνότητας ενέργειας και του συντελεστή *Grüneisen* Γ .

$$\Delta P = \Gamma a F_{\text{LASER}} \left(\frac{1 - e^{-\theta}}{\theta} \right) = \frac{\beta a F_{\text{LASER}}}{\rho k_T c_v} \left(\frac{1 - e^{-\theta}}{\theta} \right)$$

Ο συντελεστής *Grüneisen* εκφράζει την εσωτερική πίεση ανά μονάδα πυκνότητας της ενέργειας, η οποία δημιουργείται κατά την εναπόθεση ενέργειας υπό σταθερό όγκο. Ο β είναι συντελεστής θερμικής διαστολής, c_v θερμοχωρητικότητα ανά σταθερό όγκο, kT συντελεστής ισοθερμικής συμπίεστικότητας και $\theta = \tau_{\text{pulse}} / \tau_{\text{ac}}$ με τ_{ac} τον χρόνο που απαιτείται για ένα ακουστικό κύμα, να ταξιδεύει στον ακτιβολούμενο όγκο. Ο παράγοντας στην παρένθεση διορθώνει την ελάττωση στο πλάτος της πίεσης που οφείλεται στην διάδοση του κύματος εκτός του ακτινοβολούμενου όγκου κατά την διάρκεια του παλμού. Η πίεση επάγει ένα ακτινικά διαδιδόμενο κύμα το οποίο αγνοείται όταν η διάμετρος της δέσμης είναι μεγαλύτερη από το βάθος οπτικής διείσδυσης. Επίσης επάγει δύο επίπεδα κύματα που διαδίδονται στον άξονα της δέσμης, το ένα προς το *bulk* του υλικού (κύμα συμπίεσης) και το άλλο προς την ελεύθερη επιφάνεια (κύμα αποσυμπίεσης). Το κύμα αποσυμπίεσης που διαδίδεται προς την ελεύθερη επιφάνεια υφίσταται σταδιακά μία αύξηση του πλάτους του, που οφείλεται στην διαφορετική ακουστική εμπέδηση του μέσου ρc_s από τον αέρα,

όπως φαίνεται στην Σχήμα 3.10. Μόλις η διαφορά πλάτους των κυμάτων πάρει μία κρίσιμη τιμή τότε επέρχεται η σχάση του υλικού που επιφέρει την εκτίναξη του ‘κρούου’ υλικού.



Σχήμα 2.5: 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 ξεπερνά την ενέργεια συνοχής του υλικού, δ&ε) αποκόλληση και εκτίναξη υλικού [17]

- Μια τρίτη εξήγηση ‘γένεσης’ κύματος πίεσης οφείλεται στην δημιουργία των φυσαλίδων. Οι φυσαλίδες αυτές δημιουργούνται από τον σχηματισμό αερίων προϊόντων με βάση τον φωτοθερμικό ή τον φωτοχημικό μηχανισμό.

2.4.3 Φωτοχημικός μηχανισμός

Στην απλούστερή του εκδοχή, ο φωτοχημικός μηχανισμός θεωρεί ότι η φωτοαποδόμηση προκαλείται από τη διάσπαση πολλών δεσμών. Ως γνωστόν, κατά τη διάσπαση ενός μορίου A-B, το ποσό της ενέργειας του φωτονίου, που ξεπερνά την ενέργεια του δεσμού, κατανέμεται σαν κινητική και εσωτερική ενέργεια στα θραύσματα A και B. Τα θραύσματα που προκύπτουν έχουν τόσο μεγάλες κινητικές ενέργειες που ουσιαστικά

‘σπρώχνουν’ το υλικό προς την αέρια κατάσταση. Σύμφωνα με το νόμο του *Beer*, ο αριθμός των μορίων που διασπώνται είναι:

$$N_{\text{διασπ}} = \varphi(I_0 - I) = \varphi I_0 (1 - e^{-\alpha x})$$

όπου το φ είναι η κβαντική απόδοση της διάσπασης. Σύμφωνα με το φωτοχημικό μηχανισμό, όταν το I_0 ξεπερνάει μια τιμή, ο αριθμός των θραυσμάτων που σχηματίζονται είναι εξαιρετικά μεγάλος και οι δυνάμεις που εξασκούν είναι αρκετές για να υπερβούν τις δυνάμεις συνοχής του υλικού και να οδηγήσουν στην εκτίναξη του υλικού. Το βάθος του εκτινασσόμενου υλικού με βάση τα παραπάνω προσεγγίζεται με βάση την παρακάτω λογαριθμική σχέση:

$$\delta = \alpha^{-1} \ln \left(\frac{F_{\text{LASER}}}{F_{\text{Thr}}} \right)$$

Σε πιο εξελιγμένες εκδοχές, ο φωτοχημικός μηχανισμός προτείνει ότι κατά την ακτινοβολία ιδιαίτερα πολυμερών υλικών, τα θραύσματα που διασπώνται από τις πολυμερικές αλυσίδες αντιδρούν και σχηματίζουν αέριες ενώσεις, όπως CH_4 , CO κλπ. τα οποία κάτω από τις ίδιες συνθήκες P , T καταλαμβάνουν μεγαλύτερο όγκο από τις αρχικές ομάδες. Επομένως, σε αυτή τη περίπτωση, οι δυνάμεις που οδηγούν σε εκτίναξη του υλικού αποδίδονται όχι τόσο στην αρχική κινητική ενέργεια των θραυσμάτων αλλά και στις εσωτερικές πιέσεις που αναπτύσσουν τα παραγόμενα αέρια προϊόντα καθώς διαστέλλονται. Ο φωτοχημικός μηχανισμός έχει, βασικά, προταθεί για να εξηγήσει την παρατήρηση ότι, σε αριθμό συστημάτων (οργανικά υγρά και πολυμερή), το κατώφλι αποδόμησης δε συμβαδίζει με το σημείο ζέσεως των ενώσεων αυτών. Γενικά θεωρείται ότι, τουλάχιστον για την περίπτωση της φωτοαποδόμησης με ακτινοβολία μικρού μήκους κύματος (περίπου 200 nm ή και μικρότερο), η απευθείας φωτοχημική διάσπαση των δεσμών παίζει καθοριστικό ρόλο στη διαδικασία. Σε αυτά τα μήκη κύματος, τα φωτόνια έχουν αρκετή ενέργεια, με αποτέλεσμα η απορρόφηση ενός ή δύο φωτονίων από τα μόρια του ακτινοβολούμενου υλικού να οδηγεί σε διάσπαση δεσμών και στο σχηματισμό πτητικών μοριακών φωτοπροϊόντων. Σε μεγαλύτερα μήκη κύματος όμως (πάνω από 300 nm), η ενέργεια ενός φωτονίου δεν είναι αρκετή για τη διάσπαση δεσμών, αλλά θα πρέπει να εξεταστεί η πιθανότητα διαδικασιών διφωτονικής ή και πολυφωτονικής απορρόφησης. Επιπλέον, ένα δεύτερο βασικό ερώτημα που τίθεται είναι η σχέση ανάμεσα στις θερμικές και φωτοχημικές διεργασίες. Σίγουρα, κατά τη διάρκεια του παλμού, η θερμοκρασία του υποστρώματος αυξάνεται και αυτή η αύξηση θα πρέπει να επηρεάζει και τις φωτοχημικές διεργασίες. Επομένως, δεν είναι δυνατόν να αποδώσουμε αυτό το φαινόμενο, αποκλειστικά και μόνο, στην επίδραση των φωτοθραυσμάτων.

2.5 Εφαρμογές της φωτοπαποδόμησης με Laser

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 [15][16],
- Κατεργασίες *τροποποίησης* των ιδιοτήτων ενός υλικού [17-20],
- Κατεργασίες *αφαίρεσης* ή *αποβολής* υλικού [22-26] [1].

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 ακτινοβολία της επιφάνειας – στόχου μπορεί να είναι είτε συνεχούς κύματος είτε παλμική, ενώ το μήκος κύματος της δέσμης αυτής μπορεί να κυμανθεί από κλάσματα του μμ έως και δεκάδες μμ. 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 [11], [12], [13], 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 μπορεί να εφαρμοστεί στη μικροκλίμακα (ανάλυση 1μm) αλλά χρησιμοποιώντας στοιχειώδη εξοπλισμό και εφαρμόζοντας βασικές μεθόδους κατεργασίας υλικών . Το παραπάνω καταδεικνύει ότι, χάρη στην εξελισσόμενη τεχνολογία, μπορούμε με πιο σύνθετες διατάξεις να πετύχουμε ακρίβεια έως και μερικών nm στην εκάστοτε μικροκατεργασία.

Ο παρακάτω Πίνακας 2.1. παρουσιάζει συνοπτικά διάφορες εφαρμογές στις οποίες χρησιμοποιούνται οι μικρο-κατεργασίες με Laser:

A. Αεροπορική / Αμυντική βιομηχανία > Ψύξη τμημάτων στροβίλων > Στγαστήρες κινητήρων > Συστήματα καθοδήγησης πυραύλων	B. Αυτοκινητοβιομηχανία > Ακροφύσια εγχυτήρων καυσίμου > Φίλτρα καυσίμου > Αισθητήρες φρένων > Λίπανση διωστήρων
Γ. Βιοϊατρική > Αισθητήρες καθετήρων > Δειγματοληψία DNA > Προετοιμασία / Παραγωγή εμβολίων	Δ. Ηλεκτρονική / Μικροηλεκτρονική > Ακροφύσια εκτυπωτών > Τυπωμένα κυκλώματα / Πλακέτες PCB > Ψύξη σε PCB > Οπτικοί διακόπτες
Ε. Περιβάλλον > Αισθητήρες τοξικών αερίων > Τεχνολογία ηλιακών κυψελών > Ενεργειακές κυψέλες > Εξειδικευμένα φίλτρα	ΣΤ. Άλλες χρήσεις / εφαρμογές > Συσκευασία τροφίμων > Διάτρηση πολύτιμων λίθων > Ψηφιακά αποτυπώματα

Πίνακας 2.1. 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. 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.

2.6 Πλεονεκτήματα-Μειονεκτήματα της φωτοαποδόμησης με laser

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 [2][29], 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 τηςκατεργασίας.
- 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.

Κεφάλαιο 3

Σύντομη Βιβλιογραφική Ανασκόπηση Εφαρμογών Μοριακής Δυναμικής στις φωτοαποδόμηση με laser

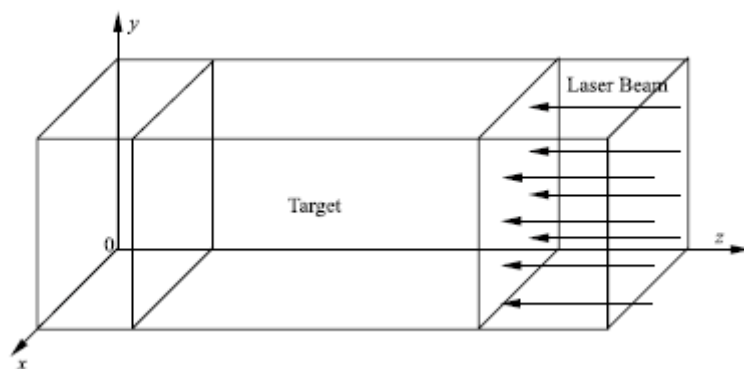
3.1 Συνοπτική περιγραφή διάφορων ερευνητικών περιπτώσεων

Οι **Imanova, Atanasovet al.**[30] μελέτησαν την επίδραση του δυναμικού Morse και του δυναμικού EAM με βάση την περιγραφή από τις ιδιότητες και τη διαδικασία υπερβραχέας φωτοαποδόμησης με laser σε Fe με τη μέθοδο τη μοριακής δυναμικής (MD). Στη μελέτη αυτή υπολογίστηκε η ακρίβεια των δύο δυναμικών για την αξιολόγηση της θερμοκρασίας τήξεως, ο γραμμικός συντελεστής θερμικής διαστολής και η συμπεριφορά συμπίεσης του σιδήρου. Το δυναμικό EAM βρέθηκε τελικά να δίνει ακριβέστερη περιγραφή των ιδιοτήτων του σιδήρου σε σχέση με το δυναμικό Morse. Η θερμοκρασία τήξης υπερεκτιμήθηκε μόνο 2% στην περίπτωση του EAM και 24% για το δυναμικό Morse, αντίστοιχα, σε σύγκριση με την πειραματική τιμή. Μια διαφορά στην απεικόνιση των ελαστικών ιδιοτήτων παρατηρήθηκε επίσης, και είναι πιο έντονη στην περίπτωση του δυναμικού Morse.

Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοαποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών ($\lambda = 800 \text{ nm}$) με διάρκεια 100 fs και μήκος κύματος 800 nm σε δοκίμιο διαστάσεων $2.87 \text{ nm} \times 2.87 \text{ nm} \times 2.87 \text{ nm}$ (2000 άτομα) και σε πυκνότητες ροής κάτω από το όριο φωτοαποδόμησης μέχρι $1 \text{ J} / \text{cm}^2$. Στην έρευνα αυτή αναλύεται ο μηχανισμός της κατάλυσης και το πώς εξελίσσεται η όλη διαδικασία και η θερμοκρασία

Οι **XinweiWang & XianfanFu** [31] μελέτησαν με τη μέθοδο της μοριακής δυναμικής (MD) τα θερμικά και θερμομηχανικά φαινόμενα που προκαλούνται από τη picosecond θέρμανση με λέιζερ. Στη μελέτη τους υπολόγισαν και απεικόνισαν τη παραγωγή και τη διάδοση του κύματος της πίεσης. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης MD έπειτα τα συνέκριναν με εκείνα που λαμβάνονται με μια αναλυτική λύση. Επιπλέον, παρατηρήθηκε ένα κύμα θερμοκρασίας σαν αποτέλεσμα της σύζευξης μεταξύ της θερμοκρασίας και του ρυθμού μεταβολής της έντασης, η οποία διαδίδεται με την ίδια ταχύτητα όπως το κύμα πίεσης.

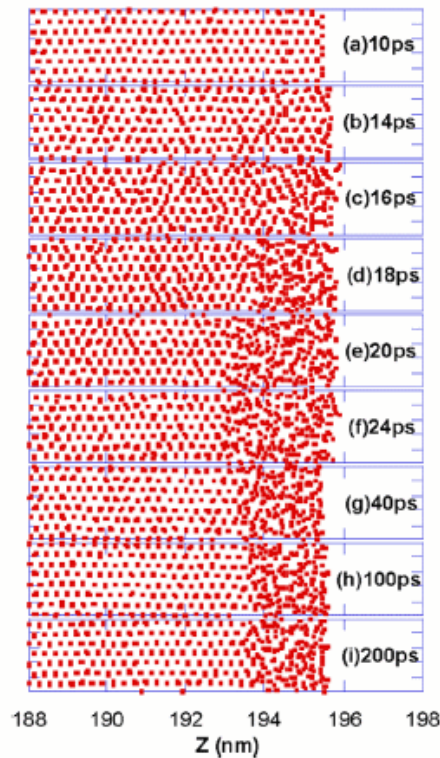
Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοαποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών με διάρκεια 100fs σε δοκίμιο από αργό με 1,944,000 άτομα και σε πυκνότητες ροής κάτω από το όριο φωτοαποδόμησης μέχρι $0.12 \text{ J} / \text{m}^2$. Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Lennard-Jones.



Σχήμα 3.1: Σχηματική αναπαράσταση του υπολογιστικού χωρίου για MD προσομοιώσεις.

Οι **Chengjuan Yang et al.**[32] μελέτησαν τα θερμοδυναμικά φαινόμενα στο κρυσταλλικό πυρίτιο όταν αυτό ακτινοβολείται από ένα υπερταχέως παλμό λέιζερ χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής (MD). Το δυναμικό Stillinger-Weber χρησιμοποιήθηκε για τη μοντελοποίηση του κρυσταλλικού πυριτίου. Παρακολούθησαν έπειτα την εξέλιξη της θερμοκρασίας στο πυρίτιο, καθώς αυτό θερμαίνεται από έναν υπερταχύ παλμό λέιζερ. Ερεύνησαν επίσης την τήξη και τις διαδικασίες στερεοποίησης καθώς και την προκύπτουσα αλλαγή στη δομή του υλικού. Χρησιμοποίησαν ακτινική συνάρτηση κατανομής για να παρακολουθήσουν το υγρό άμορφο περιβάλλον κατά τη διάρκεια της στερεοποίησης. Διαπιστώθηκε ότι η θερμοκρασία στην διεπιφάνεια στερεού-υγρού θα μπορούσε να αποκλίνει από την θερμοκρασία τήξης αρκετές εκατοντάδες βαθμούς. Αφού το λιωμένο στρώμα στερεοποιήθηκε, μέρος του λειωμένου υλικού έγινε κρυσταλλικό και το υπόλοιπο του υλικού παρέμεινε σε άμορφη κατάσταση. Η διαφορά στην τελική κατάσταση συσχετίστηκε με το ρυθμό επαναστεροποίησης και κατασκευάστηκαν τόσο οι ποιοτικές όσο και οι ποσοτικές αναλύσεις της σχέσης μεταξύ της τελικής δομής του ατόμου και του ρυθμού επαναστεροποίησης.

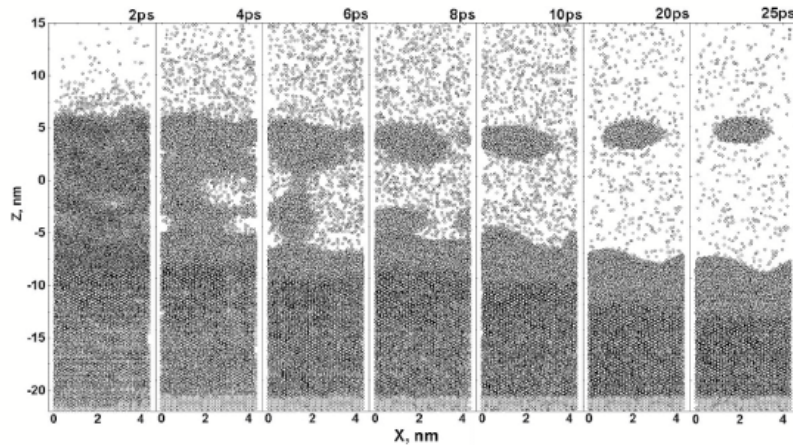
Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερταχέων παλμών με διάρκεια 200fs σε δοκίμιο από πυρίτιο διαστάσεων 1.63 nm x 1.67 nm x 9.87 nm (1296 άτομα) και σε πυκνότητες ροής μέχρι 90J / m². Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Stillinger-Weber.



Σχήμα 3.2: Στιγμιότυπα για ένταση ροής laser 60 J/m^2 σε χρόνους: (a) 10 ps, (b) 14 ps, (c) 16 ps, (d) 18 ps, (e) 20 ps, (f) 24 ps, (g) 40 ps, (h) 100 ps, (i) 200 ps [32]

Οι **Nedialkov et al.**[33] διερεύνησαν πειραματικά και θεωρητικά τη φωτοαποδόμηση με laser του σιδήρου. Τα πειράματα εκτελούνται με λέιζερ από ζαφείρι με διάρκεια παλμού $t_p = 0.1 \text{ ps}$. Στην έρευνα αυτή προσδιορίστηκαν ο ρυθμός αφαίρεσης υλικού και οι επιφανειακές δομές. Παρατηρήθηκαν διαφορετικά καθεστάτα της διαδικασίας σε χαμηλές και υψηλές πυκνότητες ροής λέιζερ. Σε πυκνότητες ροής πάνω από αρκετά J/cm^2 , η φωτοαποδόμηση συνοδεύεται από σχηματισμό σημαντικής ποσότητας τηγμένου υλικού. Για την προσομοίωση της διαδικασίας χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής (MD). Εκτιμήθηκε επίσης ο ρόλος της θερμικής διάχυσης των ηλεκτρονίων κατά τη διαδικασία της διάχυσης της ενέργειας. Σε συμφωνία βρέθηκαν τα αποτελέσματα που επιτεύχθηκαν μεταξύ του μοντέλου και των πειραμάτων.

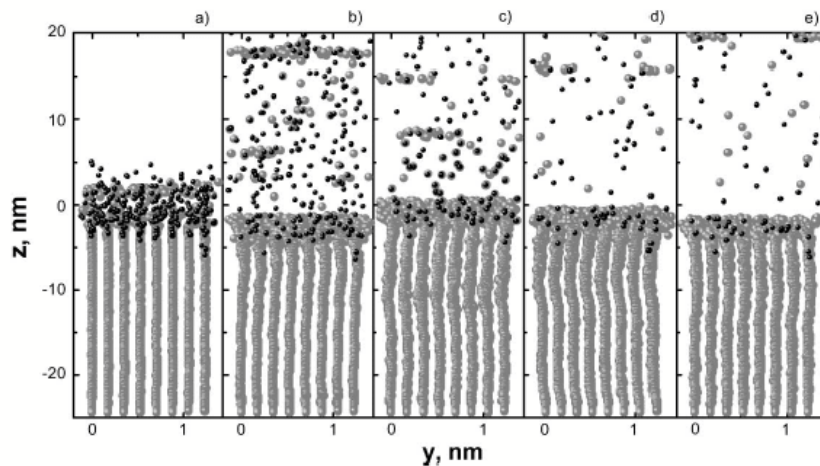
Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοαποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών ($\lambda = 800 \text{ nm}$) με διάρκεια 100 fs και μήκος κύματος 800 nm σε δοκίμιο από σίδηρο διαστάσεων $4.3 \text{ nm} \times 4.3 \text{ nm} \times 30 \text{ nm}$ και σε πυκνότητες ροής μέχρι 100 J/cm^2 . Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Morse.



Σχήμα 3.3: Χρονική εξέλιξη της φωτοαποδόμησης σε σίδηρο. $F = 0.5 \text{ J/cm}^2$, $\lambda = 800 \text{ nm}$, και $\tau_p = 0.1 \text{ ps}$ [33]

Οι **Lorazo et al.**[34] έκαναν μια πιο ρεαλιστική ανάλυση του φαινομένου της φωτοαποδόμησης, μαζί με μια σημαντική επέκταση της κλίμακας χρόνου. Η κίνηση των περίπου 32.000 ατόμων, που περιέχονται σε μια επιφάνεια $5 \text{ nm} \times 5 \text{ nm} \times 27 \text{ nm}$ που ακτινοβολείται από ένα μόνο 308 nm , 10 ps , Gaussian παλμό λέιζερ, παρακολούθηθηκαν για τα 100 ps του χρόνου προσομοίωσης. Επειδή η τήξη του στόχου μετά την φωτοαποδόμηση από τον παλμό λέιζερ περιγράφεται μέσα στο μοντέλο θερμικής ανόπτησης, λήφθηκε μέριμνα ώστε να μην υπερβαίνει ο φορέας πυκνότητες της τάξεως των 10^{22} cm^{-3} . Πιο συγκεκριμένα, η αλληλεπίδραση των φωτονίων με τον στόχο πιστεύεται ότι προκαλεί την παραγωγή ενός πυκνού αερίου με ηλεκτρόνια και τρύπες τα οποία χαλαρώνουν κατά κύριο λόγο μέσω σκέδασης του φορέα και των φωτονίων. Παρατηρήθηκε επίσης ότι πάνω από ένα χαρακτηριστικό κατώφλι ενέργειας της τάξεως των 0.30 J/cm^2 , λαμβάνει χώρα η εξώθηση μεγάλων κομματιών λιωμένου υλικού από τον στόχο και τα οποία αποβάλλονται με αξονική ταχύτητα περίπου 1000 m/s . Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Stillinger-Weber και το υλικό που προσομοιώθηκε είναι το πυρίτιο.

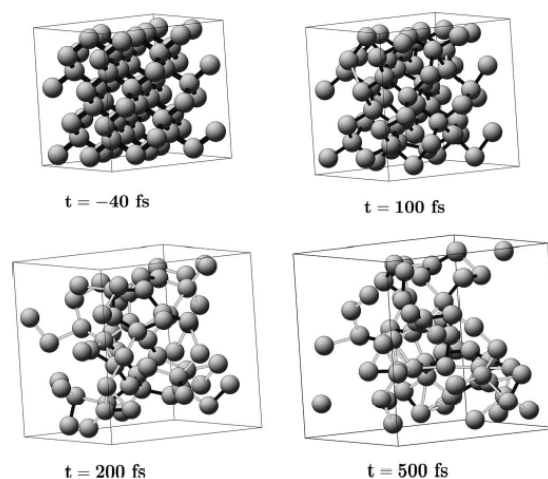
Οι **Atanasov et al.** [35] ερεύνησαν τη φωτοαποδόμηση με laser του νικελίου με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής (MD). Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκαν για τις προσομοιώσεις παλμοί laser των 500 fs σε $\lambda = 248 \text{ nm}$. Μελετήθηκε κυρίως η επίδραση της ενεργειακής πυκνότητας του laser και παρατηρήθηκε η χρονική εξέλιξη του πλάσματος. Με τη μελέτη αυτή καταφέρανε να υπολογίσουν το ρυθμό φωτοαποδόμησης συναρτήσει της ενεργειακής πυκνότητας του laser και παρατηρήθηκε ότι τα αποτελέσματα προσέγγιζαν κατά μεγάλο βαθμό τα πειραματικά δεδομένα άλλων ερευνητών. Μελετήθηκαν επίσης η δυναμική του κρουστικού κύματος σε στερεό σώμα και παρατηρήθηκε τέλος ότι η ταχύτητα των φωτοαποδομημένων ατόμων και ιόντων είναι αρκετά χιλιόμετρα το δευτερόλεπτο και αυξάνεται με την παραμικρή αύξηση της ροής του laser. Η προσομοίωση MD έγινε σε πυκνότητες ροής μέχρι 70 mJ/cm^2 και το υλικό που προσομοιώθηκε είναι το νικέλιο.



Σχήμα 3.4: Στιγμιότυπα της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου της φωτοαποδόμησης νικελίου [35]
 Ιόντα: Μαύρες κουκκίδες
 Άτομα: Γκριζες κουκκίδες

Οι **Jeschke et al.** [36] ερεύνησαν την υπερταχεία φωτοποδόμηση με laser του πυριτίου τόσο πειραματικά όσο και θεωρητικά. Η θεωρητική περιγραφή βασίστηκε στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής (MD) συνδυασμένη με ένα μικροσκοπικό ηλεκτρονικό μοντέλο. Στην μελέτη αυτή οι ερευνητές καθορίσανε τα όρια της τήξης και της φωτοαποδόμησης του υλικού για δύο διαφορετικές διάρκειες του παλμού ($\tau = 20$ και 500 fs). Στα πειράματα χρησιμοποίησαν 100 Ti:Sapphire παλμούς laser για κάθε κηλίδα στο εναέριο περιβάλλον. Τα όρια της φωτοποδόμησης καθορίστηκαν για διάρκεια παλμών 25 και 400 fs. Τα συμπεράσματα της έρευνας έδειξαν ότι τα θεωρητικά αποτελέσματα προσεγγίζουν ικανοποιητικά τα πειραματικά.

Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερταχέων παλμών με μήκος κύματος 780 nm σε δοκίμιο από πυρίτιο.

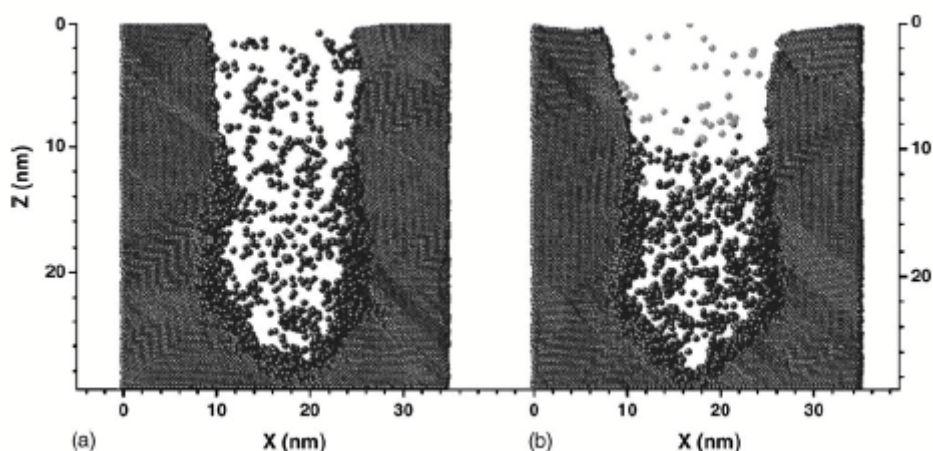


Σχήμα 3.5: Στιγμιότυπα της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου της φωτοαποδόμησης πυριτίου [36]

Οι **Nediakov&Atanasov**[44] ερεύνησαν για πρώτη φορά για βαθεία σπή τη φωτοαποδόμηση του σιδήρου από υπερβραχείς παλμούς laser με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής (MD). Οι συνθήκες που καθορίστηκαν ήταν παλμοί με διάρκεια 0.1 ps και μήκος κύματος 800 nm. Η χρονική εξέλιξη της αφαιρέσης του

φωτοαποδομημένου υλικού διαφέρει σημαντικά από την ελεύθερη εξάπλωση του συστήματος, καθώς οι δύο αυτοί μηχανισμοί είναι σημαντικοί για την τελική μορφή της οπής. Η πρώτη διαδικασία είναι η εναπόθεση του φωτοαποδομημένου υλικού στα τοιχώματα, το οποίο στενεύει την οπή σε ένα συγκεκριμένο ύψος πάνω από τη βάση. Η δεύτερη διαδικασία σχετίζεται με τη φωτοαποδόμηση του υλικού στα τοιχώματα, η οποία οφείλεται στην αλληλεπίδραση με τα αρχικώς φωτοαποδομημένα σωματίδια. Στην έρευνα αυτή υπολογίζεται η αποτελεσματικότητα της αφαίρεσης του υλικού για το κενό ή για συνθήκες αέρα. Στην τελευταία περίπτωση, βρέθηκε η ύπαρξη καλώς ορισμένου ατμού έχοντας χαμηλό κέντρο βάρους.

Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών με διάρκεια 100fs και μήκος κύματος 800 nm σε δοκίμιο από σίδηρο διαστάσεων 30 nm x 1 nm x 35 nm και σε πυκνότητες ροής μέχρι 3J / m².



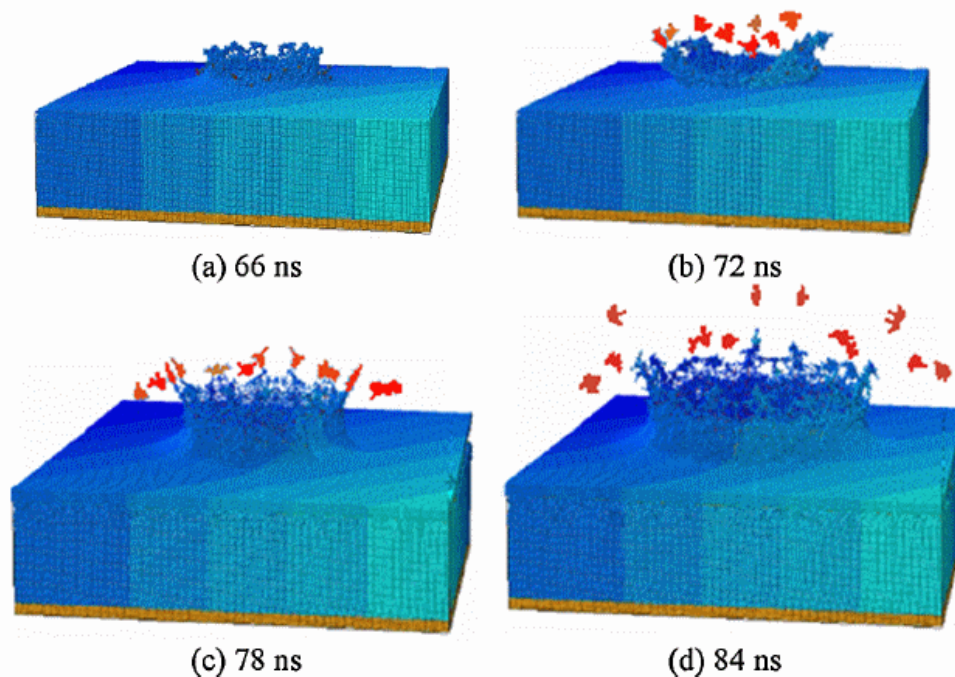
Σχήμα 3.6: Στιγμιότυπα της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου της φωτοαποδόμησης για $F = 2 \text{ J/cm}^2$ μετά από 7 ps αφού έχει πέσει η δέσμη laser (a) στο κενό (b) σε αέρα με πίεση $5 \times 10^5 \text{ Pa}$ [44]

Οι **Zhakhovskii et al.** [37] ερεύνησαν το θερμό λιώσιμο υλικού με femtosecond παλμούς laser με διάρκεια $\tau_L = 40\text{-}100 \text{ fs}$, το οποίο είχε σαν αποτέλεσμα το σχηματισμό μιας θερμομηχανικής έντονης κατάστασης. Παρατήρησαν ότι η εκφόρτωση αυτής μπορεί να προκαλέσει μετωπική σπηλαιώση του υπόγειου στρώματος σε βάθος 50 nm για το αλουμίνιο και 100 nm για τον χρυσό. Το κύμα συμπίεσης μεταδίδεται βαθιά μέσα στο υλικό και χτυπά την πίσω πλευρά του στόχου με το σχηματισμό της αραιώσης των κυμάτων. Η αραιώση αυτή μπορεί να σχηματίσει ρωγμές και θρυμμάτιση της πίσω πλευράς. Στην έρευνα αυτή προβήκανε σε MD προσομοιώσεις της φωτοαποδόμησης και θρυμμάτισης των μετάλλων του αλουμινίου και του χρυσού. Στις προσομοιώσεις αυτές αποδείχθηκε ότι το χρησιμοποιούμενο δυναμικό EAM προβλέπει τα διαφορετικά κατώτερα όρια φωτοαποδόμησης για απορροφούμενη ροή στο αλουμίνιο. Ο ρυθμός μεταβολής της έντασης ήταν $4.3 \times 10^9 \text{ 1/s}$ στα όρια της θρυμμάτισης. Η προσομοιούμενη δύναμη θρυμμάτισης του αλουμινίου καθορίστηκε σε 7.4 GPa, τα κατώτερα όρια φωτοαποδόμησης σε $F_a = 120 \text{ mJ/cm}^2$ και το βάθος της οπής σε 110 nm. Τα συμπεράσματα της έρευνας έδειξαν ότι τα θεωρητικά αποτελέσματα προσεγγίζουν ικανοποιητικά τα πειραματικά.

Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών σε πυκνότητες ροής μέχρι 1 J/cm^2 . Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό EAM.

Οι **Cao & Shin**[38] διερεύνησαν τη φωτοαποδόμηση με λέιζερ του αλουμινίου και του χαλκού με έκρηξη φάσης μέσω ενός μοντέλου πολλαπλής κλίμακας και με πειραματική επαλήθευση. Η συμπεριφορά εξώθησης τήγματος κατά την έκρηξη φάσης προβλέφθηκε με επιτυχία από ένα συνδυασμένο μοντέλο μοριακής δυναμικής (MD) και υδροδυναμικής ρεόντων σωματιδίων (SPH) και επικυρώθηκε και από τα πειράματα. Το από κοινού αποδεκτό $0.9T_c$ (κρίσιμη θερμοκρασία) κριτήριο για όριο έκρηξης φάσης αξιολογήθηκε επίσης με την πρόβλεψη του βάθους φωτοαποδόμησης τόσο για αλουμίνιο όσο και για χαλκό, και διαπίστωθηκε ότι το κριτήριο $0.9T_c$ δεν λειτουργεί πάντα. Το μοντέλο πολλαπλής κλίμακας που αναπτύχθηκε σε αυτή την έρευνα φαίνεται να έχει καλύτερη ικανότητα πρόβλεψης της συμπεριφοράς της φωτοαποδόμησης όταν εμπλέκεται έκρηξη φάσης.

Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερταχέων παλμών σε δοκίμια διαστάσεων $20\text{ nm} \times 20\text{ nm} \times 32\text{ }\mu\text{m}$ και σε πυκνότητες ροής μέχρι 12 J/cm^2 . Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό MEAM.



Σχήμα 3.7: Στιγμιότυπα της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου της έκρηξης φάσης μετά από φωτοαποδόμηση του υλικού για $F = 12\text{ J/cm}^2$ και διάρκεια παλμού 6 ns . [38]

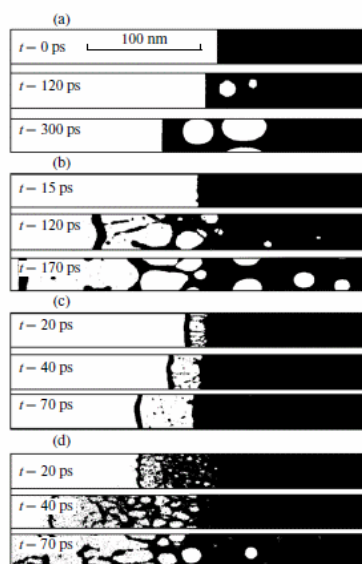
Οι **Gacek & Wang**[39] μελέτησαν με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής (MD) τη διάσπαση του λοφίου σε πικο-δευτερόλεπτη φωτοαποδόμηση με laser σε εναέρια περιβάλλον. Η κατανομή της ταχύτητας έδειξε ένα καθαρό διαχωρισμό σε δύο διακριτά μέρη. Η λεπτομερής τροχιά του ατόμου αποκαλύπτει τη συμπεριφορά των ατόμων εντός των κορυφών και τους μηχανισμούς σχηματισμού της κορυφής. Η παρατηρούμενη διάσπαση της ταχύτητας στο λοφίο αναδύεται από δύο διακεκριμένα τμήματα του λοφίου. Η μπροστινή κορυφή του πλουμίου παρατηρήθηκε ότι αποτελείται από τα ταχύτερα κινούμενα άτομα και τα μικρότερα σωματίδια στο υλικό κατά τη διάρκεια της φωτοαποδόμησης. Αυτή η περιοχή βιώνει ισχυρή πίεση από το αέριο του

περιβάλλοντος με αποτέλεσμα να έχει σημαντική εξασθένηση ταχύτητας. Η δεύτερη (πίσω) κορυφή του πλουμίου προέρχεται από τα μεγαλύτερα και πιο αργά συμπλέγματα στη φωτοαποδόμηση. Αυτά τα μεγαλύτερα συμπλέγματα / σωματίδια βιώνουν πολύ λίγη πίεση από το περιβάλλον τους, αλλά επηρεάζονται από τη δυναμική χαλάρωση του λοφίου και εμφανίζονται σχεδόν ως στάσιμο κύμα κατά τη διάρκεια της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου. Διαχωρισμός της πυκνότητας εμφανίζεται μόνο στην αρχή της φωτοαποδόμησης και γρήγορα εξαφανίζεται λόγω της προς τα έξω εξάπλωσης των πιο αργών κινούμενων συμπλεγμάτων. Τέλος, βρέθηκε ότι υψηλότερη πίεση περιβάλλοντος και ισχυρότερη ροή λέιζερ οδηγούν σε ταχύτερη διάσπαση του πλουμίου.

Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοαποδόμηση με λέιζερ υπερταχέων παλμών με διάρκεια 200fs και μήκος κύματος 800 nm σε αέριο διαστάσεων 32.5 nm x 2.7 nm x 3627 nm (337 500 άτομα) και σε πυκνότητες ροής μέχρι 7J / m².

Οι **Norman et al.** [40] μελέτησαν τη διαδικασία της φωτοαποδόμησης ενός στόχου χρυσού από παλμούς ακτινοβολίας λέιζερ διάρκειας φεμτο και πικοδευτερολέπτων με αριθμητικές προσομοιώσεις χρησιμοποιώντας ένα ατομικό μοντέλο αλληλεπίδρασης ιόντων με τη θερμοκρασία των ηλεκτρονίων. Χρησιμοποιώντας αυτό το δυναμικό, καταφέρνανε να λάβουν υπόψη τους την αλλαγή στις φυσικές ιδιότητες του υποσυστήματος των ιόντων ως αποτέλεσμα της θέρμανσης του υποσυστήματος των ηλεκτρονίων. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων αποκαλύπτουν μια σημαντική διαφορά μεταξύ των χαρακτηριστικών της φωτοαποδόμησης των μετάλλων για διάφορες διάρκειες. Για φωτοαποδόμηση με παλμούς της τάξης των υποπικοδευτερολέπτων, παρουσιάστηκαν δύο μηχανισμοί μεταλλικής θραύσης που σχετίζονται με την χρονική εξέλιξη της ηλεκτρονιακής πίεσης στο σύστημα.

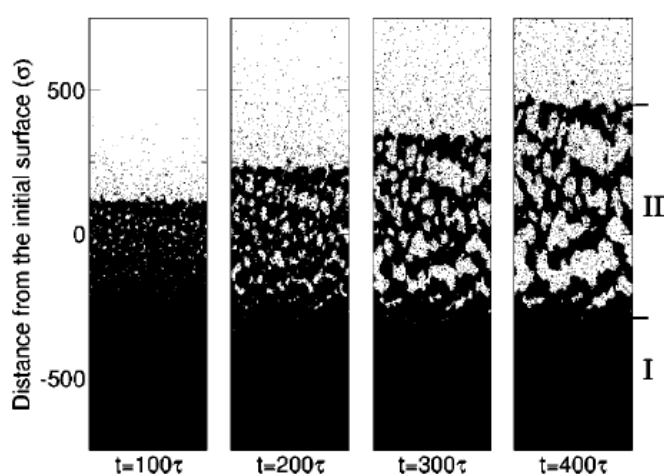
Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοαποδόμηση με λέιζερ σε δοκίμιο από χρυσό, όπου χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό ETD.



Σχήμα 3.8: Στιγμιότυπα του φαινομένου που απεικονίζουν τα ιόντα του χρυσού σε διάφορες στιγμές με διάφορους παραμέτρους : (a, b) $\tau = 7$ ps, $F_{\text{abs}} = 65$ και 130 mJ/cm², (c, d) $\tau = 0.1$ ps, $F_{\text{abs}} = 65$ και 152 mJ/cm² [40]

Οι **Perez&Lewis**[41] μελέτησαν την φωτοαποδόμηση των στερεών υπό παλμούς λέιζερ διάρκειας φεμτοδευτερολέπτων χρησιμοποιώντας ένα δισδιάστατο μοντέλο μοριακής

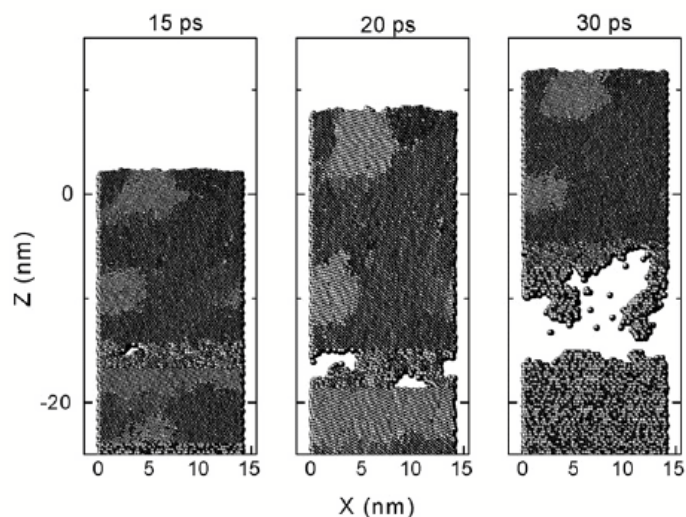
δυναμικής (MD). Οι προσομοιώσεις έδειξαν ότι διαφορετικές καταστάσεις εξάπλωσης αναπτύσσονται ως συνάρτηση της ενέργειας εισόδου. Η προέλευση αυτών των καταστάσεων έγκειται στην αλλαγή της θερμοδυναμικής διαδικασίας χαλάρωσης του υλικού που ακολουθεί το υλικό όταν η ένταση του λέιζερ αυξάνει. Το σχήμα των κυμάτων πίεσης που παράγονται ως αποτέλεσμα της απορρόφησης του παλμού φαίνεται να ποικίλει από διπολική σε χαμηλή ροή σε μονοπολική σε υψηλή ροή, ως αποτέλεσμα της μείωσης της αντοχής του υλικού σε εφελκυσμό με τη θερμοκρασία. Με το συνδυασμό αυτών των αποτελεσμάτων και με μια ανάλυση των θερμοδυναμικών τροχιών για διαφορετικά τμήματα του στόχου, έδειξαν ότι τέσσερις διαφορετικοί μηχανισμοί μπορεί να ευθύνονται για την φωτοαποδόμηση σε πυκνότητες ροής κάτω από το όριο για το σχηματισμό πλάσματος, οι οποίοι είναι η θρυμματίση, η έκρηξη φάσης, ο κατακερματισμός και η εξάτμιση. Οι μηχανισμοί αυτοί αποδείχθηκε ότι μπορεί να συμβαίνουν ταυτόχρονα σε διαφορετικά μέρη του στόχου.



Σχήμα 3.9: Στιγμιότυπα της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου της φωτοαποδόμησης του υλικού [41]

Οι **Nedialkov, Amoruso et al.** [45] Ερευνήσανε μια υπερβραχεία μικροκατεργασία μετάλλων με λέιζερ, τόσο από την άποψη των βασικών φυσικών διεργασιών, όσο και από την άποψη των τεχνολογικών επιπτώσεων. Η διαδικασία της δημιουργίας οπής σε νικέλιο με 300 fs SHG ($\lambda = 527$ nm) και σε αλουμίνιο με 100 fs αντιμετωπίστηκε πειραματικά με τη χρήση χρονικά-περιορισμένης φασματοσκοπίας και SEM ανάλυσης των στόχων. Η διαδικασία της φωτοαποδόμησης αναλύθηκε επίσης από την κλασική μοριακή δυναμική (MD), χρησιμοποιώντας ένα δυναμικό Morse για να περιγράψει την αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων, και λαμβάνοντας υπόψη τη συνεισφορά της διάχυσης της θερμότητας των ηλεκτρονίων. Η εξάρτηση του βάθους της φωτοαποδόμησης από την πυκνότητα ροής του λέιζερ, όπως μετρήθηκε με την ανάλυση SEM, προσέγγισε αρκετά τις αριθμητικές προσομοιώσεις και συσχετίστηκε επίσης καλά με την απόδοση της οπτικής εκπομπής του διαστελλόμενου πλουμίου.

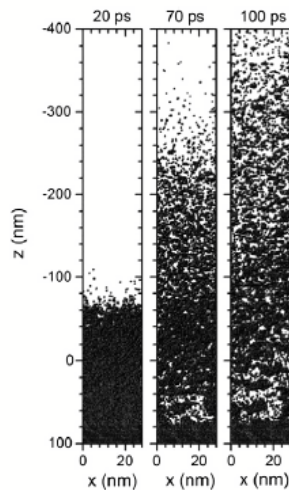
Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοαποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών με διάρκεια 100 και 300 fs και μήκος κύματος 527 και 800 nm σε δοκίμιο από νικέλιο διαστάσεων 17.6 nm x 1.1 nm x 176 nm και σε δοκίμιο από αλουμίνιο διαστάσεων 20 nm x 1.2 nm x 243 nm και σε πυκνότητες ροής μέχρι 0.5 J / cm². Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Stillinger-Weber.



Σχήμα 3.10: Στιγμιότυπα της χρονικής εξέλιξης του υλικού σε 3 διαφορετικές χρονικές στιγμές.[45]

Οι **Amoruso et al.**[43] μελέτησαν τη φωτοαποδόμηση ενός χρυσού λεπτού φιλμ, που ακτινοβολείται από υπερβραχέους παλμούς, με τη μέθοδο της μοριακής δυναμικής, και συνέκριναν τα αποτελέσματα με εκείνα ενός μεγάλου στόχου. Μελετήθηκε κυρίως ένα πάχος μεμβράνης συγκρίσιμο με το βαλλιστικό βάθος του ηλεκτρονίου σε χρυσό (≈ 100 nm), αποδεικνύοντας μια σημαντική αλλαγή στο θερμοκρασιακό χωρικό προφίλ του εσωτερικού του υλικού, το οποίο τελικά επηρεάζει το υλικό αποσύνθεσης. Ιδιαίτερη έμφαση δόθηκε στη διαδικασία της γένεσης νανοσωματιδίων. Οι προσομοιώσεις έδειξαν μια πιο ομοιόμορφη θέρμανση του δείγματος στην περίπτωση της λεπτής μεμβράνης, η οποία συνοδεύτηκε από μια πιο ομοιογενή κατανομή του μεγέθους των νανοσωματιδίων που παράχθηκαν στην διαδικασία της φωτοαποδόμησης. Διεξήγαγαν επίσης μια πειραματική προσέγγιση της διαδικασίας της φωτοαποδόμησης. Τα παραγόμενα νανοσωματίδια συλλέχθηκαν σε κατάλληλα υποστρώματα, και εκτελέστηκε μια μικροσκοπική ανάλυση της ατομικής δύναμης. Μια $\approx 2 \times$ στένωση των νανοσωματιδίων παρατηρήθηκε στην περίπτωση της φωτοαποδόμησης μιας χρυσής λεπτής μεμβράνης, γεγονός που προσεγγίζει ικανοποιητικά τις θεωρητικές προβλέψεις. Επιπλέον, παρουσιάστηκαν ενδιαφέρουσες αλλαγές στο σχήμα των νανοσωματιδίων, οι οποίες συσχετίστηκαν με τις αλλαγές στη δυναμική του πλουμίου των νανοσωματιδίων. Τα αποτελέσματα της έρευνας αυτής υποδηλώνουν ότι η υπερβραχέα φωτοαποδόμηση με laser λεπτών υμενίων είναι μια βιώσιμη οδός για την επίτευξη μιας πιο ομοιόμορφη κατανομής του μεγέθους των νανοσωματιδίων.

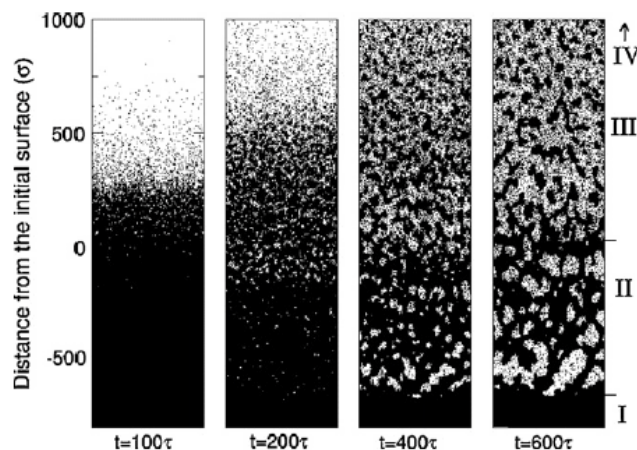
Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοαποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών με διάρκεια 100 σε δοκίμιο διαστάσεων $28 \text{ nm} \times 0.4 \text{ nm} \times 120 \text{ nm}$ και σε πυκνότητες ροής μέχρι $1 \text{ J} / \text{cm}^2$. Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Morse.



Σχήμα 3.11: Στιγμιότυπα της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου της φωτοαποδόμησης του υλικού σε 3 διαφορετικές χρονικές στιγμές. [43]

Οι **Lewis & Perez**[42] μελέτησαν τη φωτοαποδόμηση με laser χρησιμοποιώντας ένα απλό δισδιάστατο μοντέλο Μοριακής Δυναμικής(MD) , λαμβάνοντας υπόψη τη θερμοδυναμική εξέλιξη του συστήματος. Μέσω της ταυτοποίησης των θερμοδυναμικών οδών που λαμβάνουν χώρα έπειτα από την ακτινοβολία του υλικού, το μοντέλο τους προσέφερε σημαντικές γνώσεις σχετικά με τους φυσικούς μηχανισμούς που οδηγούν στην φωτοαποδόμηση. Αποδείχθηκε συγκεκριμένα ότι οι μηχανισμοί αυτοί εξαρτώνται ιδιαίτερα από την ροή του laser, και στην πραγματικότητα καθορίζονται από το πραγματικό ποσό της ενέργειας που λαμβάνεται στο πλαίσιο διαφόρων περιοχών του στόχου. Επιπλέον, εσωτερικοί ή εξωτερικοί παράγοντες, όπως η αδρανειακή συγκράτηση, διαδραματίζουν βασικό ρόλο στον καθορισμό της διαδρομής της φωτοαποδόμησης. Αποδείχθηκε επίσης, για υπερβραχέους παλμούς σε έντονα απορροφητικά υλικά, η φωτοαποδόμηση προχωρά είτε με θρυμματίση, με έκρηξη ή με κατακερματισμό φάσης. Για μεγαλύτερους παλμούς, η φωτοαποδόμηση μπορεί επίσης να προχωρήσει με ασήμαντο κατακερματισμό.

Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοαποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών με διάρκεια 100fs σε δοκίμιο από πυρίτιο. Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Lennard-Jones.



Σχήμα 3.12: Στιγμιότυπα της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου της φωτοαποδόμησης του υλικού σε 4 διαφορετικές χρονικές στιγμές για ένταση ροής $F = 2.8 F_{th}$ και διάρκεια παλμού $\Delta t = 0.6 \tau_a$ [42]

3.2 Συνοπτικός πίνακας διάφορων ερευνητικών μελετών

Imanova,Atanasov et al.	Μελέτησαν την επίδραση του δυναμικού Morse και του δυναμικού EAM με βάση την περιγραφή από τις ιδιότητες και τη διαδικασία υπερβραχέας φωτοαποδόμησης με laser σε Fe με τη μέθοδο τη μοριακής δυναμικής (MD).Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών ($\lambda = 800 \text{ nm}$) με διάρκεια 100 fs και μήκος κύματος 800 nm σε δοκίμιο διαστάσεων $2.87 \text{ nm} \times 2.87 \text{ nm} \times 2.87 \text{ nm}$ (2000 άτομα) και σε πυκνότητες ροής κάτω από το όριο φωτοαποδόμησης μέχρι $1 \text{ J} / \text{cm}^2$. Στην έρευνα αυτή αναλύεται ο μηχανισμός της κατάλυσης και το πώς εξελίσσεται η όλη διαδικασία και η θερμοκρασία
Xinwei Wang & Xianfan Fu	Μελέτησαν με τη μέθοδο της μοριακής δυναμικής (MD) τα θερμικά και θερμομηχανικά φαινόμενα που προκαλούνται από τη picosecond θέρμανση με λέιζερ.Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών με διάρκεια 100 fs σε δοκίμιο από αργό με 1,944,000 άτομα και σε πυκνότητες ροής κάτω από το όριο φωτοαποδόμησης μέχρι $0.12 \text{ J} / \text{m}^2$.Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Lennard-Jones.
Chengjuan Yang et al.	Μελέτησαν τα θερμοδυναμικά φαινόμενα στο κρυσταλλικό πυρίτιο όταν αυτό ακτινοβολείται από ένα υπερταχέως παλμό λέιζερ χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής (MD). Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερταχέων παλμών με διάρκεια 200 fs σε δοκίμιο από πυρίτιο διαστάσεων $1.63 \text{ nm} \times 1.67 \text{ nm} \times 9.87 \text{ nm}$ (1296 άτομα) και σε πυκνότητες ροής μέχρι $90 \text{ J} / \text{m}^2$.Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Stillinger-Weber.
Nedialkov et al.	Διερευνήσαν πειραματικά και θεωρητικά τη φωτοαποδόμηση με laser του σιδήρου.Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών ($\lambda = 800 \text{ nm}$) με διάρκεια 100 fs και μήκος κύματος 800 nm σε δοκίμιο από σίδηρο διαστάσεων $4.3 \text{ nm} \times 4.3 \text{ nm} \times 30 \text{ nm}$ και σε πυκνότητες ροής μέχρι $100 \text{ J} / \text{cm}^2$.Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Morse.
Lorazo et al.	Έκαναν μια πιο ρεαλιστική ανάλυση του φαινομένου της φωτοαποδόμησης , μαζί με μια σημαντική επέκταση της κλίμακας χρόνου.Παρατηρήθηκε επίσης ότι πάνω από ένα χαρακτηριστικό κατώφλι ενέργειας της τάξεως των $0.30 \text{ J} / \text{cm}^2$, λαμβάνει χώρα η εξώθηση μεγάλων κομματιών λιωμένου υλικού από τον στόχο και τα οποία αποβάλλονται με αξονική ταχύτητα περίπου $1000 \text{ m} / \text{s}$. Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Stillinger-Weber και το υλικό που προσομοιώθηκε είναι το πυρίτιο.
Atanasov et al.	Ερεύνησαν τη φωτοποδόμηση με laser του νικελίου με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής (MD) .Η προσομοίωση MD έγινε σε πυκνότητες ροής μέχρι $70 \text{ mJ} / \text{cm}^2$ και το υλικό που προσομοιώθηκε είναι το νικέλιο.
Jeschke et al.	Ερεύνησαν την υπερταχέα φωτοποδόμηση με laser του πυριτίου τόσο πειραματικά όσο και θεωρητικά.Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερταχέων παλμών με μήκος κύματος 780 nm σε δοκίμιο από πυρίτιο.
Nediakov & Atanasov	Ερεύνησαν για πρώτη φορά για βαθειά οπή τη φωτοαποδόμηση του σιδήρου από υπερβραχέους παλμούς laser με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής (MD).Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών με διάρκεια 100 fs και μήκος κύματος 800 nm σε δοκίμιο από σίδηρο διαστάσεων $30 \text{ nm} \times 1 \text{ nm} \times 35 \text{ nm}$ και σε πυκνότητες ροής μέχρι $3 \text{ J} / \text{m}^2$.
Zhakhovskii et al.	Ερεύνησαν το θερμό λιώσιμο υλικού με femtosecond παλμούς laser με διάρκεια $\tau_L = 40 - 100 \text{ fs}$ το οποίο είχε σαν αποτέλεσμα το σχηματισμό μιας θερμομηχανικής έντονης κατάστασης.Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών σε πυκνότητες ροής μέχρι $1 \text{ J} / \text{cm}^2$.Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό EAM.
Cao & Shin	Διερευνήσαν τη φωτοαποδόμηση με λέιζερ του αλουμινίου και του χαλκού με έκρηξη φάσης μέσω ενός μοντέλου πολλαπλής κλίμακας και με πειραματική επαλήθευση.Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερταχέων παλμών σε δοκίμια διαστάσεων $20 \text{ nm} \times 20 \text{ nm} \times 32 \text{ nm}$ και σε πυκνότητες ροής μέχρι $12 \text{ J} / \text{cm}^2$.Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό MEAM.
Gacek & Wang	Μελέτησαν με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής (MD) τη διάσπαση του λοφίου σε πικο-δευτερόλεπτη φωτοαποδόμηση με laser σε ενιάερα περιβάλλον.Φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερταχέων παλμών με διάρκεια 200 fs και μήκος κύματος 800 nm σε αέριο διαστάσεων $32.5 \text{ nm} \times 2.7 \text{ nm} \times 3627 \text{ nm}$ (337 500 άτομα) και σε πυκνότητες ροής μέχρι $7 \text{ J} / \text{m}^2$.

Norman et al.	Μελέτησαν τη διαδικασία της φωτοαποδόμησης ενός στόχου χρυσού από παλμούς ακτινοβολίας λέιζερ διάρκειας φεμτο και πεμτοδευτερολέπτων με αριθμητικές προσομοιώσεις χρησιμοποιώντας ένα ατομιστικό μοντέλο αλληλεπίδρασης ιόντων με τη θερμοκρασία των ηλεκτρονίων. Η προσομοίωση MD που έκαναν αφορά φωτοποδόμηση με λέιζερ σε δοκίμιο από χρυσό χρησιμοποιώντας ένα ατομιστικό μοντέλο αλληλεπίδρασης ιόντων με τη θερμοκρασία των ηλεκτρονίων ,όπου χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό ETD.
Perez & Lewis	Μελέτησαν την φωτοαποδόμηση των στερεών υπό παλμούς λέιζερ διάρκειας φεμτοδευτερολέπτων χρησιμοποιώντας ένα διδιάστατο μοντέλο μοριακής δυναμικής (MD). Οι προσομοιώσεις έδειξαν ότι διαφορετικές καταστάσεις εξέπλωσης αναπτύσσονται ως συνάρτηση της ενέργειας εισόδου
Nedialkov, Amoruso et al.	Έρευνήσανε μια υπερβραχεία μικροκατεργασία μετάλλων με λέιζερ, τόσο από την άποψη των βασικών φυσικών διεργασιών, όσο και από την άποψη των τεχνολογικών επιπτώσεων. φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών με διάρκεια 100 και 300 fs και μήκος κύματος 527 και 800 nm σε δοκίμιο από νικέλιο διαστάσεων 17.6 nm x 1.1 nm x 176 nm και σε δοκίμιο από αλουμίνιο διαστάσεων 20 nm x 1.2 nm x 243 nm και σε πυκνότητες ροής μέχρι 0.5 J / cm ² . Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Stillinger-Weber.
Amoruso et al.	Μελέτησαν τη φωτοαποδόμηση ενός χρυσού λεπτού φιλμ ,που ακτινοβολείται από υπερβραχέους παλμούς, με τη μέθοδο της μοριακής δυναμικής , και συνέκριναν τα αποτελέσματα με εκείνα ενός μεγάλου στόχου. φωτοποδόμηση με λέιζερ υπερβραχέων παλμών με διάρκεια 100 σε δοκίμιο διαστάσεων 28 nm x 0.4 nm x 120 nm και σε πυκνότητες ροής μέχρι 1 J / cm ² . Στην έρευνα αυτή χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Morse.
Lewis & Perez	Μελέτησαν τη φωτοαποδόμηση με laser χρησιμοποιώντας ένα απλό διδιάστατο μοντέλο Μοριακής Δυναμικής (MD) , λαμβάνοντας υπόψη τη θερμοδυναμική εξέλιξη του συστήματος.φωτοαποδόμηση με laser λαμβάνοντας υπόψη τη θερμοδυναμική εξέλιξη του συστήματος. Μέσω της ταυτοποίησης των θερμοδυναμικών οδών που λαμβάνουν χώρα έπειτα από την ακτινοβολήση του υλικού, το μοντέλο τους προσέφερε σημαντικές γνώσεις σχετικά με τους φυσικούς μηχανισμούς που οδηγούν στην φωτοαποδόμηση.

Κεφάλαιο 4

Η θεωρία της Μοριακής Δυναμικής

4.1 Εισαγωγή

Η ουσία της μεθόδου προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής είναι η αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Νεύτωνα, για ένα σύνολο ατόμων. Οι εξισώσεις αυτές ολοκληρώνονται με αριθμητικές τεχνικές σε εξαιρετικά μικρά χρονικά διαστήματα (2-3 femtoseconds), και οι στατιστικοί μέσοι ισορροπίας υπολογίζονται ως χρονικοί μέσοι στο διάστημα παρατήρησης. Βασικά, απαιτείται η γνώση της ηλεκτρονιακής θεμελιώδους κατάστασης σε κάθε γεωμετρία συστήματος, έτσι ώστε να έχουμε μια σωστή περιγραφή των διατομικών δυνάμεων. Όπως συνάγεται από τα παραπάνω, η Μοριακή Δυναμική είναι μια ντετερμινιστική τεχνική: δεδομένου ενός συνόλου συντεταγμένων και ταχυτήτων των ατόμων καθώς και του τύπου των αλληλεπιδράσεων μεταξύ τους, η μετέπειτα χρονική εξέλιξη του συστήματος είναι ουσιαστικά προδιαγεγραμμένη. Το μόνο σημείο όπου κάποιος παράγοντας τυχαιότητας υπεισέρχεται σε αυτή τη μέθοδο, είναι στην εκλογή της αρχικής κατανομής ταχυτήτων και θέσεων των ατόμων. Για να καταστήσουμε πρακτικά εφαρμόσιμες τις ατομικές μελέτες προσομοίωσης, απαιτείται ένα κλασσικό ή ημι-κλασσικό δυναμικό, από το οποίο μπορούν να υπολογιστούν οι διατομικές δυνάμεις. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω μιας κατάλληλης εμπειρικής συνάρτησης ενέργειας δυναμικού, η οποία ικανοποιεί διάφορα αυστηρά κριτήρια για τις ιδιότητες του υλικού, στις οποίες συμπεριλαμβάνονται η σταθερά πλέγματος, η ενέργεια εξάχνωσης, η συμπίεστικότητα, οι σταθερές ελαστικότητας, η εξίσωση φάσης και η σταθερότητα του ίδιου του κρυστάλλου.

Η προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής παίζει έναν εξαιρετικά σημαντικό ρόλο στην ανάλυση της συμπεριφοράς των υλικών σε ατομικό επίπεδο, η οποία δε μπορεί να επιτευχθεί με άλλες θεωρητικές μεθόδους ή πειράματα. Αποτελεί μια μεθοδολογία εξέτασης των στατιστικών ιδιοτήτων συστημάτων συμπυκνωμένης ύλης. Η πρόβλεψη της συμπεριφοράς των υλικών, βασιζόμενη σε μια ανάλυση ατομικού επιπέδου, παρέχει χρήσιμες και ακριβείς πληροφορίες για μια πληθώρα εφαρμογών, που αφορούν στην επιστήμη των υλικών, την τριβολογία και τις κατεργασίες.

Στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, οι διατομικές δυνάμεις δεσμών (ελκυστικές και απωστικές) ορίζονται μέσω μιας κατάλληλης εμπειρικής συνάρτησης ενέργειας δυναμικού. Η βάση όλων των μεθόδων μοριακής προσομοίωσης είναι ο καθορισμός μιας συνάρτησης δυναμικού, μέσω της οποίας γίνεται ο υπολογισμός της δυναμικής ενέργειας του συστήματος προσομοίωσης, σαν συνάρτηση των συντεταγμένων των ατόμων που το απαρτίζουν. Με γνωστή τη συνάρτηση αυτή, υπολογίζεται η δύναμη που ασκείται σε καθένα από τα άτομα. Για τα μέταλλα, χρησιμοποιούνται συχνά τα δυναμικά ζεύγους σωμάτων (*pairwise potentials*), όπως τα δυναμικά Morse ή Lennard-Jones. Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής μπορούν να συσχετιστούν με τη δυναμική απόκριση ενός μη-γραμμικού συστήματος ελατηρίου-μάζας (άτομα ή θετικά ιόντα), υπό την εφαρμογή κάποιου φορτίου, ή συνθηκών ταχύτητας ή μετατόπισης. Από την άποψη αυτή, η Μοριακή Δυναμική είναι παρόμοια με άλλες αναλύσεις που εκπονούν οι μηχανικοί σε καθημερινή βάση, όπως η ανάλυση των ταλαντώσεων ενός μηχανικού συστήματος, το οποίο αποτελείται από μια σειρά αταλάντευτων μαζών και αβαρών ελατηρίων και η απόκρισή του υπό γνωστό εξωτερικό φορτίο.

Στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, παρόλο που τα άτομα ταλαντώνονται γύρω από τις θέσεις ελάχιστης ενέργειας, οι ίδιες οι θέσεις ελάχιστης ενέργειας μετακινούνται, καθώς εξελίσσεται η κοπή. Υπάρχουν δύο προσεγγίσεις που περιγράφουν την κίνηση των ατόμων. Σύμφωνα με την πρώτη προσέγγιση, η οποία είναι γνωστή ως «προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής», το αντικείμενο εξέτασης, δηλαδή η θέση κάθε ατόμου, προσδιορίζεται με επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Νεύτωνα με μεγάλο χρόνο διακριτικής ικανότητας (μικρότερο από την περίοδο της ταλάντωσης των ατόμων, η οποία είναι της τάξης των 1×10^{-15} s ή 1fs). Η μέθοδος αυτή όμως είναι αρκετά επίπονη, υπολογιστικά. Για παράδειγμα, ένα φυσικό φαινόμενο που διαρκεί για 1s, πρέπει να προσομοιωθεί σε χρονικά βήματα του 1×10^{-15} s, δηλαδή απαιτούνται 1×10^{15} χρονικές διαβαθμίσεις, για την κίνηση ενός ατόμου διάρκειας 1s. Σύμφωνα με τη δεύτερη προσέγγιση, η οποία ονομάζεται «Ανάλυση Μοριακής Στατικής», ακολουθούνται μόνο οι θέσεις στις οποίες η προκύπτουσα δύναμη πάνω σε κάθε άτομο είναι μηδενική. Βέβαια, στην περίπτωση αυτή τα άτομα ακολουθούν τις θέσεις ελάχιστης δυναμικής ενέργειας. Είναι στην πραγματικότητα μια ψευδο-στατική μέθοδος. Στην προσομοίωση αυτή, μόνο μερικές εκατοντάδες άτομα μπορούν να ληφθούν υπόψη και ως εκ τούτου, καταλήγουμε σε σημαντικά μικρότερο υπολογιστικό χρόνο. Όμως, η ερμηνεία και η ανάλυση των δεδομένων με τη μέθοδο αυτή είναι πιο πολύπλοκη.

Όταν ο αριθμός των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη στο μοριακό μοντέλο μιας διεργασίας γίνεται μεγάλος, οι μέθοδοι κβαντικής μηχανικής γίνονται δυσεπίλυτες. Στις περιπτώσεις αυτές, πρέπει να χρησιμοποιηθεί η προσέγγιση της κλασσικής ή ψευδο-κλασσικής τροχιάς. Στις μεθόδους αυτές, ο πυρήνας θεωρούμε ότι κινείται κλασσικά σε αδιαβατική επιφάνεια δυναμικής ενέργειας.

Αν οι αρχικές στάθμες του συστήματος θεωρηθούν κβαντισμένες, η διαδικασία ονομάζεται ψευδο-κλασσική. Στη συμβατική προσομοίωση

Μοριακής Δυναμικής, δε γίνεται προσπάθεια να επιλυθεί η πολύπλοκη εξίσωση του Schrödinger για την εύρεση του δυναμικού του συστήματος. Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων μοντελοποιούνται βάσει του εμπειρικού δυναμικού. Το πρόβλημα της προσομοίωσης οποιασδήποτε μοριακής διεργασίας, είτε πρόκειται για χημική αντίδραση, είτε για φυσική διαδικασία, όπως η κατεργασία, περιλαμβάνει τέσσερα βασικά τμήματα, δηλαδή:

- (α) τη διατύπωση και την ολοκλήρωση των κλασσικών εξισώσεων της κίνησης, για τα άτομα που συνιστούν το σύστημα που μας ενδιαφέρει
- (β) την επιλογή του μοριακού μοντέλου,
- (γ) την ανάπτυξη μιας συνάρτησης δυναμικής ενέργειας επαρκούς ακρίβειας και
- (δ) την προσομοίωση των πειραματικών συνθηκών.

Πρέπει να δοθεί ιδιαίτερη σημασία σε καθένα από αυτά τα βήματα, ώστε τα αποτελέσματα που θα προκύψουν από τις προσομοιώσεις να είναι χρήσιμα, γιατί η ερμηνεία και την πρόβλεψη των πειραματικών δεδομένων. [63-65]

4.2 Είδη Ατόμων

4.2.1 Νευτώνια Άτομα

Στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, η αριθμητική ολοκλήρωση των κλασσικών εξισώσεων του Νεύτωνα για την κίνηση, πραγματοποιείται σε ένα σύνολο ατόμων (Νευτώνια άτομα). Έτσι ισχύει

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{d(m\mathbf{v}_i)}{dt} = \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \mathbf{F}_i$$

όπου m είναι η μάζα του ατόμου και \mathbf{r}_i , \mathbf{v}_i , \mathbf{p}_i και \mathbf{F}_i είναι η θέση, η ταχύτητα, ορμή και η δύναμη που ασκείται στο άτομο i , αντίστοιχα. Το αποτέλεσμα της προσομοίωσης είναι οι τροχιές των ατόμων, καθώς και οι ταχύτητές τους. Η δύναμη \mathbf{F}_i σε ένα άτομο i , είναι η κλίση της συνάρτησης δυναμικού ($\Sigma\Delta$) ως προς τη θέση του ατόμου i , π.χ.

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_a})$$

όπου

V = συνάρτηση ενέργειας δυναμικού

N_a = αριθμός ατόμων

$\mathbf{r}_i = x_i \mathbf{i} + y_i \mathbf{j} + z_i \mathbf{k}$ είναι η θέση του διανύσματος του ατόμου i , όπου x_i, y_i και z_i είναι οι συντεταγμένες του ατόμου i και

$$\nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y_i} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z_i} \mathbf{k}$$

Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής διεξάγονται μέσω μιας σειράς χρονικών βημάτων, τα οποία αποτελούνται από:

- (α) άθροιση των ζευγών δυνάμεων για κάθε άτομο,
- (β) υπολογισμός των νέων ταχυτήτων και μετατοπίσεων σε κάθε βήμα,
- (γ) προσδιορισμός των νέων θέσεων των ατόμων, και
- (δ) έλεγχος διατήρησης της ενέργειας.

Για να δοθεί μια εκτίμηση της υπολογιστικής δυνατότητας που απαιτείται στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, πρέπει να σημειωθεί ότι το πλήθος των διαφορικών εξισώσεων που πρέπει να επιλυθούν είναι $6N$, όπου N το πλήθος των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη στο τεμάχιο, το οποίο μπορεί να ποικίλλει από μερικές εκατοντάδες ως αρκετές χιλιάδες άτομα. Όσο μεγαλύτερο το πλήθος, τόσο μεγαλύτερος και ο χρόνος επεξεργασίας. Σε γενικές γραμμές, 2000-10000 άτομα λαμβάνονται υπόψη σε κάθε προσομοίωση. Έτσι, ένα μοντέλο 2000 ατόμων, απαιτεί την επίλυση 12000 συζευγμένων, διαφορικών εξισώσεων κίνησης πρώτης τάξης. Στις περισσότερες προσομοιώσεις κατεργασιών, η συνάρτηση ενέργειας δυναμικού που χρησιμοποιείται, είναι η άθροιση των ζευγών αλληλεπιδράσεων. Το συνολικό πλήθος των ανά ζεύγη όρων σε ένα τέτοιο δυναμικό δίνεται από τη σχέση $N(N-1)/2$. Άρα, για $N=2000$, περίπου 2×10^6 ανά ζεύγη όροι πρέπει να υπολογισθούν σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης. Άρα συνολικά για τον υπολογισμό μιας τροχιάς, απαιτούνται 8×10^6 υπολογισμοί, αφού σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης απαιτούνται τέσσερις τέτοιοι υπολογισμοί. Ως εκ τούτου, ο υπολογιστικός χρόνος αυξάνεται πολύ γρήγορα, καθώς αυξάνεται το πλήθος των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη. Όμως, το μοντέλο πρέπει να παρουσιάζει «σύγκλιση μεγέθους», δηλαδή, τα τελικά αποτελέσματα δεν πρέπει να είναι ευαίσθητα στην προσθήκη νέων ατόμων στο μοντέλο. Για να προσδιορίσουμε αν ένα μοντέλο παρουσιάζει σύγκλιση μεγέθους, πρέπει να προηγηθούν εμπειρικές μελέτες, στις οποίες προσδιορίζεται η ευαισθησία των τελικών αποτελεσμάτων ανάλογα με το πλήθος των ατόμων. Το βέλτιστο πλήθος, είναι η μικρότερη τιμή του N , για την οποία τα τελικά αποτελέσματα κρίνονται επαρκώς ανεπηρέαστα από το N . Τυπικοί χρόνοι επεξεργασίας για ένα μοντέλο επίπεδης, διδιάστατης νανομετρικής κοπής 2000 ατόμων, είναι μερικές ώρες.

4.2.2 Άτομα θερμοστάτες

Στη Μοριακή Δυναμική γίνεται επιλογή του στατιστικού συνόλου που θα χρησιμοποιηθεί. Η επιλογή αφορά στους περιορισμούς που θα επιβληθούν στο σύστημα. Ο λόγος είναι ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης θα αναχθούν σε μακροσκοπικές ιδιότητες των προς προσομοίωση υλικών. Εκτός του μικροκανονικού στατιστικού συνόλου, όλα τα υπόλοιπα έχουν ως περιορισμό την θερμοκρασία. Η ρύθμιση της θερμοκρασίας στην επιθυμητή τιμή, γίνεται με την διαδικασία της θερμοστάτησης. Στην ουσία, το σύστημα αφήνεται να εξελιχτεί για λίγο, χωρίς περιορισμό θερμοκρασίας, και

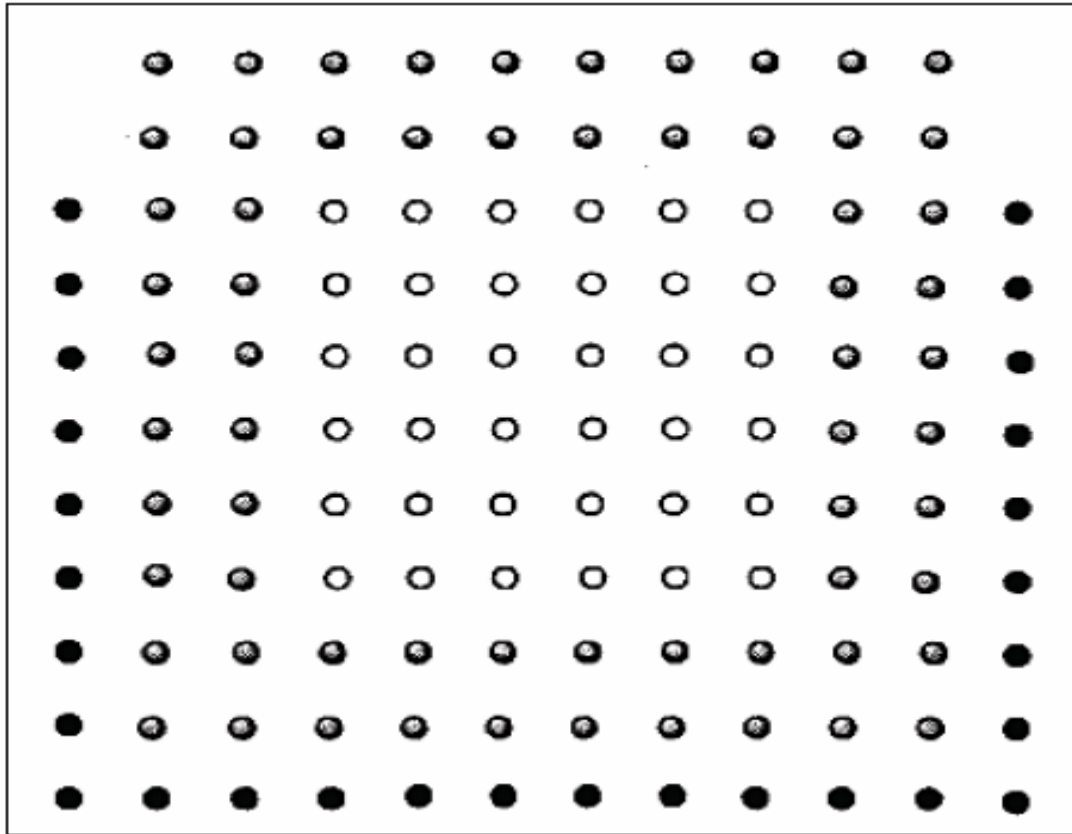
σε τακτά χρονικά διαστήματα, η θερμοκρασία επιβάλλεται να γίνει ίση με την επιθυμητή.

Στη διάρκεια εξέλιξης της Μοριακής Δυναμικής, εξελίχθηκαν διάφοροι αλγόριθμοι θερμοστάτησης, π.χ. Berensen, επανακαθορισμός ταχύτητας (Velocityrescaling), Nosé-Hoover. Οι διαφορές στους αλγορίθμους θερμοστάτησης, έγκειται στον τρόπο με τον οποίο προσαρμόζουν την θερμοκρασία στην επιθυμητή.

Σύμφωνα με την μέθοδο θερμοστάτησης Nosé-Hoover, στο σύστημα εισάγεται ένα «υπερ-μόριο». Το μόριο αυτό αλληλεπιδρά με τα υπόλοιπα του συστήματος επηρεάζοντας την κινητική τους ενέργεια. Ο τρόπος με τον οποίο την επηρεάζει, οδηγεί σε κινητική ενέργεια που αντιστοιχεί στην επιθυμητή θερμοκρασία. Το παραπάνω, είναι ανάλογο με την βύθιση του συστήματος σε λουτρό, με σκοπό τη διατήρηση της θερμοκρασίας σταθερής. [78-79].

4.2.3 Συνοριακά Άτομα

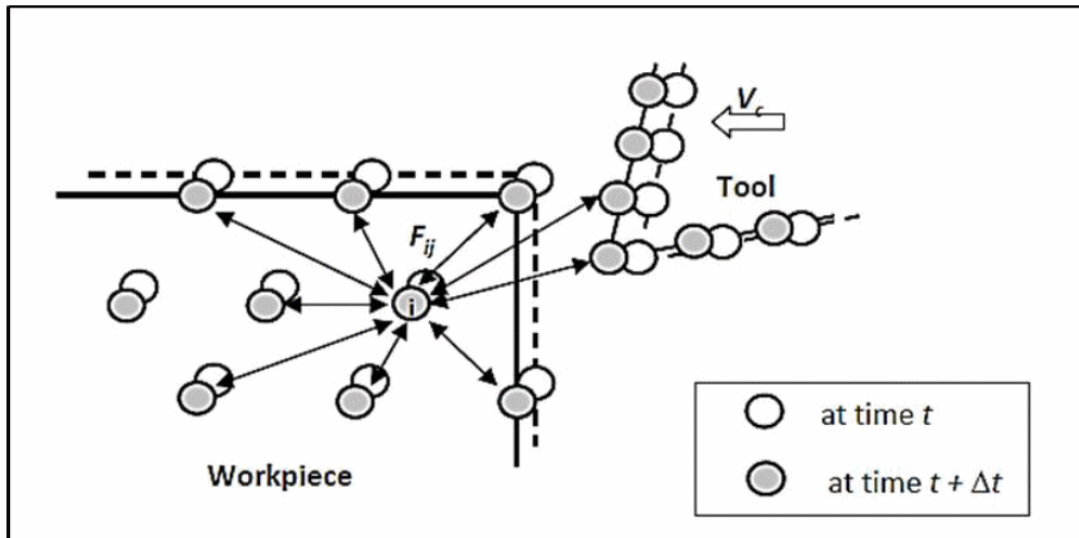
Τα συνοριακά άτομα του εργαλείου και του τεμαχίου θεωρούνται ανεπηρέαστα από την κατεργασία κοπής, καθώς είναι μακριά από την διεπιφάνεια εργαλείου-τεμαχίου. Κατά συνέπεια, οι θέσεις των συνοριακών ατόμων δε θα μεταβληθούν η μια ως προς την άλλη κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής. Στην Εικόνα 4.2, η ακμή του εργαλείου (γεμάτοι κύκλοι) θεωρείται άκαμπτη (δηλ. δεν παραμορφώνεται) ή άπειρης σκληρότητας. Αυτή είναι γενικά η περίπτωση, όταν έναν μαλακό τεμάχιο, όπως η χαλκός ή το αλουμίνιο, κατεργάζεται από ένα σκληρό κοπτικό εργαλείο, όπως ένα εργαλείο από διαμάντι. Εναλλακτικά, οι κοπτικές ακμές αποτελούνται από Νευτώνια άτομα, και τα συνοριακά άτομα μετακινούνται προς τα εξωτερικά τοιχώματα του εργαλείου, όπου στην περίπτωση αυτή, το εργαλείο μπορεί να παραμορφωθεί κατά τον ίδιο τρόπο που παραμορφώνεται και το τεμάχιο κατεργασίας. Αυτή είναι η περίπτωση όπου ένα τεμάχιο από χαλκό κατεργάζεται από ένα σιδερένιο εργαλείο, ή όπου η διαφορετική σκληρότητα των δύο υλικών είναι μικρή. Ομοίως, τα συνοριακά άτομα στην πλευρά μακριά από το εργαλείο στην Εικόνα 4.2 μπορούν να αναπαρασταθούν ως γεμάτοι κύκλοι, ή μπορούν να αντικατασταθούν (μαζί με άτομα θερμοστάτες, άτομα δηλαδή που απορροφούν θερμότητα ώστε να διατηρείται η θερμοκρασία του συνόλου σταθερή) από Νευτώνια άτομα (άδειοι κύκλοι), στην οποία περίπτωση το όριο δεν είναι πλέον άκαμπτο. Η πλαστική παραμόρφωση του εργαλείου, η φθορά του εργαλείου και οι χημικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ του εργαλείου και του τεμαχίου μπορούν να μελετηθούν μέσω αυτής της προσέγγισης. Καθώς η δημιουργία προεξοχών στις κατεργασίες συμβαίνει στην πλευρά εξόδου του τεμαχίου λόγω έλλειψης περιορισμού ακαμψίας, στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής τα συνοριακά άτομα (μαζί με τα άτομα θερμοστάτες) στη μακρινή πλευρά του τεμαχίου (ως προς την αρχική θέση του εργαλείου) απομακρύνονται, ώστε να επιτραπεί η παραμόρφωση των ατόμων χωρίς περιορισμό, όταν μοντελοποιείται η αστοχία εξόδου ή η δημιουργία προεξοχών. Τα άτομα που βρίσκονται σε δύο γειτονικά στρώματα ως προς τα οριακά άτομα, λειτουργούν ως θερμοστατικά άτομα.



***Εικόνα 4.1:** Δισδιάστατη αναπαράσταση των διαφόρων ζωνών ενός τεμαχίου. Οι άδειοι κύκλοι, O , είναι στην πρωταρχική ζώνη, όπου η κίνηση ελέγχεται μόνο με επίλυση των κλασσικών εξισώσεων κίνησης. Οι σκιασμένοι γκρι κύκλοι, είναι στη ζώνη Q , όπου οι ταχύτητες ορίζονται ξανά μετά από χρονικό διάστημα Δt . Οι γεμάτοι κύκλοι, είναι στο όριο της ζώνης B . Είναι στάσιμοι και εξυπηρετούν την ίδια λειτουργία με το σφιγκτήρα του εργαλείου κατεργασίας. Διατηρούν το τεμάχιο σταθερό κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής, λείανσης ή οδόντωσης.*

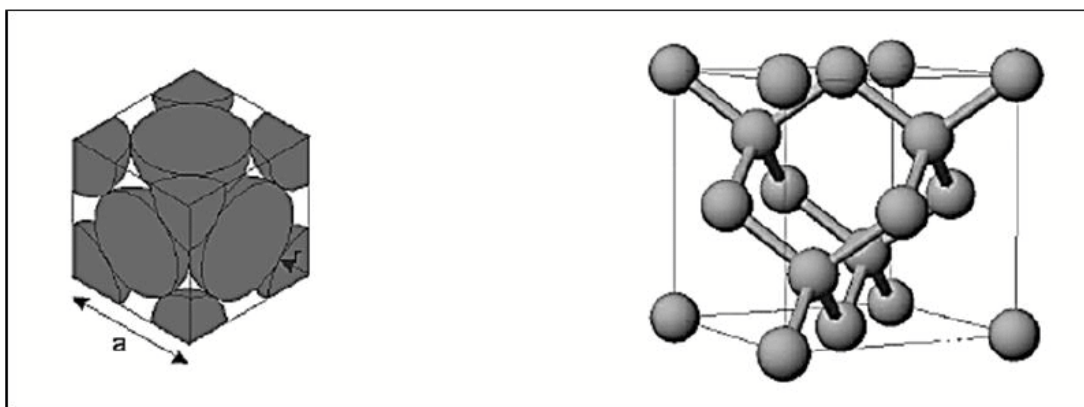
4.3 Συναρτήσεις Δυναμικού Ενέργειας

Όποτε αντιμετωπίζουμε ένα πρόβλημα σε ατομικό επίπεδο, όπως στην περίπτωση της προσομοίωσης της νανοκοπής μέσω Μοριακής Δυναμικής, είναι απαραίτητο να λάβουμε υπόψη τις δυνάμεις που υπάρχουν μεταξύ των ατόμων, διότι αυτές είναι κυρίως οι δυνάμεις που « αποφασίζουν » τι θα συμβεί σε οποιοδήποτε φυσικό φαινόμενο. Όπως φαίνεται και στην Εικόνα 4.2, σε κάθε χρονικό βήμα (Δt) κάθε άτομο αλλάζει θέση και αλληλεπιδρά με τα γειτονικά του άτομα με τρόπο, ο οποίος μπορεί να προσδιοριστεί από τη συνάρτηση διατομικών δυναμικών.



Εικόνα 4.2: Αλληλεπίδραση ατόμων στη νανοκοπή [77]

Παρόλο που η ακρίβεια του δυναμικού υπαγορεύει την ποιότητα των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης η συναρτησιακή του πολυπλοκότητα προσδιορίζει τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο, για ένα δεδομένο υπολογιστικό σύστημα. Οι διατομικές αυτές δυνάμεις μεταβάλλονται, ανάλογα με το αν το υλικό είναι μέταλλο (κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα fcc, κυβικό χωροκεντρωμένο σύστημα bcc, μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα hcp) ημιαγωγός, κεραμικό ή γυαλί. Μια έκφραση δυναμικού που αναπτύσσεται για μια κατηγορία υλικών, κατά πάσα πιθανότητα, δε θα μπορεί να εφαρμοσθεί ικανοποιητικά σε άλλες κατηγορίες υλικών, λόγω του ότι οι διατομικές δυνάμεις είναι διαφορετικές. Κατά συνέπεια, είναι απαραίτητο να αναπτυχθεί μια έκφραση δυναμικού για κάθε κατηγορία υλικών.



Εικόνα 4.3: (a)κυβικόεδροκεντρωμένο σύστημα fcc (b) μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα hcp

Δυστυχώς, η ανάπτυξη μιας έκφρασης δυναμικού δεν είναι απλή, και απαιτεί σημαντικό χρόνο και εμπειρία. Ευτυχώς, οι εκφράσεις δυναμικού έχουν αναπτυχθεί για ένα εύρος υλικών και η έρευνα βρίσκεται σε εξέλιξη για άλλα υλικά. Για παράδειγμα, τα δυναμικά Morse και Lennard- Jones εφαρμόστηκαν αρχικά σε μέταλλα με κυβική δομή. Η έκφραση δυναμικού πολλών σωματιδίων (EmbeddedAtomMethod – EAM) αναπτύχθηκε ως βελτίωση για ένα μεγάλο εύρος υλικών. Ομοίως, τα δυναμικά Brenner και Tersoff αναπτύχθηκαν για υλικά με ομοιοπολικούς δεσμούς, όπως το πυρίτιο, το γερμάνιο, ακόμα και το διαμάντι. Το δυναμικό Born- Meyer αναπτύχθηκε ειδικά για κάποια κεραμικά. Πρέπει όμως να σημειωθεί, ότι τα δυναμικά αυτά αφορούν σε υλικά μονής φάσης μονοκρυστάλλου, με ένα συγκεκριμένο είδος δεσμών. Για τα πολυκρυσταλλικά υλικά, τα κράματα μετάλλων και για υλικά που είναι μερικώς ιοντικά και μερικώς ομοιοπολικά, απαιτείται η δημιουργία νέων πολυπλοκότερων δυναμικών.

Πρέπει να τονισθεί, ότι η ακρίβεια των τροχιών των ατόμων, που θα προκύψει από την προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, επηρεάζεται σημαντικά από την κατάλληλη επιλογή της έκφρασης δυναμικού. Ως εκ τούτου, η επιλογή μιας κατάλληλης έκφρασης δυναμικού είναι προϋπόθεση. Η ολική ενέργεια του συστήματος, είναι το άθροισμα των κινητικών και δυναμικών ενεργειών. Η κινητική ενέργεια είναι εύκολο να υπολογιστεί, αλλά ο υπολογισμός της δυναμικής ενέργειας είναι πιο πολύπλοκος, αφού εξαρτάται από τις θέσεις όλων των αλληλεπιδρώντων ατόμων. Η δυναμική ενέργεια παίζει κεντρικό ρόλο στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής. Πρώτον, η δύναμη που δρα πάνω σε κάθε άτομο είναι ανάλογη της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης δυναμικού. Δεύτερον, η ολική ενέργεια πρέπει να παρακολουθείται προσεκτικά σε μια προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής.

Υπάρχουν δύο προσεγγίσεις για τον προσδιορισμό των διατομικών δυναμικών. Η πρώτη μέθοδος είναι μια *abinitio* μέθοδος, ενώ η δεύτερη χρησιμοποιεί βασικά εμπειρικά δυναμικά. Στην *abinitio* μέθοδο, οι παράμετροι της συνάρτησης δυναμικού μπορούν να προσδιοριστούν, θεωρητικά, επιλύοντας την κυματική εξίσωση του Schrödinger. Όμως, στην πράξη είναι δύσκολο να βρεθούν οι διατομικές δυνάμεις με αυτή τη μέθοδο, με εξαίρεση ορισμένα πολύ απλά συστήματα.

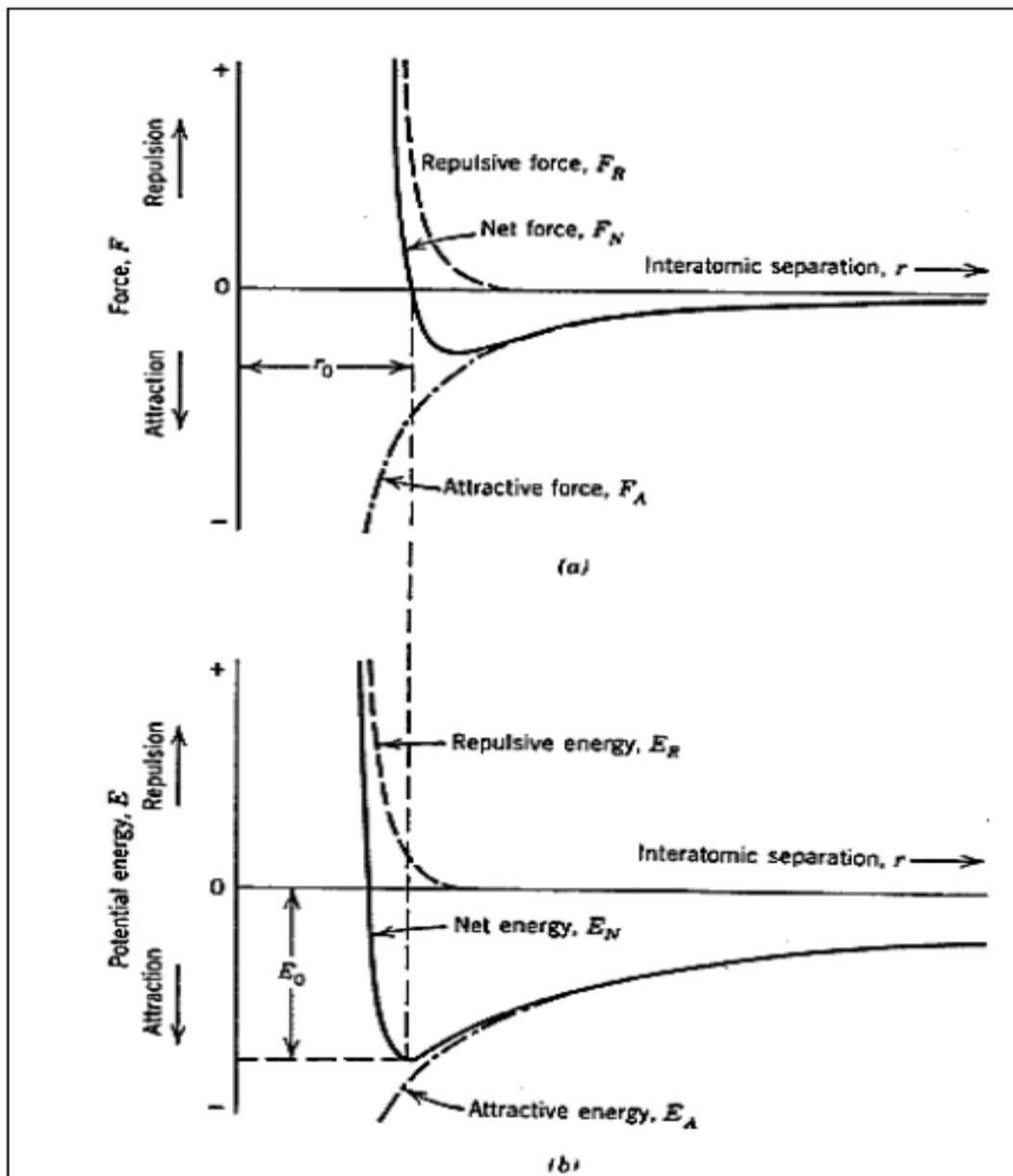
Πρέπει να τονισθεί ότι ο όρος εμπειρικός μπορεί να είναι παραπλανητικός ή υπεραπλουστευτικός. Στην πραγματικότητα, τα δυναμικά αυτά παρουσιάζουν μια πιο ρεαλιστική άποψη των ατομικών αλληλεπιδράσεων, σε σύγκριση με τα δυναμικά που προκύπτουν από καθαρά θεωρητικές προσεγγίσεις. Τα εμπειρικά δυναμικά βασίζονται σε απλές μαθηματικές εκφράσεις για τις ανά ζεύγη αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο ατόμων ή ιόντων, και περιέχουν μία ή περισσότερες παραμέτρους προσαρμοσμένες στα πειραματικά δεδομένα. Η εγκυρότητα της συνάρτησης καθώς και η σταθερότητα του κρυστάλλου για ένα δεδομένο υλικό, ελέγχονται για διάφορες ιδιότητες, όπως είναι η ενέργεια συνοχής, η θερμοκρασία Debye, η σταθερά πλέγματος, η συμπιεστότητα και οι ελαστικές σταθερές, καθώς και η εξίσωση κατάστασης. Κατά συνέπεια, τα δυναμικά αυτά μπορούν να θεωρηθούν αξιόπιστα για απλά μέταλλα κυβικής δομής.

Σε μεγαλύτερα συστήματα, χρησιμοποιούνται εμπειρικές συναρτήσεις δυναμικού, οι οποίες λαμβάνουν υπόψη παράγοντες όπως την έκταση του ομοιοπολικού δεσμού, τη

μεταβολή της γωνίας του δεσμού λόγω κάμψης, στρέψης ή αλληλεπιδράσεων vanderWaals και Coulomb. Αυτή είναι η δεύτερη και πιο συνήθης μέθοδος, όπου οι παράμετροι προσδιορίζονται βάσει των φυσικών ιδιοτήτων κάθε υλικού. Οι παράμετροι μπορούν να ληφθούν είτε από πειραματικές μελέτες, είτε από υπολογισμούς κβαντικής μηχανικής. Η διατομική δυναμική ενέργεια συνήθως λαμβάνεται ως το άθροισμα των (εμπειρικών) δυναμικών των n σωμάτων, το οποίο εξαρτάται μόνο από την απόσταση μεταξύ των ατόμων. Τα δυναμικά αυτά κατατάσσονται περαιτέρω, σε δυναμικά δύο, τριών ή περισσότερων σωμάτων, ανάλογα με την ομάδα των ατόμων από τα οποία εξαρτώνται οι όροι του δυναμικού. Στη συνέχεια θα δοθούν οι εκφράσεις μερικών εμπειρικών δυναμικών, που χρησιμοποιούνται ευρέως.

Στην Εικόνα 4-4 φαίνεται η εξάρτηση των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυνάμεων (a) και δυναμικών ενεργειών (b), ως συνάρτηση της διατομικής απόστασης, r , δύο απομονωμένων ατόμων. Η ελκτική δύναμη συνδέει τα άτομα μεταξύ τους ενώ η απωστική τα εμποδίζει από το να καταστραφούν λόγω σύγκρουσης. Το μέγεθος των δύο δυνάμεων αυξάνεται, καθώς η απόσταση μεταξύ των ατόμων μειώνεται, και η απωστική δύναμη αυξάνεται γρηγορότερα σε σχέση με την ελκτική. Η καμπυλότητα της έκφρασης ενέργειας δυναμικού προσδιορίζεται κυρίως από την απωστική δύναμη, η οποία υπαγορεύει την ελαστική συμπεριφορά του στερεού.

Το μήκος του δεσμού r_0 , είναι η απόσταση των κέντρων των ατόμων. Οι ισχυροί δεσμοί φέρνουν τα άτομα σε μικρότερη απόσταση, και έτσι το μήκος του δεσμού είναι μικρότερο σε σύγκριση με τους ασθενείς δεσμούς. Στο σημείο r_0 , οι ελκτικές και οι απωστικές δυνάμεις εξισορροποούνται και η συνισταμένη δύναμη είναι μηδενική. Η κατάσταση αυτή αντιστοιχεί σε σταθερή ισορροπία ελάχιστης ενέργειας δυναμικού, το μέγεθος της οποίας είναι η ενέργεια του δεσμού. Οι ιδιότητες συνοχής ενός στερεού, η συμπεριφορά τήξης και ατμοποίησης προσδιορίζονται από το μέγεθος της μέγιστης ενέργειας δεσμού, η οποία καθορίζεται από την ελκτική συνιστώσα της διατομικής δύναμης. Όσο μεγαλύτερη είναι η ενέργεια δεσμού, τόσο μεγαλύτερη είναι η θερμοκρασία τήξης και το μέτρο ελαστικότητας του Young, και τόσο μικρότερος ο συντελεστής θερμικής διαστολής. Η κλίση της καμπύλης της δύναμης στο σημείο r_0 , δίνει το μέτρο ελαστικότητας. Οι μεγάλες «βυθίσεις» του δυναμικού είναι πιο συμμετρικές γύρω από τη θέση ισορροπίας r_0 , σε σχέση με τις πιο «ρηχές» βυθίσεις.



Εικόνα 4.4: Μεταβολή των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυνάμεων (a) και των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυναμικών ενέργειας (b), ως συνάρτηση της διατομικής απόστασης r , μεταξύ δύο απομονωμένων ατόμων

Οι εκφράσεις ενέργειας δυναμικού γενικά αφορούν σε ένα μέτριο εύρος απόστασης ζευγών σε εξαιρετικά μικρά όμως επίπεδα ενέργειας. Αγνοώντας τις διατομικές επιδράσεις κάτω από ένα σημείο αποκοπής, μπορεί να επιτευχθεί μια σημαντική μείωση στο υπολογιστικό χρόνο με ασήμαντη απώλεια ακρίβειας. Η αποκοπή του δυναμικού καταλήγει επίσης και σε παρόμοια αποκοπή στην καμπύλη της δύναμης. Η απόσταση αποκοπής μπορεί να επιλεγεί σε οποιοδήποτε σημείο, αλλά γενικά επιλέγεται σε απόσταση τέτοια, όπου η τιμή της δυναμικής ενέργειας είναι 3 ως 5% της τιμής της δυναμικής ενέργειας ισορροπίας. Στη συνέχεια παρουσιάζονται δύο από τις πιο

σημαντικές συναρτήσεις δυναμικού που χρησιμοποιούνται στη Μοριακή Δυναμική. Στην παρούσα εργασία θα χρησιμοποιηθεί η συνάρτηση δυναμικού Morse.

4.3.1 Δυναμικό Morse

Το δυναμικό Morse είναι μια συχνά χρησιμοποιούμενη έκφραση ενέργειας δυναμικού. Είναι ένα δυναμικό ζεύγους κατάλληλο για τη μοντελοποίηση μετάλλων κυβικής δομής. Το δυναμικό αυτό παράγει απωστικές δυνάμεις σε μικρά εύρη, ελκτικές σε μεσαία και εξασθενεί ομαλά στο μηδέν σε μεγάλα εύρη. Χρησιμοποιεί μια μορφή δυναμικού που περιέχει δύο εκθετικούς όρους αντί για ένα νόμο που εξαρτάται από την ισχύ. Η έκφραση του δυναμικού Morse δίνεται από τη σχέση

$$V_{ij} = D\{\exp[-2a(r_{ij} - r_e)] - 2\exp[-a(r_{ij} - r_e)]\}$$

όπου

r_e και r_{ij} = απόσταση ισορροπίας και στιγμιαία απόσταση μεταξύ των ατόμων i και j , αντίστοιχα D και a = σταθερές που προσδιορίζονται βάσει των φυσικών ιδιοτήτων του υλικού. Για παράδειγμα, τα r_e , D , a λαμβάνονται από την κοντινότερη απόσταση μεταξύ των ατόμων (αποστάσεις ισορροπίας πλέγματος), τη θερμοκρασία Debye και την ενέργεια εξάχνωσης. Η εγκυρότητα της συνάρτησης καθώς και η σταθερότητα του κρυστάλλου για ένα δοσμένο υλικό ελέγχεται ως προς διάφορες ιδιότητες, οι οποίες περιλαμβάνουν την ενέργεια συνοχής, τη σταθερά πλέγματος, τη σταθερά συμπίεστικότητας και ελαστικότητας καθώς και την εξίσωση φάσης και την σταθερότητα του κρυστάλλου.

4.3.2 Δυναμικό Lennard-Jones

Ένα ακόμα απλό δυναμικό ζεύγους για μεταλλικά υλικά, που περιγράφονται βάσει του μοντέλου των σκληρών σφαιρών (hard-sphere model), όπως και στο δυναμικό Morse, και χρησιμοποιείται ευρέως είναι το δυναμικό Lennard-Jones ή δυναμικό «6-12». Το δυναμικό Lennard-Jones δίνεται από τη σχέση

$$V_{ij} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

όπου οι σταθερές σ και ε προσδιορίζονται από τις φυσικές ιδιότητες του υλικού. Βάσει σύμβασης, οι απωστικές δυνάμεις θεωρούνται θετικές και οι ελκτικές αρνητικές. [78]

4.4 Υπολογισμοί Τροχιών με χρήση Αριθμητικής Ολοκλήρωσης

Για τον υπολογισμό οποιασδήποτε ιδιότητας του μελετώμενου συστήματος, αναλύεται μια τροχιά. Η τροχιά είναι ένα σύνολο από χρονικά στιγμιότυπα του συστήματος, στο καθένα από τα οποία αποθηκεύονται οι συντεταγμένες (ή ακόμα και οι ταχύτητες ή και

οι δυνάμεις) για κάθε άτομο. Οποιοσδήποτε υπολογισμός που βασίζεται στην τροχιά, είναι ουσιαστικά στατιστικής φύσης, μιας και λαμβάνονται χρονικές μέσες τιμές από τα στιγμιότυπα που περιέχει η τροχιά. Η αρχική ταχύτητα καθενός από τα άτομα επιλέγεται στατιστικά, ώστε να ακολουθεί την κατανομή Maxwell-Boltzmann, βάσει της αρχικής θερμοκρασίας. Ο υπολογισμός της τροχιάς, απαιτεί την αριθμητική ολοκλήρωση των διαφορικών εξισώσεων της κίνησης από την αρχική κατάσταση, η οποία στην περίπτωση μιας κατεργασίας είναι η κατάσταση όπου το κοπτικό εργαλείο πλησιάζει το τεμάχιο, αλλά δεν το έχει ακουμπήσει ακόμα, μέχρι μια τελική κατάσταση, η οποία μπορεί να θεωρηθεί, η στιγμή που ένα στρώμα υλικού έχει αφαιρεθεί από το τεμάχιο.

Υπάρχει μια πληθώρα διαθέσιμων μεθόδων, που μπορούν να πραγματοποιήσουν την ολοκλήρωση αυτή, από τις οποίες η Runge-Kutta τέταρτης τάξης, είναι η πιο χρησιμοποιούμενη, διότι παρουσιάζει αρκετά πλεονεκτήματα. Πρώτον, είναι αυτοεκκινούμενη και έτσι δεν είναι απαραίτητο να είναι γνωστές οι τιμές του Y , το οποίο είναι ένα διάνυσμα στήλη, του οποίου τα στοιχεία είναι οι συντεταγμένες και η συνολική ορμή τους σε μια χρονική στιγμή πριν από την t_0 . Δεύτερον, το τοπικό σφάλμα σε ένα γνωστό βήμα ολοκλήρωσης είναι της τάξης του h^5 , (όπου h είναι το χρονικό βήμα ολοκλήρωσης). Επομένως η μέθοδος αυτή κατά συνέπεια παρέχει καλή ακρίβεια. Τρίτον, η μέθοδος είναι σταθερή και μπορεί εύκολα να προγραμματιστεί. Δύο μειονεκτήματα που σχετίζονται με αυτή τη μέθοδο είναι: (α) δεν παρέχει καμιά εκτίμηση για την ακρίβεια με την οποία έχει γίνει η ολοκλήρωση και (β) 24 N παράγωγοι πρέπει να υπολογισθούν σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης. Το πρώτο μειονέκτημα δεν είναι και τόσο σημαντικό, καθώς η ακρίβεια μπορεί να εκτιμηθεί με την παρακολούθηση της ενέργειας και άλλων σταθερών της κίνησης, κατά τη διάρκεια της ολοκλήρωσης. Η εμπειρία δείχνει ότι αν οι ποσότητες αυτές παραμένουν σταθερές σε τέσσερα ή πέντε σημαντικά ψηφία, η ακρίβεια είναι συνήθως επαρκής για τις περισσότερες εφαρμογές. Επίσης, μπορεί να εφαρμοσθεί μια διαδικασία μείωσης του εύρους του βήματος. Στη μέθοδο αυτή, η ευαισθησία των τελικών αποτελεσμάτων ως προς το h , λαμβάνεται με διαδοχικές ολοκληρώσεις με συνεχώς μικρότερες τιμές του h . Με εμπειρικό προσδιορισμό της μεγαλύτερης τιμής του h , για την οποία τα τελικά αποτελέσματα είναι ανεξάρτητα του h , μπορεί να ληφθεί το κατάλληλο μέγεθος βήματος. Τελικά, η ακρίβεια της ολοκλήρωσης μπορεί να ελεγχθεί με πίσω ολοκλήρωση της τροχιάς. [77]

4.4.1 Μέθοδος Βατραχοδρασκελισμών (Leapfrog-Type Method)

Η μέθοδος αυτή βασίζεται στο ανάπτυγμα Taylor της θέσης $x(t)$ συναρτήσει του χρόνου t , το οποίο φαίνεται στη συνέχεια:

$$x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{x}(t) + O(h^3)$$

$$x(t-h) = x(t) - h\dot{x}(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{x}(t) + O(h^3)$$

όπου:

$h = \Delta t$

είναι το χρονικό βήμα.

Στη μέθοδο αυτή, το ανάπτυγμα Taylor μπορεί να γίνει ως εξής:

$$x(t+h) = x(t) + h\left(\dot{x}(t) + \frac{h}{2}\ddot{x}(t)\right) + O(h^3) = x(t) + h\dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right)$$

$$x(t-h) = x(t) - h\left(\dot{x}(t) - \frac{h}{2}\ddot{x}(t)\right) + O(h^3) = x(t) - h\dot{x}\left(t - \frac{h}{2}\right)$$

Αφαιρώντας τις δύο τελευταίες εξισώσεις, έχουμε:

$$\dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) = \dot{x}\left(t - \frac{h}{2}\right) + h\ddot{x}(t)$$

$$\dot{x}(t+h) = \dot{x}(t) + h\ddot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right)$$

που αποτελεί το αναδρομικό σχήμα της μεθόδου Leapfrog για τον υπολογισμό των θέσεων και των ταχυτήτων των ατόμων.

Ο όρος βατραχοδρασκελισμός προέρχεται από το γεγονός ότι ο υπολογισμός των θέσεων και των ταχυτήτων γίνεται για διαφορετικές χρονικές στιγμές, όπως φαίνεται και από τις προηγούμενες σχέσεις. Βέβαια κάτι τέτοιο δεν αποτελεί πρόβλημα. Για να υπολογιστεί η ταχύτητα τη χρονική στιγμή t , μπορεί να χρησιμοποιηθεί μία από τις παρακάτω σχέσεις:

$$\dot{x}(t) = \dot{x}\left(t - \frac{h}{2}\right) + \frac{h}{2}\ddot{x}(t)$$

$$\dot{x}(t) = \dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) - \frac{h}{2}\ddot{x}(t)$$

Η μέθοδος των βατραχοδρασκεισμών μπορεί να μετασχηματιστεί σε έναν εναλλακτικό, αλγεβρικά ισοδύναμο τρόπο, που επιτρέπει να γίνεται ο υπολογισμός των θέσεων και των ταχυτήτων την ίδια χρονική στιγμή, προκειμένου να αποφεύγεται η αποθήκευση των θέσεων και των ταχυτήτων σε διαφορετικές χρονικές στιγμές και ο μετέπειτα υπολογισμός των ταχυτήτων για τη χρονική στιγμή t , από τις τελευταίες εξισώσεις [77]. Για να γίνει αυτό, οι υπολογισμοί χωρίζονται σε δύο μέρη:

Πριν υπολογιστούν οι τιμές των επιταχύνσεων, γίνεται υπολογισμός των ταχυτήτων για μισό χρονικό βήμα, χρησιμοποιώντας τις παλιές τιμές των επιταχύνσεων, με τη σχέση:

$$\dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) = \dot{x}(t) + \frac{h}{2} \ddot{x}(t)$$

Στη συνέχεια, υπολογίζονται οι συντεταγμένες για ένα ολόκληρο χρονικό βήμα, χρησιμοποιώντας τις ενδιάμεσες τιμές των ταχυτήτων που υπολογίστηκαν από την προηγούμενη σχέση:

$$\dot{x}(t+h) = x(t) + h\dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right)$$

Στο επόμενο βήμα, χρησιμοποιούνται οι καινούριες συντεταγμένες για να υπολογιστούν οι καινούριες τιμές των επιταχύνσεων και στη συνέχεια υπολογίζονται οι ταχύτητες προσθέτοντας και το άλλο μισό χρονικό βήμα, σύμφωνα με τη σχέση:

$$\dot{x}(t+h) = \dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) + \frac{h}{2} \ddot{x}(t+h)$$

4.5 Συναρτήσεις Επανακαθορισμού Ταχυτήτων

Καθώς η πλαστική παραμόρφωση στη ζώνη διάτμησης και η τριβή στη διεπιφάνεια αποβλίττου-εργαλείου μετατρέπονται σε θερμότητα, η θερμότητα αυτή πρέπει να αποβάλλεται διαρκώς. Στις πραγματικές κατεργασίες, μεγάλο μέρος της θερμότητας απομακρύνεται με το απόβλιττο και το λιπαντικό, καθώς και από το εργαλείο και το κατεργαζόμενο υλικό. Η πιο αποτελεσματική μέθοδος προσομοίωσης αποβολής της παραγόμενης κατά την κατεργασία θερμότητας είναι η **χρήση των συναρτήσεων ορισμού θερμότητας**. Η διαδικασία αυτή επιτρέπει τις στατιστικές διακυμάνσεις γύρω από μια θερμοκρασία ισορροπίας.

Για να εφαρμοσθεί η μέθοδος αυτή, τα N άτομα του πλέγματος πρέπει να χωρισθούν σε τρεις ζώνες. Η πρωτεύουσα ζώνη (P- ζώνη) περιέχει τα νευτώνια άτομα που μας ενδιαφέρουν. Μια δευτερεύουσα ζώνη (Q- ζώνη) συνίσταται από όλα τα περιφερειακά άτομα του κρυστάλλου. Τα πιο εξωτερικά άτομα είναι στο όριο ή στη B- ζώνη. Στους υπολογισμούς Μοριακής Δυναμικής, οι κινήσεις των ατόμων της P- ζώνης προσδιορίζονται μόνο από τις δυνάμεις που παράγονται από την αλληλεπίδραση του

δυναμικού και της διαδικασίας κοπής. Οι κινήσεις των ατόμων της Q- ζώνης τροποποιούνται λόγω του επανακαθορισμού ταχυτήτων ή των συναρτήσεων θερμοποίησης, που αφορούν κάθε άτομο της ζώνης. Η συνάρτηση θερμοποίησης για τη x συνιστώσα της ταχύτητας του i -οστού ατόμου του πλέγματος δίνεται από τη σχέση:

$$V_{x_i}^n = (1-w)^{1/2} V_{x_i}^o + w^{1/2} V_{x_i}^r(\xi, T)$$

Όπου

$V_{x_i}^n$ είναι η νέα x συνιστώσα της ταχύτητας για το άτομο την $t = t_n$

$V_{x_i}^o$ είναι η παλιά του ταχύτητα

$V_{x_i}^r(\xi, T)$ είναι η τυχαία ταχύτητα που επιλέγεται από την κατανομή Boltmann σε θερμοκρασία T από ένα τυχαίο πλήθος x .

W είναι μια παράμετρος που ελέγχει τη δύναμη του επανακαθορισμού

Ανάλογες εξισώσεις χρησιμοποιούνται και για τις y και z συνιστώσες της ταχύτητας. Αυτή η διαδικασία επανακαθορισμού, εφαρμόζεται σε κάθε άτομο της Q- ζώνης σε ίσα δομημένα χρονικά διαστήματα Δt .

4.5.1 Συνάρτηση επιθυμητής θερμοκρασίας

Η θερμοκρασία του συστήματος εκφράζεται από το μέσο τετράγωνο των ταχυτήτων των N ατόμων και δίνεται από:

$$T = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{i=1}^N v_i^2 = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{\substack{i=1 \\ j \neq i}}^N (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$$

Αν $|\mathbf{T} - \mathbf{T}_d| \leq 3$, τότε η συνθήκη ικανοποιείται, διαφορετικά απαιτείται ανάθεση νέων ταχυτήτων. \mathbf{T}_d είναι η επιθυμητή θερμοκρασία. Εάν η απόλυτη διαφορά μεταξύ της μετρούμενης θερμοκρασίας και αυτής που επιθυμείται δεν υπερβαίνει τους 3 K τότε η ακρίβεια θεωρείται ικανοποιητική, οπότε η προσομοίωση προχωρά. Σε αντίθετη περίπτωση αναθέτονται νέες ταχύτητες μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο.

4.5.2 Επαναπροσδιορισμός ταχυτήτων

Στην περίπτωση που απαιτείται ανάθεση νέων ταχυτήτων, αυτό γίνεται ακολουθώντας τις παρακάτω εξισώσεις και επιστρέφονται για την επίλυση των εξισώσεων κίνησης με τον αλγόριθμο Verlet.

$$v_i = \sqrt{\frac{T_d}{T}} v_i \quad i = 1, \dots, N$$

$$\begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_i^{\text{New}} = \sqrt{\frac{T_d}{T}} \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_i \quad i = 1, \dots, N$$

Είναι σημαντικό να σημειώσουμε ότι μερικοί θεωρητικοί δε θεωρούν την προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής ως μια πειραματική τεχνική διότι δεν εκτελούνται καθόλου μετρήσεις σε πραγματικά συστήματα, δηλαδή οι προσομοιώσεις της Μοριακής Δυναμικής είναι το αποτέλεσμα καθαρών υπολογισμών. Οι πειραματιστές θεωρούν ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, όπως τα πειράματα, χρησιμοποιούνται για να ελέγξουν τις θεωρίες και υπόκεινται σε προβλήματα αναπαραξιμότητας και στατιστικών σφαλμάτων.

4.6 Μέθοδοι υπολογισμών αλληλεπιδράσεων

Ύστερα από τα βασικά ζητήματα της επιλογής των κατάλληλων δυναμικών ενέργειας και των κατάλληλων εξισώσεων για να περιγραφεί σωστά η δυναμική κατάσταση του συστήματος, σειρά έχει η επιλογή του κατάλληλου τρόπου υπολογισμού των αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα άτομα. Οι πιο συνηθισμένες μέθοδοι υπολογισμού αλληλεπιδράσεων είναι [80]: η **All-pairs method** κατά την οποία υπολογίζονται οι δυνάμεις αλληλεπίδραση μεταξύ όλων των ζευγών ατόμων (και της οποίας το υπολογιστικό κόστος μπορεί να μειωθεί χρησιμοποιώντας μια απόσταση αποκοπής – cut-off distance), η **μέθοδος υποδιαίρεσης κυττάρων (cell subdivision method)** στην οποία η περιοχή προσομοίωσης διαιρείται σε κύτταρα και εφαρμόζεται μια συνάρτηση αποκοπής για τον περιορισμό του αριθμού των αλληλεπιδράσεων που εξετάζονται και η μέθοδος καταλόγου γειτόνων (neighbor-list method) στην οποία δημιουργείται μια λίστα με γειτονικά άτομα και εξετάζονται οι αλληλεπιδράσεις μόνο μεταξύ αυτών των ατόμων, με αποτέλεσμα τη σημαντική επιτάχυνση της επίλυσης.

Κεφάλαιο 5

Αποτελέσματα - Προσομοιώσεις

5.1 Συνοπτική περιγραφή κώδικα προσομοίωσης

Στη συνέχεια, θα γίνει χρήση υπολογιστικού κώδικα για την προσομοίωση, μέσω της μεθόδου της μοριακής δυναμικής, της φωτοαποδόμησης Ni, Cu, Ag με υπερβραχείς (femtosecond) παλμούς, για διάφορες περιπτώσεις ροής ενέργειας, με στόχο τη διερεύνηση της επίδρασης της διάρκειας του παλμού laser στο αποτέλεσμα της κατεργασίας για διάφορες τιμές ροής ενέργειας και για τα τρία διαφορετικά υλικά. Ο υπολογιστικός κώδικας που θα χρησιμοποιηθεί, αναπτύχθηκε στα πλαίσια προηγούμενης εργασίας [81], για την προσομοίωση της φωτοαποδόμησης από nanosecond παλμούς, και εν συνεχεία, σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα. Στο κεφάλαιο αυτό ακολουθεί συνοπτική περιγραφή του κώδικα και των επιμέρους χαρακτηριστικών του. Εκτενέστερη παρουσίαση του κώδικα, καθώς και επεξήγηση των συναρτήσεων που χρησιμοποιήθηκαν, υπάρχει στην ίδια την εργασία [81].

Η ανάπτυξη του κώδικα έγινε στο περιβάλλον του MATLAB. Ως συνάρτηση δυναμικού χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Morse και μάλιστα για μεγαλύτερη επιτάχυνση των υπολογισμών, χωρίς μείωση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων, χρησιμοποιήθηκε μια συγκεκριμένη μορφή του δυναμικού Morse (Truncated MPF), όπου για απόσταση των ατόμων μεγαλύτερη από μια απόσταση αποκοπής r_c , η δυναμική ενέργεια θεωρείται μηδενική. Για το σύνολο των ατόμων, η συνάρτηση δυναμικού truncated MPF περιγράφεται ως:

$$V(r_{ij}) = \begin{cases} D \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N [\exp[-2a(r_{ij} - r_0)] - 2 \exp[-a(r_{ij} - r_0)]] , & r_{ij} < r_c \\ 0 & , \quad r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (5.1)$$

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:

$$r_{ij} = [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2]^{\frac{1}{2}} \quad (5.2)$$

Λόγω του ότι η φωτοαποδόμηση λαμβάνει χώρα στη νανοκλίμακα και οι μεταβλητές λαμβάνουν εξαιρετικά μικρές τιμές, είναι απαραίτητη η επιλογή εύχρηστων μονάδων μέτρησης των διαφόρων μεγεθών. Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούνται αδιάστατες μονάδες μέτρησης.

Σε γενικές γραμμές, για την ολοκλήρωση της προσομοίωσης, ακολουθούνται τα παρακάτω βήματα:

1. Προετοιμασία συστήματος.
2. Εξισορρόπηση συστήματος.
3. Προσομοίωση φόρτισης και εξαγωγή των αποτελεσμάτων για όσα χρονοβήματα απαιτούνται.

Ακολουθεί συνοπτική περιγραφή του κάθε βήματος στις επόμενες υποενότητες:

Στο πρώτο βήμα γίνεται ο ορισμός των διάφορων παραμέτρων που αφορούν την προσομοίωση. Αρχικά, απαιτείται ορισμός του μεγέθους του δοκιμίου, συναρτήσεως του συνόλου των ατόμων που το απαρτίζουν και της διάταξής τους στο χώρο (ανάλογα με το αν έχουν δομή BCC, FCC κτλ.). Πρέπει να σημειωθεί ότι το μέγεθος του δοκιμίου επηρεάζει το κόστος της προσομοίωσης καθώς όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός των ατόμων, τόσο μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος έχει η προσομοίωση και μάλιστα η αύξηση του υπολογιστικού κόστους δεν είναι γραμμική συνάρτηση του αριθμού των ατόμων. Όσον αφορά τις διάφορες παραμέτρους του υλικού, πρέπει να είναι γνωστή η απόσταση μεταξύ των ατόμων, η πυκνότητα, η αρχική θερμοκρασία, καθώς και οι παράμετροι που απαιτείται να εισαχθούν στο δυναμικό Morse: η ενέργεια διάσπασης D , η απόσταση ισορροπίας μεταξύ των ατόμων r_0 , η σταθερά διάσπασης a και η ακτίνα αποκοπής r_c . Επίσης, πριν την προσομοίωση, πρέπει να γίνει καθορισμός των συνοριακών συνθηκών του προβλήματος. Σε παρόμοια προβλήματα σύμφωνα με τη βιβλιογραφία, οι οριακές συνθήκες ορίζονται ως εξής: στις κατευθύνσεις x και y του υπολογιστικού κελιού εφαρμόζονται περιοδικές συνοριακές συνθήκες ώστε να προσομοιώσουν άπειρο μέσο. Το τεμάχιο απαρτίζεται από δύο είδη ατόμων: τα νευτώνια άτομα, τα οποία έχουν μη μηδενικές ταχύτητες και παίζουν ενεργό ρόλο στην προσομοίωση και τα συνοριακά άτομα, τα οποία βρίσκονται στις περιοχές όπου εφαρμόζονται περιοδικές συνοριακές συνθήκες, στα άκρα του δοκιμίου κατά τους άξονες x και y . Στην κατώτερη επιφάνεια εφαρμόζονται ανακλώμενες συνοριακές συνθήκες ενώ η ανώτερη επιφάνεια είναι ελεύθερη.

Όσον αφορά την αλληλεπίδραση της δέσμης laser με το υλικό, χρειάζεται να επιλεγούν οι βασικές παράμετροι της δέσμης: το μήκος κύματος, η διάρκεια παλμού, η ροή ενέργειας της δέσμης, η ακτίνα της επιφάνειας πρόσπτωσης r_b , ο δείκτης ανακλαστικότητας R , καθώς και ο παράγοντας εξασθένησης Lambert – Beer β . Οι τιμές αυτών των μεγεθών θα παρουσιαστούν αναλυτικά στη συνέχεια στην ενότητα 5.2.

Επίσης, βασικά στοιχεία για την διεξαγωγή της προσομοίωσης, θεωρούνται ο αριθμός των διαστάσεων της προσομοίωσης (2 ή 3), το χρονικό βήμα διότι κατά το οποίο θα υπολογίζονται τα ζητούμενα μεγέθη και ο μέγιστος αριθμός των επαναλήψεων που απαιτούνται. Όσο μικρότερο είναι το χρονικό βήμα που τίθεται, τόσο πιο λεπτομερής είναι η προσομοίωση, αλλά ταυτόχρονα αυξάνεται ο υπολογιστικός χρόνος. Η επιλογή του χρονικού βήματος θα συζητηθεί στην ενότητα 5.2.

Στο δεύτερο βήμα, ορίζονται οι αρχικές ταχύτητες των ατόμων, με σκοπό την επίτευξη της απαιτούμενης θερμοδυναμικής ισορροπίας. Οι εξισώσεις κίνησης ολοκληρώνονται μέσω της μεθόδου Leapfrog, απ' όπου γίνεται υπολογισμός των ταχυτήτων των ατόμων για όσα χρονοβήματα απαιτούνται. Οι ταχύτητες, οι οποίες εξαρτώνται από τη θερμοκρασία, θα πρέπει να έχουν τέτοια τιμή, ώστε η συνολική ορμή του συστήματος να είναι μηδενική, ενώ ταυτόχρονα στο σύνολό τους, να ακολουθούν κατανομή Maxwell-Boltzmann. Όσον αφορά τις επιταχύνσεις, σε αυτό το στάδιο θεωρούνται μηδενικές.

Για να γίνει γνωστό αν έχει επιτευχθεί ισορροπία χρησιμοποιείται η συνάρτηση σύγκλισης ταχύτητας (5.3). Εάν ικανοποιείται η συνθήκη ισορροπίας (5.4) που δίνεται από τη συνάρτηση, τότε θεωρείται ότι το σύστημα βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία. Αν η απαιτούμενη συνθήκη δεν ικανοποιείται, η διαδικασία επίλυσης μέσω της μεθόδου Leapfrog συνεχίζεται, έως ότου τελικώς αποκατασταθεί η θερμοδυναμική ισορροπία. Η συνάρτηση σύγκλισης ταχυτήτων δίνεται ως [82]:

$$C(t) = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_{ix}^2 + u_{iy}^2 + u_{iz}^2)^2}{\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_{ix}^2 + u_{iy}^2 + u_{iz}^2) \right]^2} \quad (5.3)$$

Η συνθήκη θερμοδυναμικής ισορροπίας ικανοποιείται αν:

$$\left| C(t) - \frac{5}{3} \right| \leq 0.2 \quad (5.4)$$

Επίσης η θερμοκρασία του δοκιμίου T μπορεί να υπολογιστεί μέσω της σχέσης:

$$K_i = \frac{3}{2} k_B T_i = \frac{1}{2} m_i u_i^2 \Rightarrow$$

$$T = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{i=1}^N u_i^2 = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{i=1}^N (u_{ix}^2 + u_{iy}^2 + u_{iz}^2) \quad (5.5)$$

Όπου K_i η κινητική ενέργεια του κάθε ατόμου, T_i η θερμοκρασία του και m_i η μάζα του. Πριν την έναρξη της προσομοίωσης η θερμοκρασία πρέπει να έχει μια τιμή που ορίζεται από εμάς πχ $T_d=300K$. Η συνθήκη επιθυμητής θερμοκρασίας ικανοποιείται στην περίπτωση που ισχύει:

$$|T - T_d| \leq 3K \quad (5.6)$$

Αν η παραπάνω προϋπόθεση δεν ικανοποιείται, τότε γίνεται ανάθεση νέων ταχυτήτων. Οι νέες ταχύτητες που λαμβάνουν τα άτομα διατυπώνονται ως:

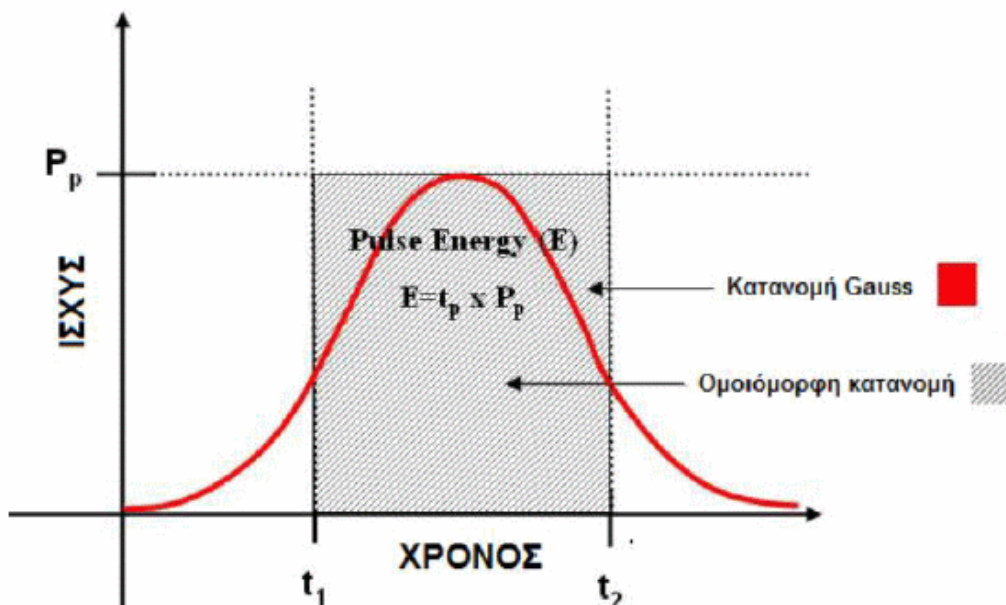
$$(u_i)^{new} = (u_i)^{old} \left[\frac{T_d}{T} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5.7)$$

Η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι να ικανοποιηθούν οι παραπάνω συνθήκες.

Η μοντελοποίηση της δέσμης laser γίνεται ως εξής:

Σε χρονικό επίπεδο, για λόγους μείωσης του υπολογιστικού φόρτου, η δέσμη laser ακολουθεί ομοιόμορφη κατανομή. Το μήκος του παλμού λαμβάνεται ως «μέγιστο πλάτος στο ήμισυ του μεγίστου» (Full Width at Half Maximum) ενός τυπικού παλμού κατανομής Gauss (Σχήμα 5.1). Η ενέργεια του παλμού υπολογίζεται ως το γινόμενο της ισχύος επί τη διάρκεια παλμού:

$$E = \tau_p P_p = (t_2 - t_1) P_p \quad (5.8)$$



Σχήμα 5.1 Κατανομή Gauss και ομοιόμορφη κατανομή για την ενέργεια της δέσμης laser [1].

Χωρικά, λαμβάνεται υπόψη ο νόμος των Lambert – Beer, καθώς και η κατανομή Gauss στο επίπεδο x-y. Η δέσμη θεωρείται ότι προσπίπτει κάθετα στο δοκίμιο, ξεκινώντας από χρόνο t=0, και έχει διάμετρο 2r_b.

Κατά την ακτινοβολήση των σωματιδίων από τη δέσμη Laser, η απορροφούμενη ενέργεια φωτονίων από τα άτομα μετατρέπεται σε θερμότητα, η οποία αυξάνει τη θερμοκρασία του συστήματος.

Οι τιμές που υπολογίζονται είναι:

- Ενέργεια που απορροφήθηκε από τα φωτόνια
- Κινητική ενέργεια
- Δυναμική ενέργεια
- Ολική ενέργεια
- Θερμοκρασία του δοκιμίου
- Αριθμός αποδομούμενων ατόμων

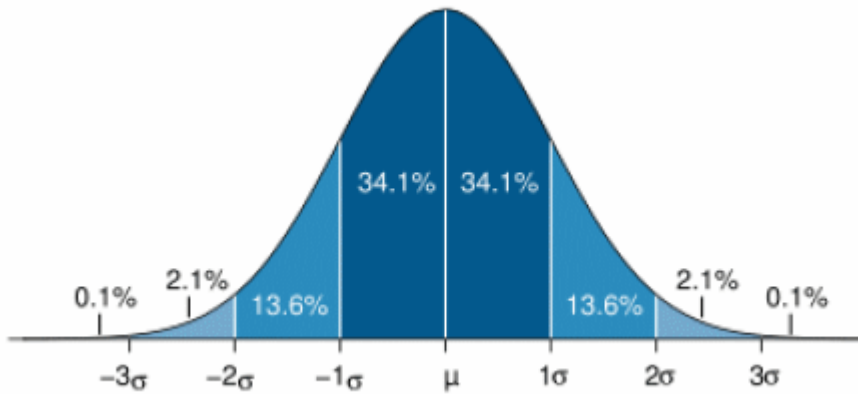
Ο αριθμός των απορροφούμενων φωτονίων δίνεται από τη σχέση:

$$N_{AP} = (1 - R)[P_L \delta t \exp(-\beta z)] \left[\left(\Phi \left(a_c \frac{x + r_a}{2r_b} \right) - \Phi \left(a_c \frac{x - r_a}{2r_b} \right) \right) \left(\Phi \left(a_c \frac{y + r_a}{2r_b} \right) - \Phi \left(a_c \frac{y - r_a}{2r_b} \right) \right) \right] \quad (4.9)$$

Όπου PL η ισχύς της δέσμης, δt το χρονικό βήμα, β ο παράγοντας εξασθένησης Lambert – Beer, r_a η ακτίνα του ατόμου, r_b η ακτίνα της δέσμης, Φ η κανονικοποιημένη συνάρτηση αθροιστικής πυκνότητας (cumulative probability function) και a_c παράμετρος ακριβείας για την οποία ισχύει:

$$a_c \sigma = 2r_b$$

Όπου σ η τυπική απόκλιση της κατανομής Gauss της δέσμης στο επίπεδο x-y (Σχήμα 5.2)



Σχήμα 5.2 Ποσοστιαία κατανομή του πλήθους τιμών που βρίσκονται γύρω από τη μέση τιμή μιας κατανομής Gauss [1].

Η ενέργεια ενός φωτονίου υπολογίζεται από τη γνωστή σχέση:

$$E_{\text{photon}} = \frac{hc}{\lambda} \quad (5.10)$$

Όπου $h=4.135667 \cdot 10^{-15}$ η σταθερά Planck και c η ταχύτητα του φωτός.

Σε αυτή τη φάση, θεωρείται ότι η ενέργεια της δέσμης, αυξάνει μόνο την κινητική ενέργεια των ατόμων. Συμβολίζοντας με ΔE_k την ενέργεια που απορροφάται από τα σωματίδια του υλικού, αυτή προκύπτει από το γινόμενο:

$$\Delta E_k = N_{AP} E_{\text{photon}} \quad (5.11)$$

Ο υπολογισμός της νέας κινητικής ενέργειας γίνεται μέσω της σχέσης:

$$(K_i)^{\text{new}} = (K_i)^{\text{old}} + \Delta E_{k,i} \quad (5.12)$$

Τα άτομα που έχουν αρκετά υψηλές ενέργειες, αρχίζουν και τήκονται, μεταπίπτοντας στην υγρή φάση. Για ακόμα υψηλότερες ενέργειες τα άτομα μεταβαίνουν στην αέρια φάση. 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 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 να αποφασιστεί αν ένα άτομο αποκτά τέτοια ενέργεια ώστε να απομακρυνθεί από το στόχο, χρησιμοποιείται το κριτήριο ενέργειας συνοχής. Στα πλαίσια του κριτηρίου, θεωρώντας C την τιμή της ενέργειας συνοχής κάθε υλικού, ισχύουν οι δύο παρακάτω συνθήκες:

- Αν $|C| \leq \Delta E_{K,i} + K_i$ τότε το άτομο αφαιρείται.
- Αν $|C| > \Delta E_{K,i} + K_i$ τότε υπολογίζονται νέες ταχύτητες.

Για τα άτομα που παραμένουν, γίνεται εν συνεχεία υπολογισμός των νέων τους ταχυτήτων με τη σχέση:

$$\frac{1}{2} m_i ((u_i)^{new})^2 = \frac{1}{2} m_i ((u_i)^{old})^2 + \Delta E_{K,i} \Rightarrow$$

$$(u_i)^{new} = \left[\frac{2 (\Delta E_{K,i} + K_i)}{m_i D} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5.13)$$

όπου m_i η ατομική μάζα. Ο υπολογισμός της νέας θερμοκρασίας γίνεται μέσω της σχέσης (5.5).

Για τον υπολογισμό της δυναμικής ενέργειας, χρησιμοποιείται η μέθοδος truncated MPF μεταξύ όλων των ζευγών, στην οποία λαμβάνεται υπόψη η απόσταση αποκοπής r_c . Το άθροισμα της δυναμικής και κινητικής ενέργειας δίνει την ολική ενέργεια.

Για τον υπολογισμό της δύναμης που ασκείται σε κάθε άτομο που παραμένει στο σύστημα, αθροίζονται τα διανύσματα των δυνάμεων από όλα τα γειτονικά άτομα που απέχουν απόσταση μικρότερη από r_c . Εάν το σύστημα περιλαμβάνει N άτομα, τότε συνολικά ασκούνται $N(N-1)$ δυνάμεις, από τις οποίες υπολογίζονται οι μισές, αφού όπως ορίζεται από τον τρίτο νόμο του Newton $F_{ij} = -F_{ji}$. Η δύναμη δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\mathbf{F}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}} \frac{\partial}{\partial r} V_i(r) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}} f_{ij} \quad (5.14)$$

Όπου το μέτρο της δύναμης είναι η μερική παράγωγος της δυναμικής ενέργειας ως προς την απόσταση:

$$f_{ij} = -\frac{\partial}{\partial r_{ij}} V_i(r_{ij}) \quad (5.15)$$

Με γνωστή τη δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο, μπορούν πλέον να υπολογιστούν οι αντίστοιχες επιταχύνσεις:

$$a_i = F_i / m_i \quad (5.16)$$

Ο αλγόριθμος βατραχοδρασκελισμών Verlet (Leapfrog Verlet) χρησιμοποιείται για την επίλυση των εξισώσεων κίνησης των σωματιδίων και χαρακτηρίζεται από τις εξής δύο εξισώσεις:

$$u_{n+1/2} = u_{n-1/2} + a_n \delta t \quad (5.17)$$

$$x_{n+1/2} = x_n + u_{n+1/2} \delta t \quad (5.18)$$

Όπου x_n , u_n είναι οι τρισδιάστατοι ταχυστές που περιγράφουν τη θέση και την επιτάχυνση, αντίστοιχα, ενός σωματιδίου τη στιγμή n . $u_{n\pm 1/2}$ είναι ο τρισδιάστατος ταχυστής που περιγράφει την ταχύτητα στις χρονικές στιγμές $n\pm 1/2$ και δt το χρονοβήμα. Στον αλγόριθμο Leapfrog Verlet, όπως αναφέρθηκε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, οι θέσεις και οι ταχύτητες δεν είναι γνωστές ταυτόχρονα, αλλά με χρονική διαφορά $n/2$, με αποτέλεσμα να μην είναι εφικτός ο ταυτόχρονος υπολογισμός της κινητικής και της δυναμικής ενέργειας. Ένας τρόπος να αντιμετωπιστεί αυτό, είναι η χρήση μιας παραπάνω εξίσωσης για τον υπολογισμό των ταχυτήτων σε ακέραιο πλήθος χρονοβημάτων. Η επιπρόσθετη εξίσωση είναι η:

$$u_n = (u_{n+1/2} + u_{n-1/2}) / 2 \quad (5.19)$$

5.2 Χαρακτηριστικά προσομοιώσεων

Στο παρόν κεφάλαιο περιγράφονται τα στοιχεία των προσομοιώσεων σε H/Y που έγιναν ώστε να διερευνηθούν τα διάφορα χαρακτηριστικά της φωτοαποδόμησης στόχου με υπερβραχείς παλμούς laser, όπως οι ιδιότητες των υλικών, τα χαρακτηριστικά της δέσμης laser και οι παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν στον κώδικα.

Τα υλικά – στόχοι που χρησιμοποιήθηκαν είναι κρυσταλλικά Ni, Cu και Ag δομής FCC (Face-Centered Cubic). Σε πρώτο στάδιο, έγινε εισαγωγή των διάφορων σταθερών παραμέτρων:

- Η απόσταση a μεταξύ των ατόμων λήφθηκε ως 2.492 Å, 2.556 Å και 2.89 Å για το νικέλιο, το χαλκό και τον άργυρο, αντίστοιχα.
- Η πυκνότητα του Ni λήφθηκε ως 7.81 g/cm³, του Cu λήφθηκε ως 8.96 g/cm³, του Ag λήφθηκε ως 10.49 g/cm³.
- Η αρχική θερμοκρασία του δοκιμίου λήφθηκε ως $T_d=300\text{K}$.
- Οι παράμετροι του δυναμικού Morse καθορίστηκαν ως: α) για το νικέλιο $D=0.4205\text{ eV}$, $r_0=2.78\text{ Å}$ και $\alpha=1.4199\text{ Å}^{-1}$, β) για το χαλκό $D=0.3429\text{ eV}$, $r_0=2.866\text{ Å}$ και $\alpha=1.3588\text{ Å}^{-1}$, γ) για τον άργυρο $D=0.3321$, $r_0=3.115\text{ Å}$ και $\alpha=1.3696\text{ Å}^{-1}$.

Στα άκρα του κελιού στις κατευθύνσεις x , y εφαρμόστηκαν περιοδικές συνοριακές συνθήκες (PBC), ώστε να προσομοιωθεί άπειρο (συνεχές) υλικό. Για την εισαγωγή στον κώδικα των βασικών παραμέτρων της δέσμης, θεωρήθηκαν τα εξής:

- Το μήκος κύματος θεωρήθηκε ως $\lambda = 355 \text{ nm}$.
- Η ακτίνα της επιφάνειας πρόσπτωσης της δέσμης λήφθηκε $r_b = 10 \text{ \AA}$.
- Ο δείκτης ανακλαστικότητας λήφθηκε ως $R = 0.4802$ (για Ni) , $R = 0.494$ (για Cu) και $R = 0.7678$ (για Ag).
- Ο παράγοντας εξασθένησης Lambert – Beer λήφθηκε ως $\beta = 0.01 \text{ \AA}^{-1}$.

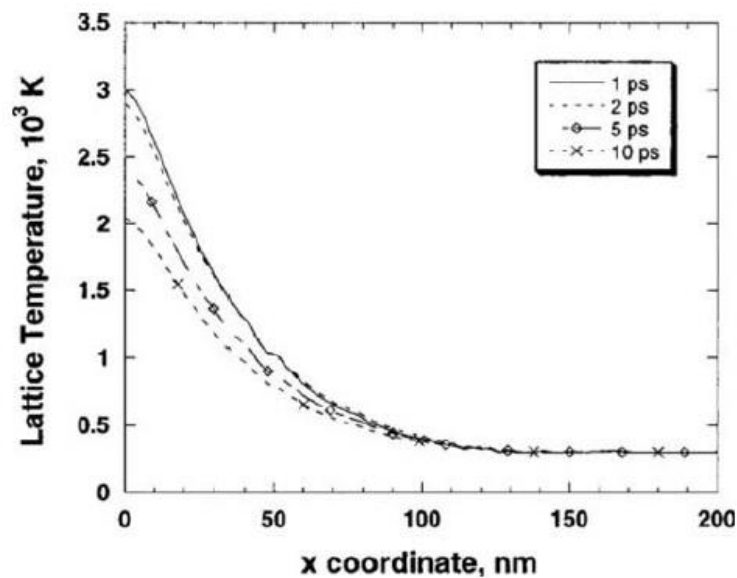
Σε όλες τις περιπτώσεις χρησιμοποιήθηκε μόνο ένας παλμός laser.

Για τη μελέτη των femtosecond παλμών laser, απαιτείται η επιλογή εξαιρετικά μικρού χρονικού βήματος δt κατά την προσομοίωση, καθώς είναι αναγκαίο να γίνει λεπτομερής μελέτη της διαδικασίας αύξησης της ενέργειας κατά τη διάρκεια του παλμού, και γι' αυτό η διάρκειά του πρέπει να είναι αρκετά μικρότερη από τη διάρκεια του παλμού ώστε να παρατηρηθούν με ακρίβεια οι μεταβολές που γίνονται στον όγκο του δοκιμίου τόσο κατά τη διάρκεια επενέργειας του παλμού όσο και μέχρι το τέλος της κατεργασίας. Ταυτόχρονα, όμως, πρέπει να ληφθεί υπόψη ότι ένα ιδιαίτερα μικρό χρονικό βήμα, μικρότερο του 1 fs , αυξάνει ιδιαίτερα το κόστος της μελέτης της διαδικασίας φωτοαποδόμησης σε μεγάλο χρόνο μετά την επενέργεια του παλμού. Όπως έχει ήδη αναφερθεί σε προηγούμενο κεφάλαιο, στην περίπτωση των υπερβραχέων παλμών, ένα μεγάλο μέρος της αποδόμησης των σωματιδίων, λαμβάνει χώρα μετά την επενέργεια του παλμού, σε χρόνους μέχρι και κάποιων δεκάδων ή και άνω των εκατό picosecond, ανάλογα με τα χαρακτηριστικά του παλμού (ροή ενέργειας, διάρκεια) και το μέγεθος του δοκιμίου που εξετάζεται.

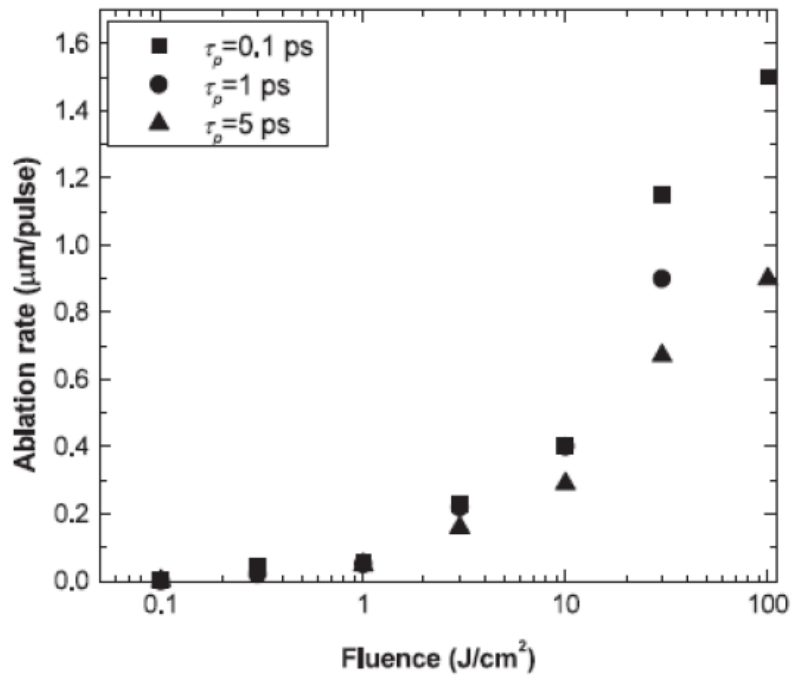
Οι ιδιαίτερα μεγάλοι χρόνοι που απαιτούνται στις προσομοιώσεις είναι ένας βασικός λόγος για τον οποίο συνήθως δεν μελετώνται μεγάλοι παλμοί, της τάξης των nanosecond. Για προσομοίωση, με επαρκές χρονικό βήμα (συνήθως $1-10 \text{ femtosecond}$) για τη μελέτη του φαινομένου της φωτοαποδόμησης με χρήση ενός nanosecond παλμού, θα απαιτούνταν πολλές μέρες ή ακόμη και μήνες προσομοιώσεων. Γι' αυτό το λόγο, στις προσομοιώσεις θα πρέπει να γίνεται πάντα ένας συμβιβασμός μεταξύ μιας αποδεκτής διάρκειας χρονικού βήματος δt και συνολικού χρόνου προσομοίωσης, ο οποίος να είναι ικανός να μας δώσει μια ρεαλιστική εικόνα του φαινομένου. Έτσι, για τις προσομοιώσεις στην παρούσα εργασία λάβαμε χρονικό βήμα διάρκειας $\delta t = 10 \text{ fs}$ και συνολική διάρκεια προσομοίωσης 2 ps (2000 fs) ώστε να υπάρχει αρκετός χρόνος για να γίνει αποδόμηση στις περισσότερες περιπτώσεις. Ο τελικός χρόνος είναι τουλάχιστον δέκα φορές μεγαλύτερος από τη διάρκεια του μεγαλύτερου παλμού (200 fs) και μέσα σε αυτό το χρόνο για τη δεδομένη γεωμετρία δοκιμίου που εξετάζεται, μπορεί να παρατηρηθούν αναλυτικά τα στάδια της διαδικασίας της φωτοαποδόμησης.

Στην παρούσα εργασία, όπως έχει ήδη αναφερθεί, επιθυμείται η διερεύνηση της εξέλιξης της διεργασίας της φωτοαποδόμησης σε σχέση με τη διάρκεια του παλμού laser και ο υπολογισμός της επίδρασης της διάρκειας παλμού στη μέση θερμοκρασία του δοκιμίου, στον αριθμό αποδομημένων ατόμων και το ρυθμό φωτοαποδόμησης στην περίπτωση 3 υπερβραχέων παλμών laser. Η ταχύτητα της εξέλιξης του φαινομένου της φωτοαποδόμησης σε σχέση με τη διάρκεια του παλμού και τα αποτελέσματα που έχει στην κατεργασία των δοκιμίων μελετώνται από διάφορους ερευνητές καθώς είναι σημαντικό να επιτυγχάνεται υψηλή αποδοτικότητα της κατεργασίας και όσο το δυνατόν μεγαλύτερη ακρίβεια της κατεργασίας και μικρότερη επίδραση της ενέργειας της δέσμης σε άλλα σημεία του δοκιμίου [82, 83]. Παρ' όλο που είναι γενικά αποδεκτό ότι η κατεργασία με υπερβραχείς παλμούς αποδίδει καλύτερο αποτέλεσμα, μεγαλύτερης διάρκειας παλμοί, όπως οι nanosecond παλμοί έχει αποδειχθεί ότι έχουν καλύτερη

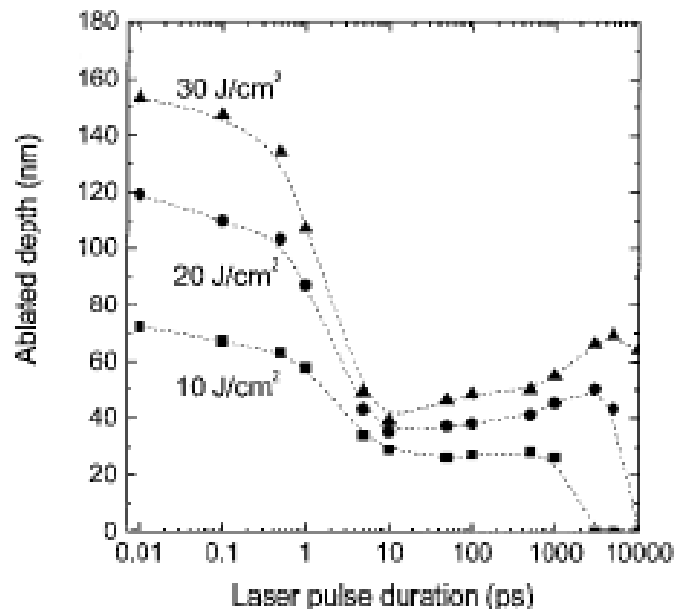
αποδοτικότητα σε σχέση με την παρεχόμενη ενέργεια [84]. Σε προηγούμενες εργασίες [85] έχει υπολογιστεί ότι η μείωση της διάρκειας παλμού προκαλεί αύξηση του αριθμού των αποδομούμενων ατόμων, ιδιαίτερα σε μεγαλύτερες ροές ενέργειας. Οι Yao et al. [86] υπολόγισαν ότι αύξηση της χρονικής διάρκειας παλμού οδηγεί σε μείωση της θερμοκρασίας του κρυσταλλικού πλέγματος, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.3. Επίσης, οι ερευνητές Atanasov και Nedialkov [87] κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι με αύξηση της ροής ενέργειας και βραχύτερους παλμούς είναι δυνατό να γίνει αύξηση του ρυθμού αποδόμησης, όπως φαίνεται και στο σχήμα 5.4. Στους παλμούς μεγαλύτερης διάρκειας υπάρχει μεγαλύτερος χρόνος για να γίνει μεταφορά ενέργειας από τα ηλεκτρόνια στο κρυσταλλικό πλέγμα ενώ στους fs παλμούς αυτό δεν μπορεί να γίνει. Τέλος, οι Le Drogoff et al. [88] μελετώντας το βάθος αποδόμησης του αλουμινίου συναρτήσει της διάρκειας παλμού και της ροής ενέργειας, κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι μείωση της διάρκειας παλμού, για παλμούς της τάξης των femtosecond οδηγεί σε αύξηση του βάθους αποδόμησης, κάτι που δεν ισχύει σε παλμούς πάνω από 10 ps, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.5.



Σχήμα 5.3: Επίδραση της διάρκειας του παλμού στη θερμοκρασία του κρυσταλλικού πλέγματος [86]



Σχήμα 5.4 : Επίδραση της ροής ενέργειας και της διάρκειας του παλμού στο ρυθμό αποδόμησης [87]



Σχήμα 5.5 : Επίδραση της ροής ενέργειας και της διάρκειας του παλμού στο βάθος αποδόμησης [88]

Επομένως, προκειμένου να γίνει η μελέτη της κατεργασίας και διερεύνηση της επίδρασης της διάρκειας του παλμού επιλέχθηκαν 3 υλικά (Ni,Cu, Ag) και 5 ροές ενέργειας (0.5, 0.7, 1, 2, 3 J/cm²) και 3 τιμές διάρκειας παλμού (50,100,200) fs. Το μέγεθος του τρισδιάστατου δοκιμίου, ήταν κατά τους τρεις άξονες 20 άτομα x 20 άτομα x 20 άτομα, σύνολο 8000 άτομα σε όλες τις περιπτώσεις. Τα χαρακτηριστικά των περιπτώσεων που μελετήθηκαν συνοψίζονται στον πίνακα 5.1.

Υλικό	Ni, Cu, Ag
Διάρκεια παλμού (fs)	50, 100, 200
Μέγεθος δοκιμίου	8000 άτομα
Ροή ενέργειας laser (J/ cm ²)	0.5, 0.7, 1, 2, 3
Χρονικό βήμα προσομοίωσης	10 fs
Συνολικός χρόνος προσομοίωσης	2 ps

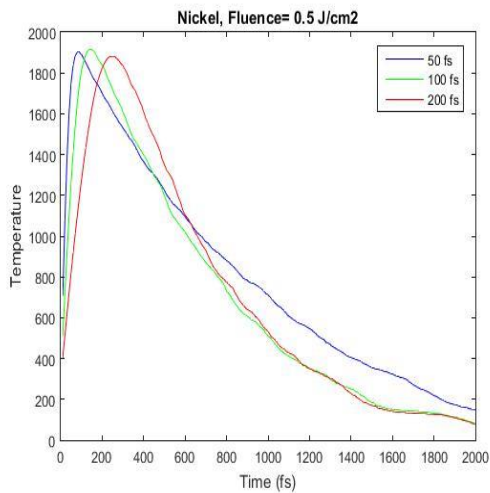
Πίνακας 5.1: Χαρακτηριστικά προσομοιώσεων

5.3 Αποτελέσματα προσομοιώσεων

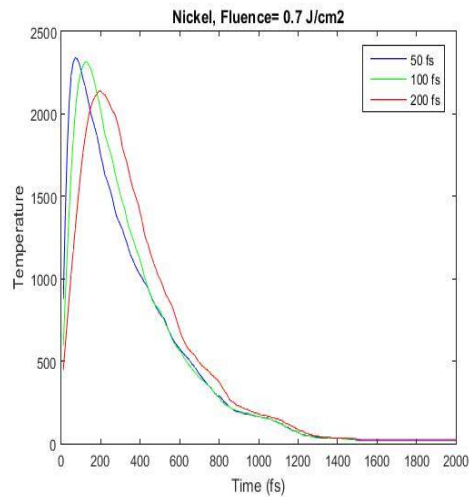
Στην παρούσα ενότητα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για όλες τις περιπτώσεις που μελετήθηκαν. Στις υποενότητες 5.3.1-5.3.3 παρουσιάζονται ξεχωριστά για κάθε υλικό οι καμπύλες μέσης θερμοκρασίας του δοκιμίου, οι καμπύλες της εξέλιξης του αριθμού αποδομημένων σωματιδίων, οι καμπύλες του χρονικού ρυθμού αποδόμησης καθώς και διαγράμματα για τη μέγιστη θερμοκρασία και το μέγιστο ρυθμό αποδόμησης σε σχέση με τη χρονική διάρκεια του παλμού και τη ροή ενέργειας (laser fluence).

5.3.1 Αποτελέσματα προσομοιώσεων για Ni

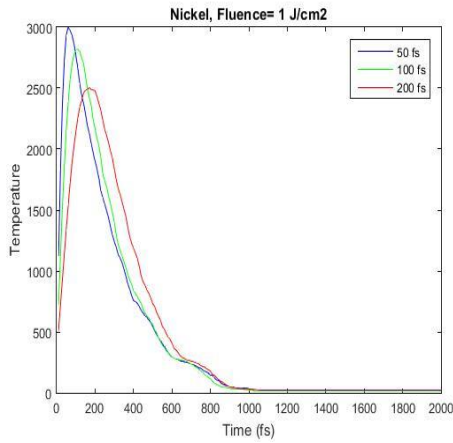
5.3.1.1 Διαγράμματα μέσης θερμοκρασίας και σχολιασμός



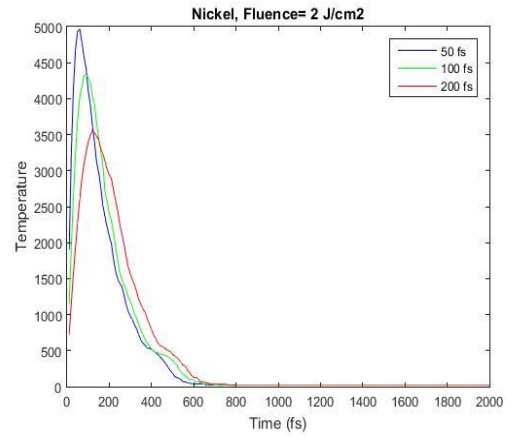
(α)



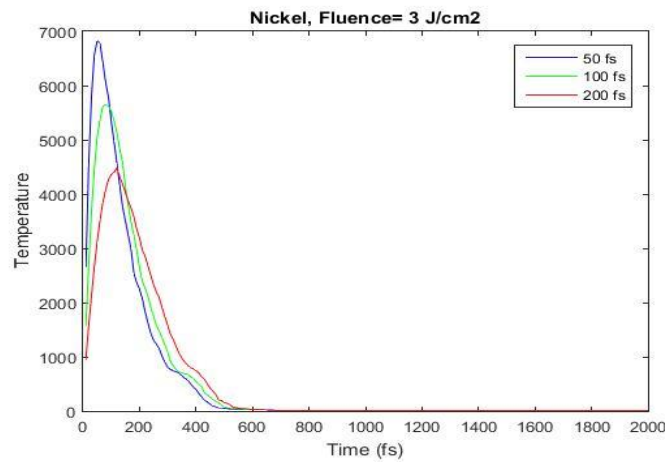
(β)



(γ)



(δ)

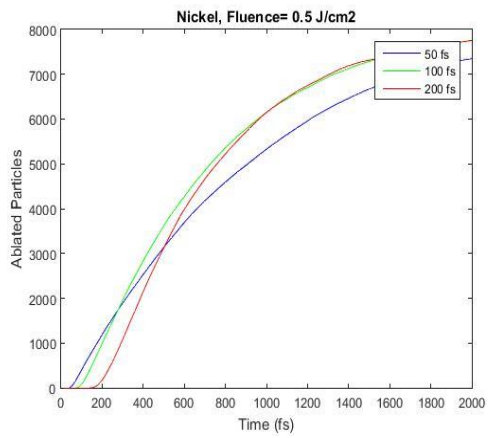


(ε)

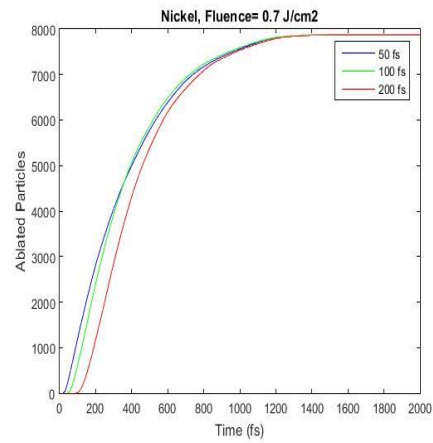
Σχήμα 5.6: Μέση θερμοκρασία δοκιμίου στις περιπτώσεις με ροή ενέργειας: (α) 0.5 J/cm², (β) 0.7 J/cm², (γ) 1 J/cm², (δ) 2 J/cm², (ε) 3 J/cm²

Παρατηρείται ότι στα διάγραμματα των θερμοκρασιών του Νικελίου για τα διάφορα fluences υπάρχει μία συσχέτιση των μέγιστων θερμοκρασιών ανάλογα με τη διάρκεια του παλμού laser. Πιο συγκεκριμένα, μεταξύ των μέγιστων θερμοκρασιών, η μεγαλύτερη είναι για 50 fs η μεσαία στα 100 fs και η μικρότερη για 200 fs για κάθε τιμή ροής ενέργειας (fluence), εκτός από τη μικρότερη τιμή (0.5 J/cm²). Το συμπέρασμα αυτό επιβεβαιώνεται και από αποτελέσματα της βιβλιογραφίας, όπως στην εργασία των Yao et al. [86] στην οποία μελετήθηκαν παλμοί διάρκειας 1-10 ps και στην εργασία του Nedialkov [89] στην οποία παρατηρήθηκε μείωση στη μέγιστη θερμοκρασία και στο ρυθμό αύξησης της θερμοκρασίας, κάτι το οποίο τελικά συμβάλλει στη μείωση του ρυθμού αποδόμησης. Στην περίπτωση της μικρότερης τιμής ροής ενέργειας στην εργασία μας φαίνεται ότι δεν υπάρχει σημαντική διαφορά στις μέγιστες θερμοκρασίες μεταξύ των περιπτώσεων με τις τρεις διαφορετικές χρονικές διάρκειες παλμού. Τέλος παρατηρείται ότι για αυξανόμενη τιμή ροής ενέργειας αυξάνονται οι θερμοκρασίες σε όλες τις περιπτώσεις παλμών.

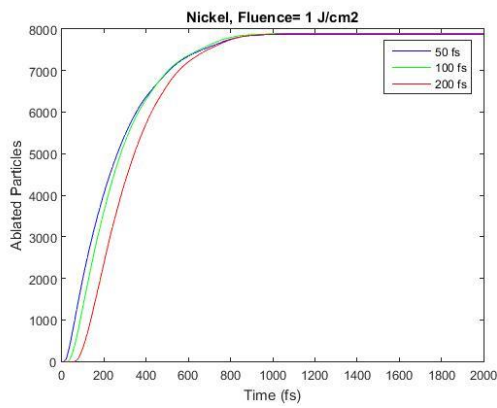
5.3.1.2 Διαγράμματα φωτοαποδομημένων ατόμων και σχολιασμός



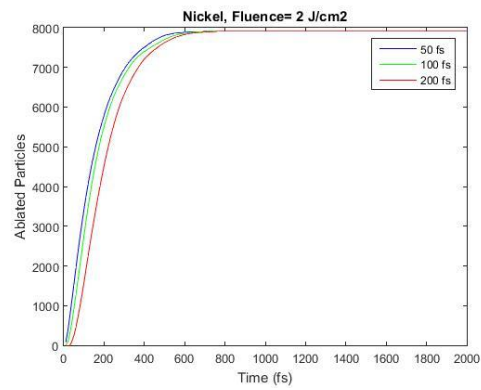
(α)



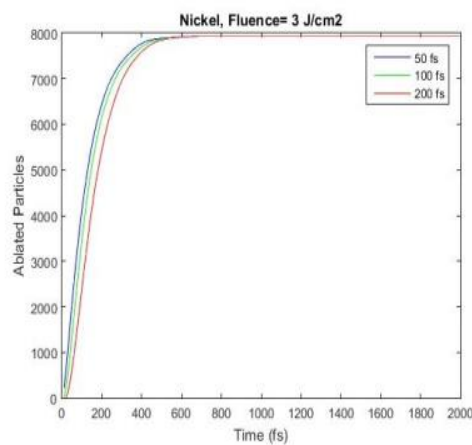
(β)



(γ)



(δ)

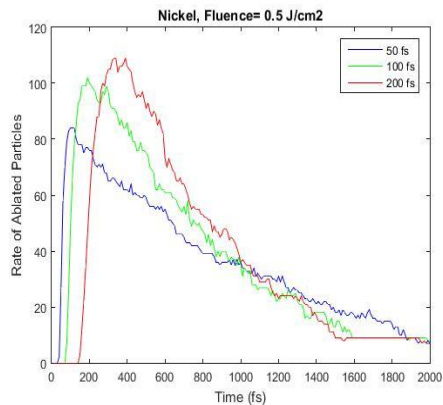


(ε)

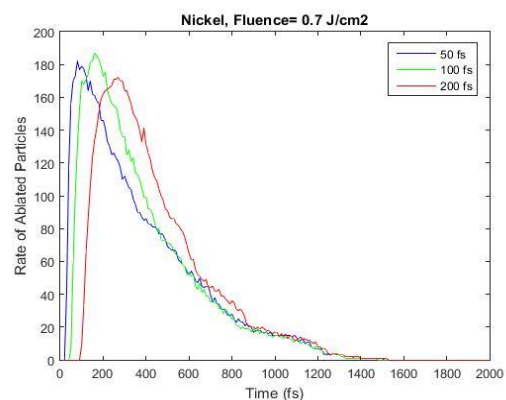
Σχήμα 5.7: Συνολικός αριθμός αποδομημένων ατόμων σε σχέση με το χρόνο στις περιπτώσεις με ροή ενέργειας: (α) 0.5 J/cm^2 , (β) 0.7 J/cm^2 , (γ) 1 J/cm^2 , (δ) 2 J/cm^2 , (ε) 3 J/cm^2

Παρατηρείται ότι σε όλα τα διαγράμματα των φωτοαποδομημένων σωματιδίων του Νικελίου η φωτοαποδόμηση ξεκινάει πριν την ολοκλήρωση της χρονικής διάρκειας του κάθε παλμού. Σε όλα τα διάγραμμα η φωτοαποδόμηση ξεκινάει πιο γρήγορα στα 50 fs έπειτα στα 100 fs και τελικά στα 200 fs. Επίσης, για αυξανόμενες τιμές ροής ενέργειας, παρατηρείται μείωση του χρονικού διαστήματος που απαιτείται για την αποδόμηση όλων των ατόμων, όπως αναμενόταν. Τέλος, φαίνεται ότι όλα τα άτομα έχουν φωτοαποδομηθεί στη διάρκεια των 2 ps, ενώ όπως αναμενόταν με βάση τη βιβλιογραφία για την περίπτωση των femtosecond παλμών, σε αντίθεση με παλμούς μεγαλύτερης διάρκειας, σε αρκετές περιπτώσεις το μεγαλύτερο κομμάτι του δοκιμίου αποδομήθηκε μετά το χρονικό διάστημα της επενέργειας του παλμού. Εξάιρεση αποτελεί, όπως και στην περίπτωση των διαγραμμάτων της θερμοκρασίας, η περίπτωση ροής ενέργειας 0.5 J/cm^2 . Σε αυτή την περίπτωση, η αποδόμηση και για τις τρεις διάρκειες παλμού εξελίσσεται με πιο αργό ρυθμό και παρατηρείται ότι στην περίπτωση του παλμού διάρκειας 50fs η αποδόμηση γίνεται πιο αργά σε σχέση με τις άλλες περιπτώσεις.

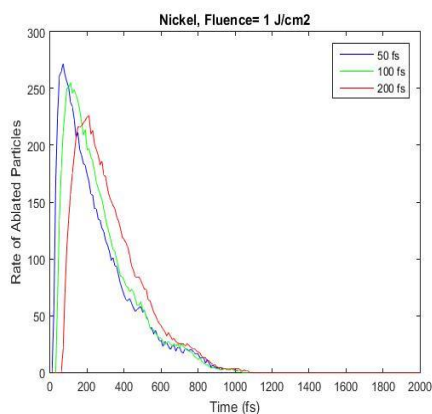
5.3.1.3 Διαγράμματα ρυθμού φωτοαποδόμησης και σχολιασμός



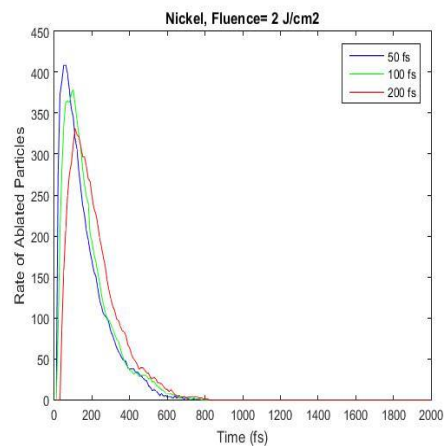
(α)



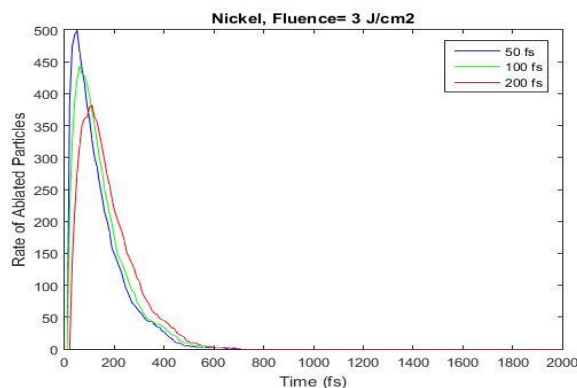
(β)



(γ)



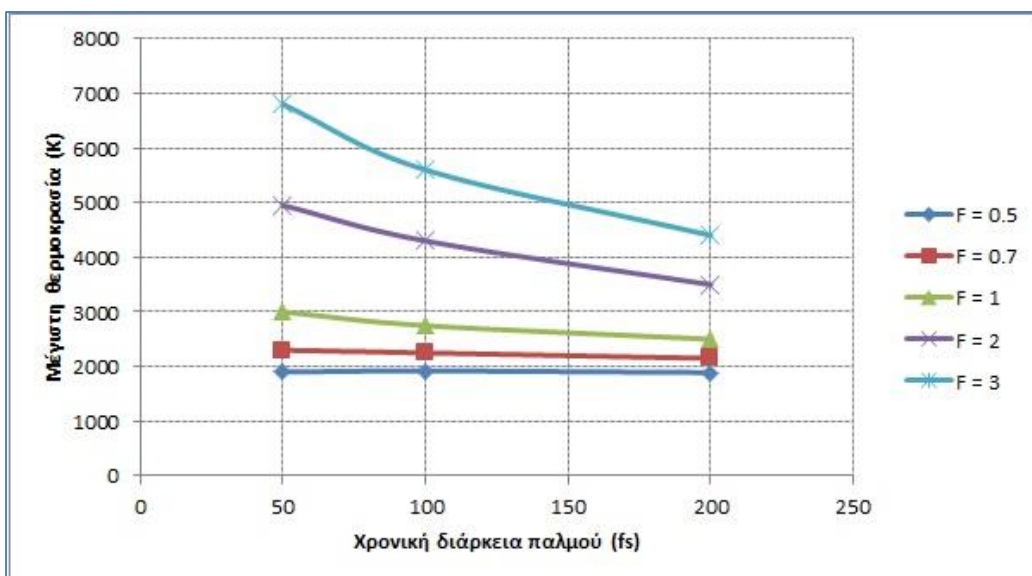
(δ)



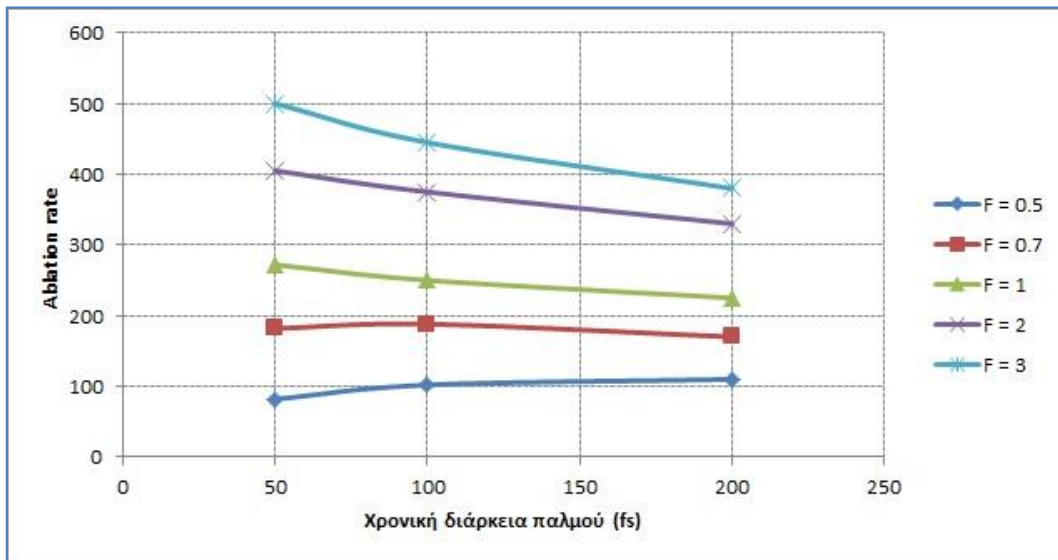
(ε)

Σχήμα 5.8: Χρονικός ρυθμός φωτοαποδόμησης στις περιπτώσεις με ροή ενέργειας: (α) 0.5 J/cm^2 , (β) 0.7 J/cm^2 , (γ) 1 J/cm^2 , (δ) 2 J/cm^2 , (ε) 3 J/cm^2

Οι τιμές του χρονικού ρυθμού φωτοαποδόμησης σχετίζονται άμεσα με τις τιμές των αποδομημένων σωματιδίων σε σχέση με το χρόνο καθώς και με τις τιμές της μέσης θερμοκρασίας. Το γεγονός ότι στη περίπτωση ροής ενέργειας 0.5 J/cm^2 παρατηρήθηκε για το παλμό διάρκειας 50fs πιο αργή εξέλιξη της φωτοαποδόμησης και όχι μεγαλύτερες θερμοκρασίες επιβεβαιώνεται ξεκάθαρα και από το αντίστοιχο διάγραμμα ρυθμού φωτοαποδόμησης (5.8α) στο οποίο φαίνεται ότι ο ρυθμός είναι μεγαλύτερος στην περίπτωση παλμού 200fs, μικρότερος στην περίπτωση παλμού 100fs και ακόμη μικρότερος στην περίπτωση παλμού 50fs. Παρόμοια συμπεριφορά σε μικρότερη κλίμακα παρατηρείται και στο διάγραμμα για ροή ενέργειας 0.7 J/cm^2 , όπου φαίνεται ότι ο ρυθμός αποδόμησης στις περιπτώσεις παλμού 50 και 100fs είναι περίπου ίδιος. Τέλος, το χρονικό σημείο επίτευξης της μέγιστης θερμοκρασίας φαίνεται να συνδέεται άμεσα με το σημείο εμφάνισης του μέγιστου ρυθμού φωτοαποδόμησης.



Σχήμα 5.9: Μεταβολή της μέγιστης μέσης θερμοκρασίας του δοκιμίου σε σχέση με τις συνθήκες της κατεργασίας

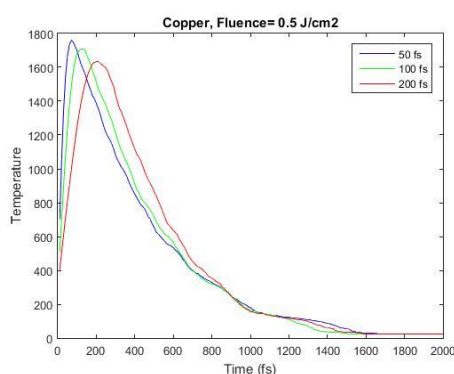


Σχήμα 5.10: Μεταβολή του μέγιστου χρονικού ρυθμού φωτοαποδόμησης των ατόμων του δοκιμίου σε σχέση με τις συνθήκες της κατεργασίας

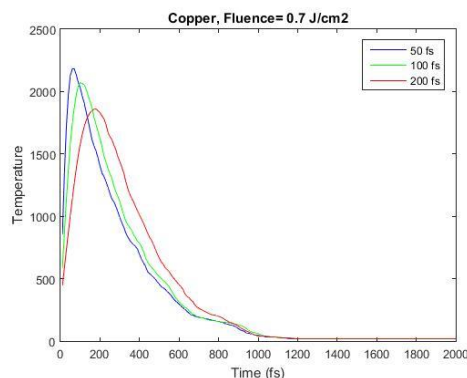
Στα σχήματα 5.9 και 5.10 παρουσιάζεται η μεταβολή της μέγιστης θερμοκρασίας του δοκιμίου και του μέγιστου ρυθμού φωτοαποδόμησης, αντίστοιχα, σε σχέση με τις συνθήκες κατεργασίας (διάρκεια παλμού, ροή ενέργειας). Από το διάγραμμα 5.9 φαίνεται ότι για ροές ενέργειας μέχρι περίπου 0.7 J/cm^2 η μέγιστη μέση θερμοκρασία του δοκιμίου είναι περίπου ίδια και στις τρεις περιπτώσεις παλμών ενώ για αυξανόμενες ροές ενέργειας, υπάρχει ξεκάθαρη διαφοροποίηση μεταξύ των τριών περιπτώσεων, με την θερμοκρασία να είναι μεγαλύτερη στη περίπτωση του παλμού 50fs. Όσον αφορά το ρυθμό αποδόμησης, για τιμές ενέργειας μέχρι 0.7 J/cm^2 φαίνεται ότι είναι μεγαλύτερος στη περίπτωση παλμών διάρκειας 100 ή 200fs ενώ για ροές ενέργειας άνω των 1 J/cm^2 μειώνεται με την αύξηση της διάρκειας του παλμού.

5.3.2 Αποτελέσματα προσομοιώσεων για Cu

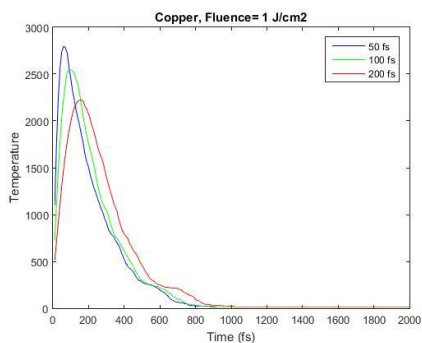
5.3.2.1 Διαγράμματα μέσης θερμοκρασίας και σχολιασμός



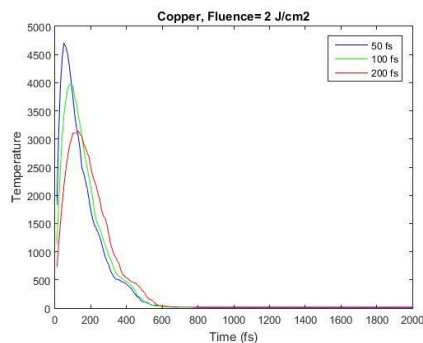
(α)



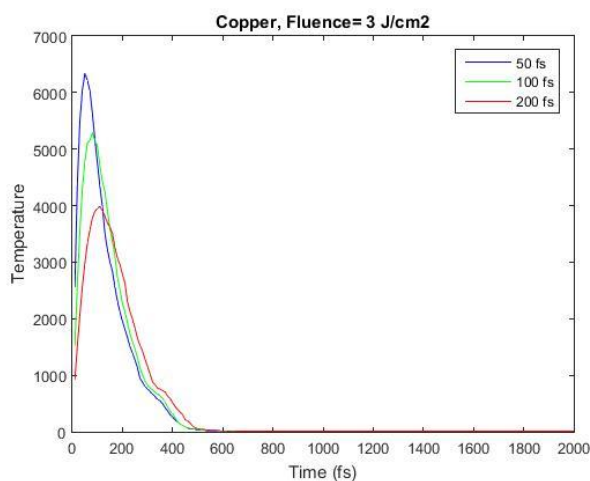
(β)



(γ)



(δ)

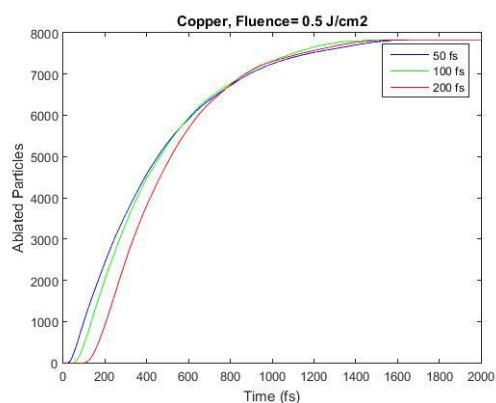


(ε)

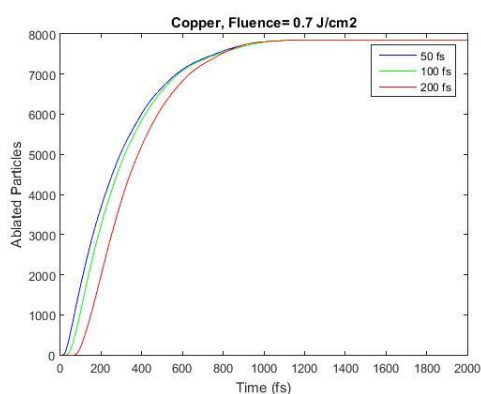
Σχήμα 5.11: Μέση θερμοκρασία δοκιμίου στις περιπτώσεις με ροή ενέργειας: (α) 0.5 J/cm², (β) 0.7 J/cm², (γ) 1 J/cm², (δ) 2 J/cm², (ε) 3 J/cm²

Παρατηρείται ότι στα διάγραμμα των μέσων θερμοκρασιών του χαλκού για τα διάφορα fluences υπάρχει μία συσχέτιση των μέγιστων θερμοκρασιών ανάλογα με τη διάρκεια παλμού, όπως είχε παρατηρηθεί και στην περίπτωση του νικελίου. Πιο συγκεκριμένα, όπως και στο νικέλιο μεταξύ των μεγίστων θερμοκρασιών η μεγαλύτερη είναι για 50 fs η μεσαία στα 100 fs και η μικρότερη για 200 fs για κάθε fluence. Με βάση αυτά τα αποτελέσματα, δεν παρατηρείται κάποια διαφορετική συμπεριφορά για τις μικρότερες τιμές ροής ενέργειας.

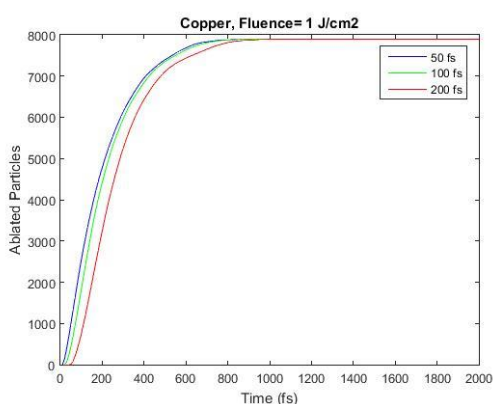
5.3.2.2 Διαγράμματα φωτοαποδομημένων ατόμων και σχολιασμός



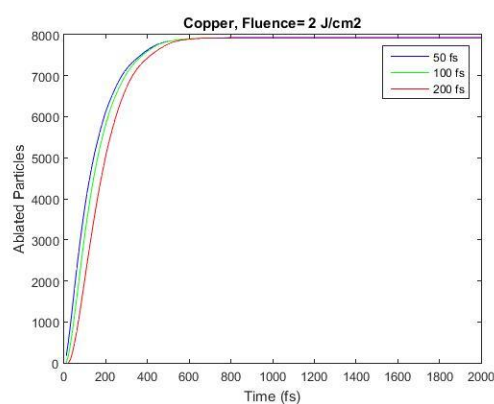
(α)



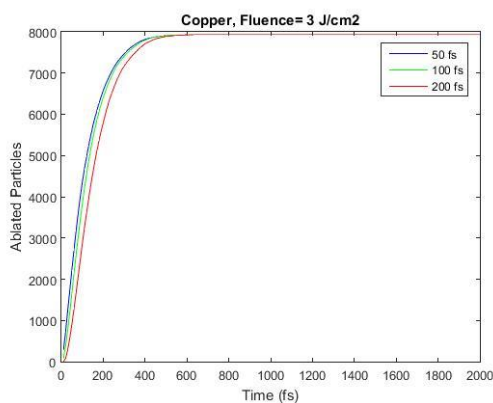
(β)



(γ)



(δ)



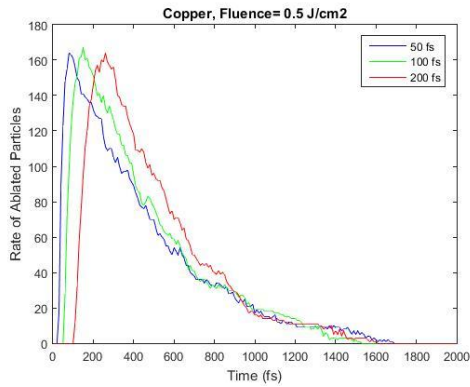
(ε)

Σχήμα 5.12: Συνολικός αριθμός αποδομημένων ατόμων σε σχέση με το χρόνο στις περιπτώσεις με ροή ενέργειας: (α) 0.5 J/cm^2 , (β) 0.7 J/cm^2 , (γ) 1 J/cm^2 , (δ) 2 J/cm^2 , (ε) 3 J/cm^2

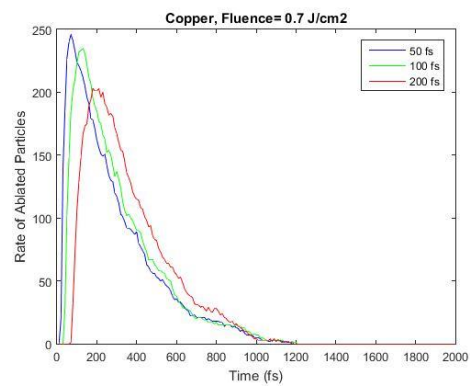
Παρατηρείται ότι σε όλα τα διαγράμματα των φωτοαποδομημένων σωματιδίων του χαλκού η φωτοαπόδομηση ξεκινάει πολύ πιο πριν από την ολοκλήρωση της διάρκειας του παλμού. Σε όλα τα διαγράμματα η φωτοαπόδομηση ξεκινάει πιο γρήγορα στα 50 fs

έπειτα στα 100 fs και τελικά στα 200 fs. Επίσης, για αυξανόμενες τιμές ροής ενέργειας, παρατηρείται μείωση του χρονικού διαστήματος που απαιτείται για την αποδόμηση όλων των ατόμων, όπως αναμενόταν. Τέλος, παρατηρείται ότι σε όλες τις περιπτώσεις, όλα τα άτομα έχουν φωτοαποδομηθεί στη διάρκεια των 2 ps.

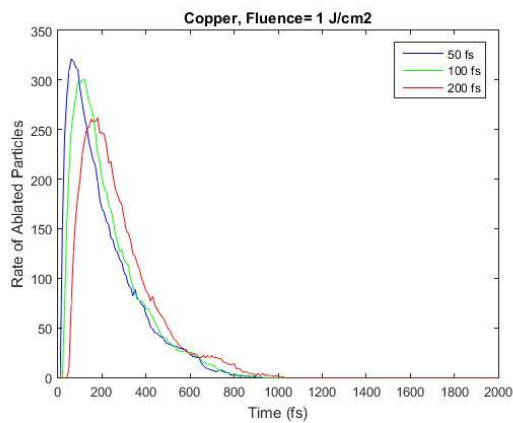
5.3.2.3 Διαγράμματα ρυθμού φωτοαποδόμησης και σχολιασμός



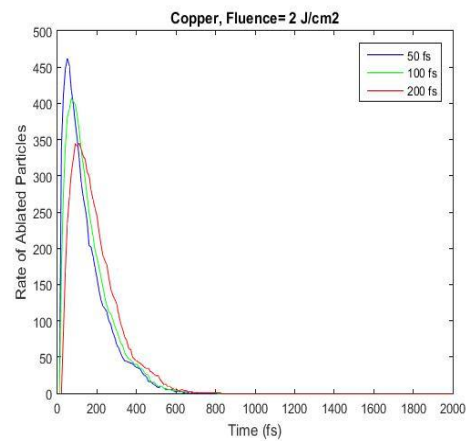
(α)



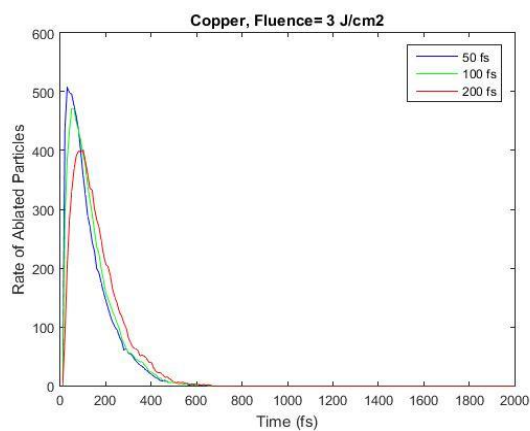
(β)



(γ)



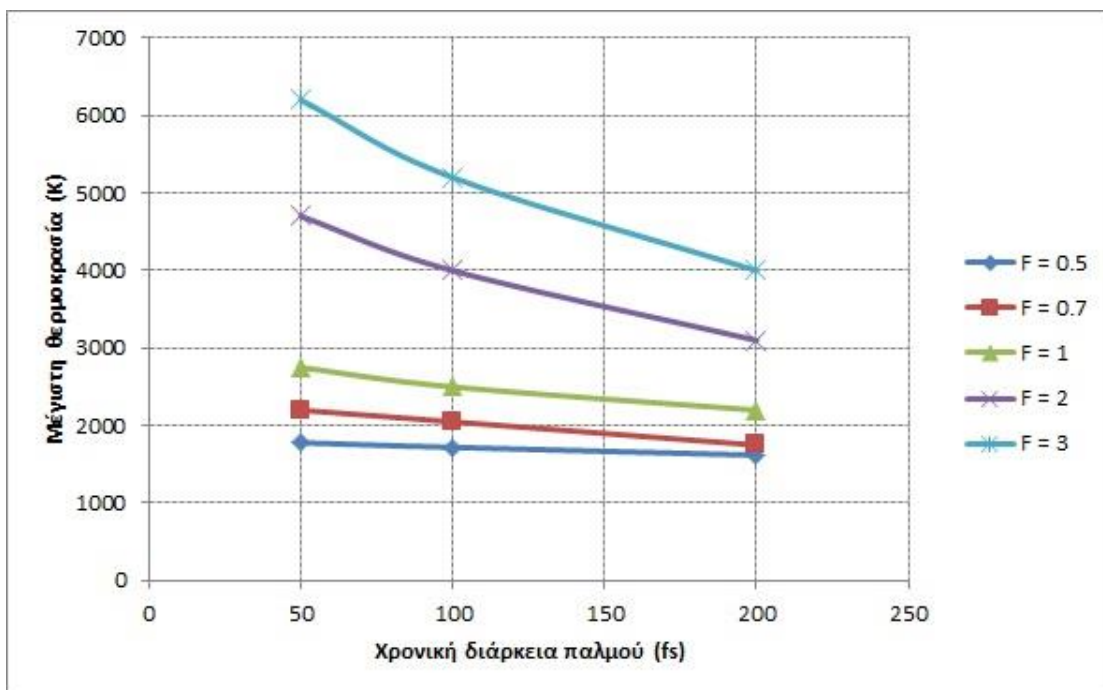
(δ)



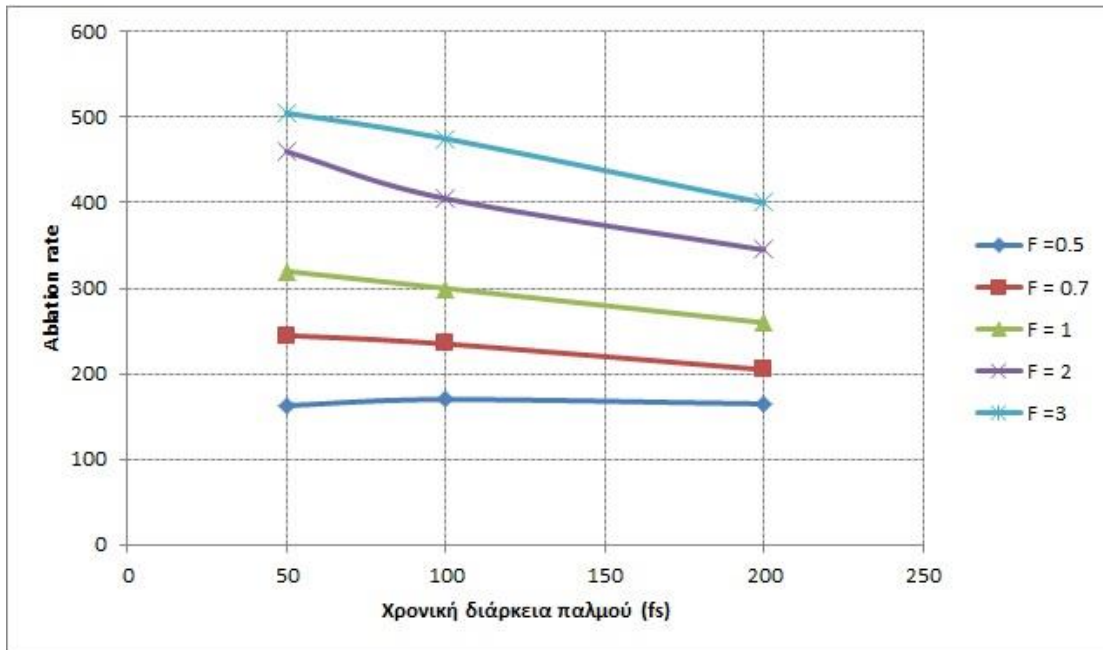
(ε)

Σχήμα 5.13: Χρονικός ρυθμός φωτοαποδόμησης στις περιπτώσεις με ροή ενέργειας: (α) 0.5 J/cm^2 , (β) 0.7 J/cm^2 , (γ) 1 J/cm^2 , (δ) 2 J/cm^2 , (ε) 3 J/cm^2

Οι τιμές του χρονικού ρυθμού φωτοαποδόμησης και στην περίπτωση του νικελίου μπορούν να σχετισθούν άμεσα με τον αριθμό των αποδομημένων σωματιδίων σε σχέση με το χρόνο καθώς και με τις τιμές της μέσης θερμοκρασίας. Σε αντίθεση με τα αντίστοιχα διαγράμματα του νικελίου, μόνο στην περίπτωση ροής ενέργειας 0.5 J/cm^2 παρατηρείται ότι ο ρυθμός αποδόμησης δεν διαφέρει ιδιαίτερα για τους τρεις διαφορετικούς παλμούς. Το γεγονός αυτό αποτυπώνεται στην καμπύλη αριθμού αποδομημένων σωματιδίων για την περίπτωση ροής ενέργειας 0.5 J/cm^2 στην οποία φαίνονται ελάχιστες διαφορές μεταξύ της καμπύλης που αντιστοιχεί σε παλμό 50fs και 100fs.



Σχήμα 5.14: Μεταβολή της μέγιστης μέσης θερμοκρασίας του δοκιμίου σε σχέση με τις συνθήκες της κατεργασίας

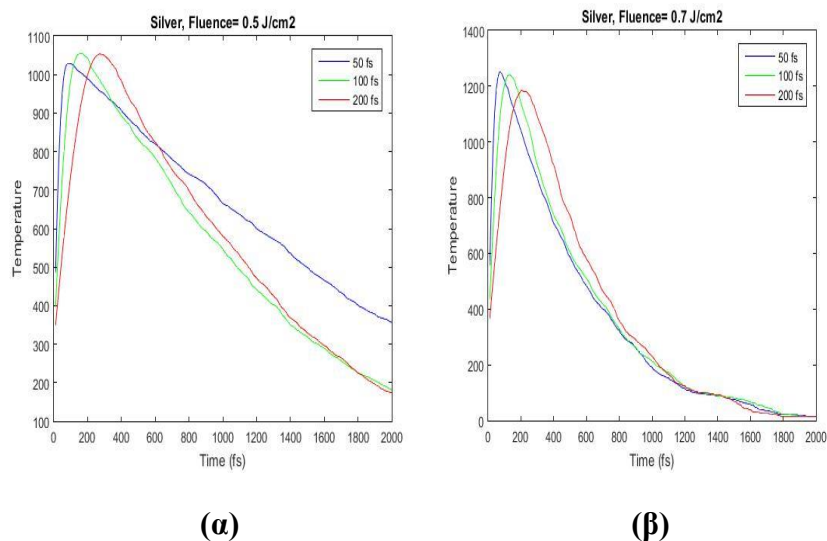


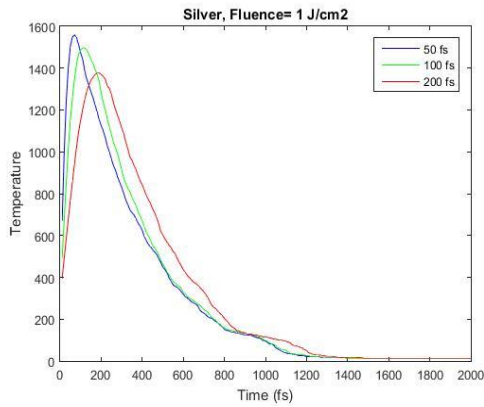
Σχήμα 5.15 : Μεταβολή του μέγιστου χρονικού ρυθμού φωτοαποδόμησης των ατόμων του δοκιμίου σε σχέση με τις συνθήκες της κατεργασίας

Στα σχήματα 5.14 και 5.15 παρουσιάζεται η μεταβολή της μέγιστης θερμοκρασίας του δοκιμίου και του μέγιστου ρυθμού φωτοαποδόμησης, αντίστοιχα, σε σχέση με τις συνθήκες κατεργασίας (διάρκεια παλμού, ροή ενέργειας). Από το διάγραμμα 5.14 φαίνεται ότι όλες τις ροές ενέργειας υπάρχει ξεκάθαρη διαφοροποίηση μεταξύ των τριών περιπτώσεων, με την θερμοκρασία να είναι μεγαλύτερη στη περίπτωση του παλμού 50fs. Όσον αφορά το ρυθμό αποδόμησης, για τιμές ενέργειας μέχρι 0.5 J/cm² φαίνεται ότι είναι μεγαλύτερος στη περίπτωση παλμών διάρκειας 100 ή 200fs ενώ για ροές ενέργειας άνω των 0.7 J/cm² μειώνεται με την αύξηση της διάρκειας του παλμού.

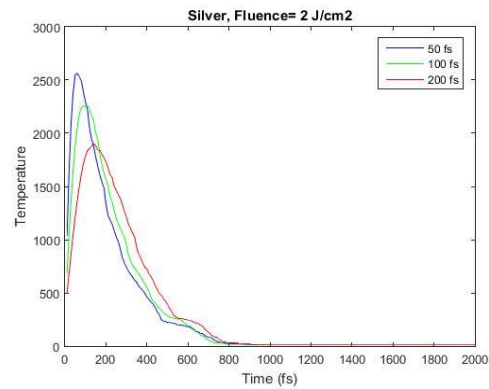
5.3.3 Αποτελέσματα προσομοιώσεων για Ag

5.3.3.1 Διαγράμματα μέσης θερμοκρασίας και σχολιασμός

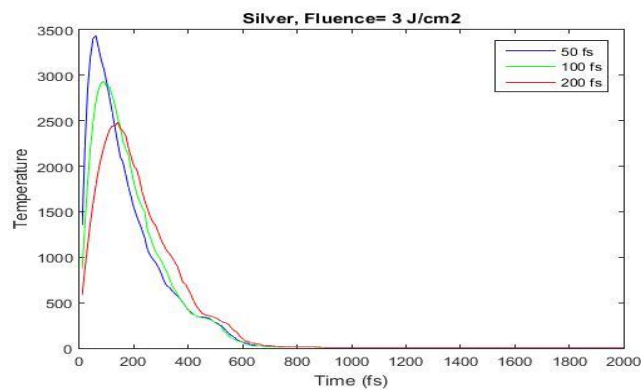




(γ)



(δ)

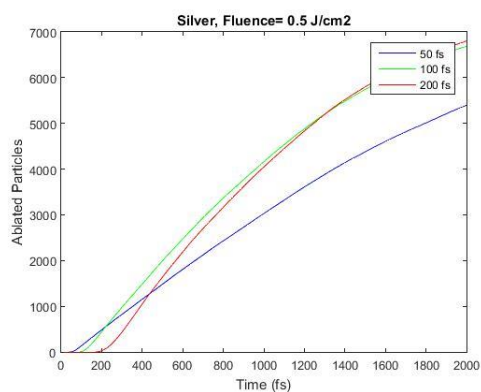


(ε)

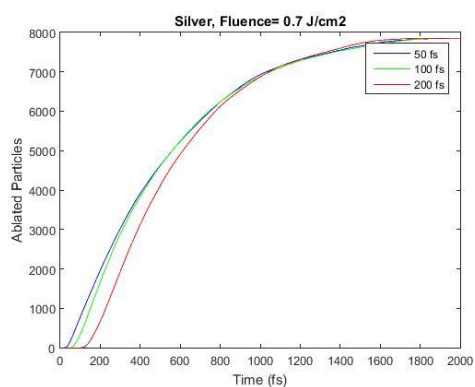
Σχήμα 5.16: Μέση θερμοκρασία δοκιμίου στις περιπτώσεις με ροή ενέργειας: (α) 0.5 J/cm^2 , (β) 0.7 J/cm^2 , (γ) 1 J/cm^2 , (δ) 2 J/cm^2 , (ε) 3 J/cm^2

Παρατηρώ ότι στα διάγραμματα των θερμοκρασιών του άργυρου για τα διάφορα fluences υπάρχει παρόμοια συσχέτιση των μέγιστων θερμοκρασιών ανάλογα με τη διάρκεια του παλμού όπως παρατηρήθηκε στις περισσότερες περιπτώσεις στις προσμοιώσεις του νικελίου και του χαλκού. Βέβαια, παρατηρείται ότι για ροή ενέργειας 0.5 J/cm^2 δεν ακολουθείται η ίδια συμπεριφορά με τις άλλες περιπτώσεις και φαίνεται ότι υπάρχει αύξηση θερμοκρασίας για αυξανόμενη διάρκεια παλμού.

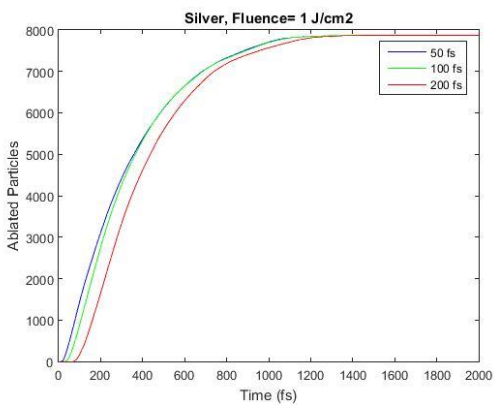
5.3.3.2 Διαγράμματα φωτοαποδομημένων ατόμων και σχολιασμός



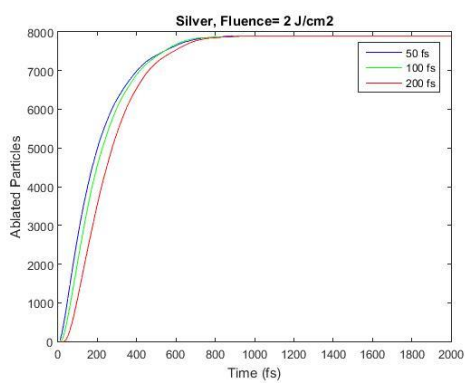
(α)



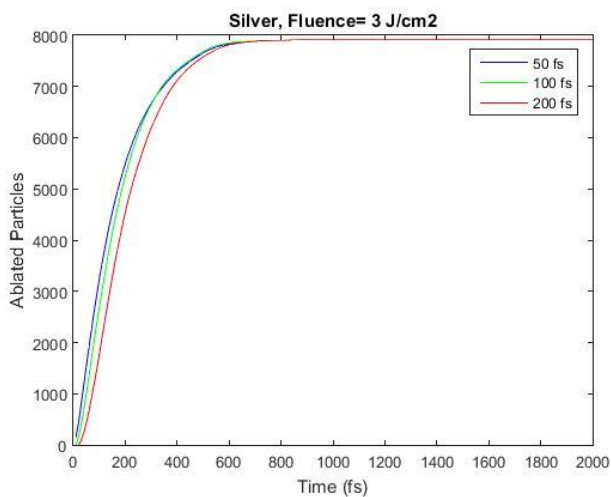
(β)



(γ)



(δ)

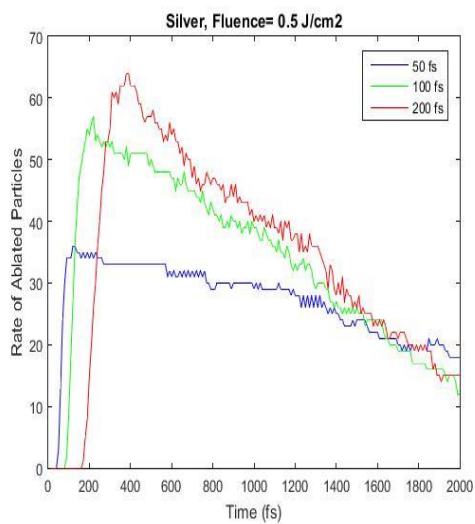


(ε)

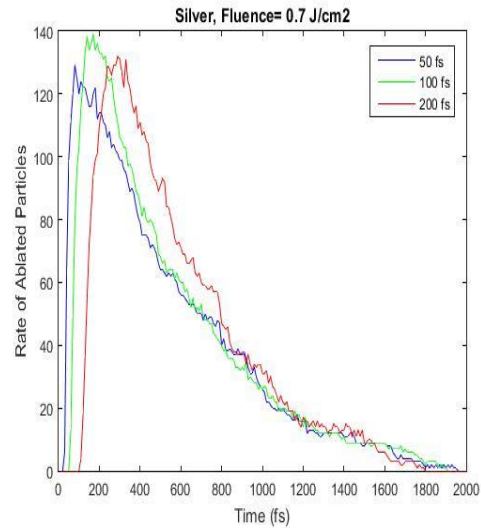
Σχήμα 5.17: Συνολικός αριθμός αποδομημένων ατόμων σε σχέση με το χρόνο στις περιπτώσεις με ροή ενέργειας: (α) 0.5 J/cm^2 , (β) 0.7 J/cm^2 , (γ) 1 J/cm^2 , (δ) 2 J/cm^2 , (ε) 3 J/cm^2

Σε όλα τα διαγράμματα εκτός από το διάγραμμα για ροή ενέργειας 0.5 J/cm^2 παρατηρείται συμπεριφορά ανάλογη αυτής που παρατηρήθηκε στα διαγράμματα του νικελίου και του χαλκού. Στην περίπτωση για ροή ενέργειας 0.5 J/cm^2 φαίνεται ότι ακόμη και μέχρι τα 2 ps έχουν αποδομηθεί λιγότερα από 7000 άτομα σε όλες τις περιπτώσεις και ότι στην περίπτωση με παλμό διάρκειας 50 fs το φαινόμενο εξελίσσεται με πιο αργό ρυθμό απ' ότι στις άλλες περιπτώσεις.

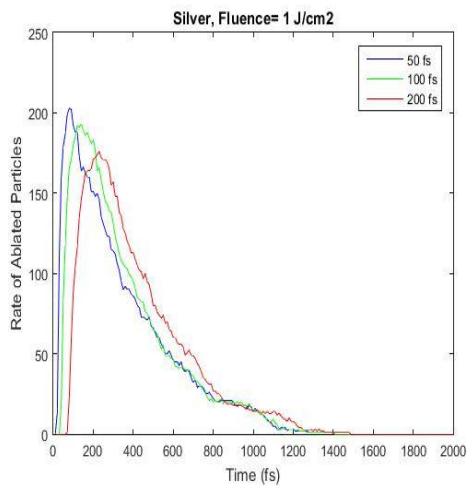
5.3.3.3 Διαγράμματα ρυθμού φωτοαποδόμησης και σχολιασμός



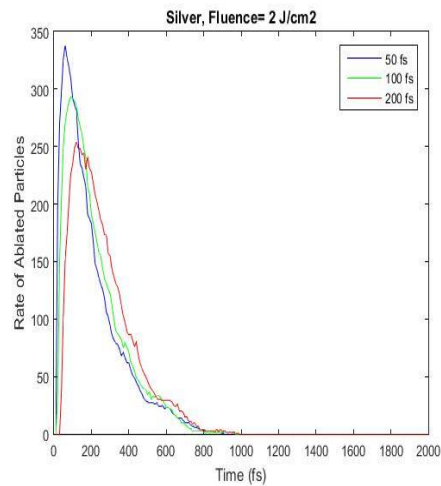
(α)



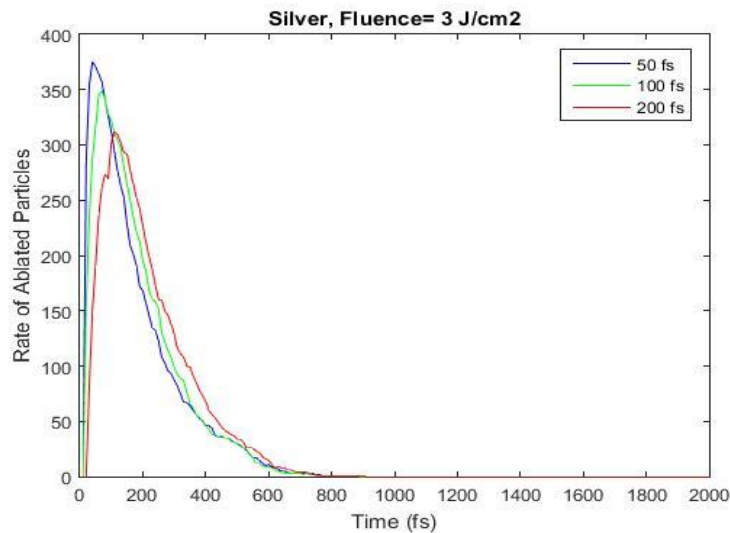
(β)



(γ)



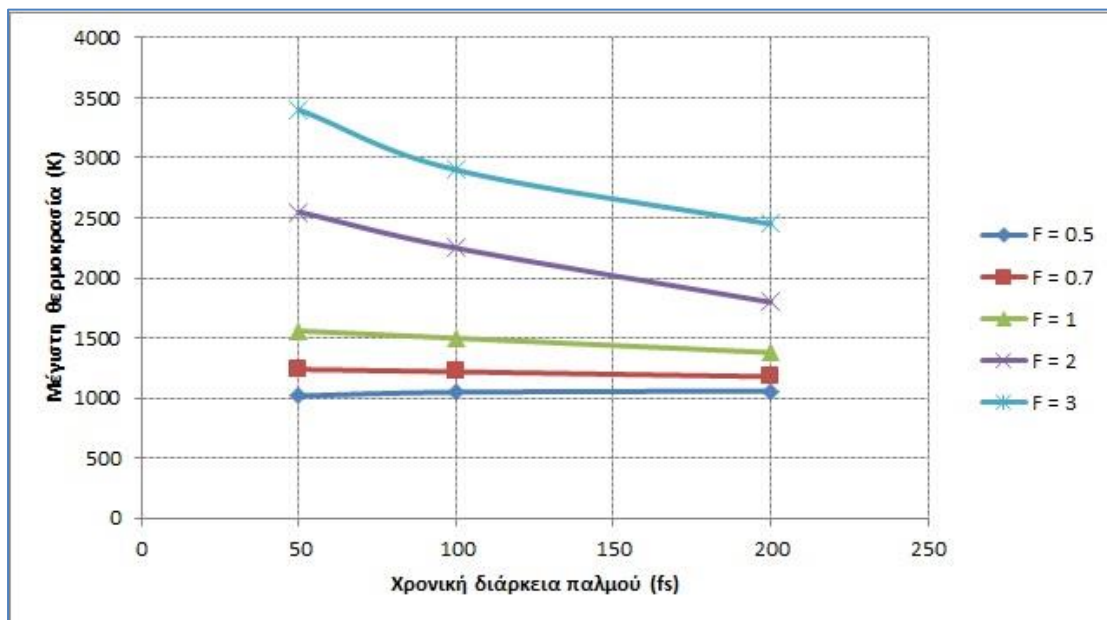
(δ)



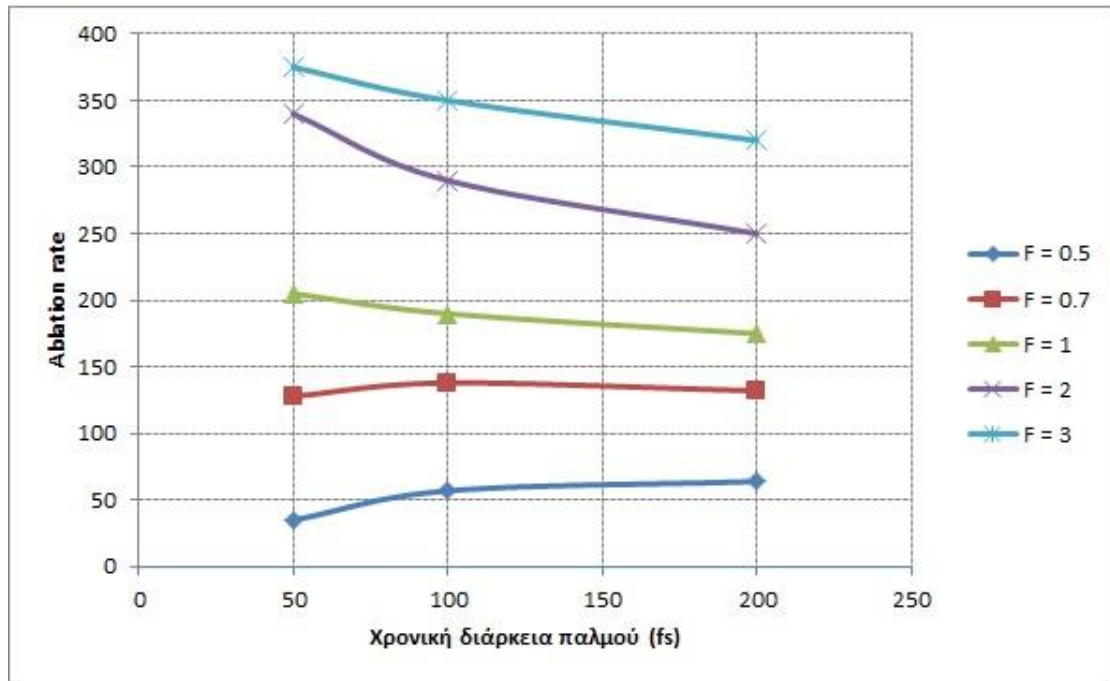
(ε)

Σχήμα 5.18: Χρονικός ρυθμός φωτοαποδόμησης στις περιπτώσεις με ροή ενέργειας: (α) 0.5 J/cm², (β) 0.7 J/cm², (γ) 1 J/cm², (δ) 2 J/cm², (ε) 3 J/cm²

Στην περίπτωση του αργύρου, παρατηρούμε ότι για ροές ενέργειας άνω των 1J/cm² ο ρυθμός φωτοαποδόμησης κυμαίνεται περίπου με τον ίδιο τρόπο σε σχέση με το χρόνο και τη διάρκεια παλμού. Στις περιπτώσεις με ροή ενέργειας 0.5 και 0.7 J/cm² όμως παρατηρούνται σημαντικές διαφορές, και ιδιαίτερα στην περίπτωση των 0.5 J/cm² ο ρυθμός αποδόμησης είναι αρκετά μεγαλύτερος στην περίπτωση του παλμού 200fs σε σχέση με τον παλμό των 50fs.



Σχήμα 5.19: Μεταβολή της μέγιστης μέσης θερμοκρασίας του δοκιμίου σε σχέση με τις συνθήκες της κατεργασίας



Σχήμα 5.20 : Μεταβολή του μέγιστου χρονικού ρυθμού φωτοαποδόμησης των ατόμων του δοκιμίου σε σχέση με τις συνθήκες της κατεργασίας

Όπως αναμενόταν από τα προηγούμενα διαγράμματα που παρουσιάστηκαν, εμφανής διαφοροποίηση στις τιμές των μέγιστων θερμοκρασιών παρατηρείται κυρίως για ροές ενέργειας από 1 J/cm^2 και άνω, ενώ για μικρότερες ροές η μέγιστη θερμοκρασία παραμένει σχεδόν ίδια ανεξάρτητα από τη χρονική διάρκεια του παλμού. Όσον αφορά το διάγραμμα μεταβολής του μέγιστου ρυθμού φωτοαποδόμησης, σε αυτή την περίπτωση παρατηρούμε για μικρές τιμές ροής ενέργειας αύξηση του ρυθμού φωτοαποδόμησης με αύξηση της χρονικής διάρκειας παλμού ενώ για ροές από 1 J/cm^2 και άνω συμβαίνει το αντίθετο.

Κεφάλαιο 6

Συμπεράσματα και προτάσεις για μελλοντική έρευνα

Έχοντας δώσει πολύ σημαντικό βάρος 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 είναι τα εξής:

1) Μέσω των προσομοιώσεων που διεξήχθησαν έγινε δυνατό να εντοπιστούν τα βασικά χαρακτηριστικά της κατεργασίας φωτοαποδόμησης και να ερευνηθεί η επίδραση της διάρκειας του παλμού laser σε αυτά. Έτσι, αρχικά, ανάλογα με τη ροή ενέργειας και την διάρκεια του παλμού, παρατηρείται μια κατακόρυφη αύξηση της μέση θερμοκρασίας του δοκιμίου με ταυτόχρονη έναρξη της διαδικασίας φωτοαποδόμησης με ολοένα αυξανόμενο ρυθμό. Μετά από την στιγμή επίτευξη της μέγιστης θερμοκρασίας, η οποία αντιστοιχεί στη στιγμή που ο ρυθμός φωτοαποδόμησης γίνεται μέγιστος, η διαδικασία συνεχίζεται με ολοένα μειούμενο ρυθμό μέχρις ότου αποδομηθούν όλα τα άτομα του δοκιμίου. Σε ορισμένες περιπτώσεις με μικρή ροή ενέργειας, η αποδόμηση ολοκληρώνεται μετά τα 2 ps. Μέσω των προσομοιώσεων επιβεβαιώνεται το γεγονός ότι σε περιπτώσεις χρήσης υπερβραχέων παλμών, μεγάλο τμήμα των ατόμων του δοκιμίου αποδομείται μετά την χρονική διάρκεια επενέργειας του παλμού.

2) Όσον αφορά την επίδραση της **ροής ενέργειας** στο σύνολο των φωτοαποδομημένων ατόμων και στη μέση θερμοκρασία, για ένα εύρος τιμών ροής $0.5 \sim 3 \text{ J/cm}^2$, οι τιμές της θερμοκρασίας και ο αριθμός των αποδομημένων σωματιδίων αυξάνονται όσο αυξάνεται η ροή ενέργειας και στα 3 διαφορετικά υλικά, ιδίως για τιμές ροής ενέργειας μεγαλύτερες του 1 J/cm^2 , όπως έχει αναφερθεί και στη βιβλιογραφία σε άλλες περιπτώσεις. Ομοίως αυξάνεται και ο χρονικός ρυθμός φωτοαποδόμησης όσο αυξάνεται η ροή ενέργειας. Αυτό δικαιολογείται από το γεγονός ότι το δοκίμιο δέχεται μεγαλύτερο ποσό ενέργειας και ο όγκος του δοκιμίου οδηγείται σε πολύ σύντομο διάστημα σε ταχεία αποδόμηση.

3) Όσον αφορά την επίδραση της **διάρκειας παλμού** στην περίπτωση των femtosecond παλμών που εξετάστηκαν, αύξηση της διάρκειας παλμού οδηγεί σε μείωση του συνόλου των αποδομημένων ατόμων και της θερμοκρασίας. Όσο για τον ρυθμό φωτοαποδόμησης, αυτός μειώνεται όσο αυξάνεται η διάρκεια παλμού για ροές ενέργειας μεγαλύτερες από 1 J/cm^2 . Για μικρότερες ροές δεν παρατηρείται η ίδια συμπεριφορά αλλά διαφορετική ανάλογα με το υλικό. Συγκεκριμένα, στην περίπτωση του νικελίου, για ροές μικρότερες του 1 J/cm^2 η διαδικασία δεν εξελίσσεται ταχύτερα στην περίπτωση του παλμού 50fs, κάτι που φαίνεται και στα διαγράμματα αποδομημένων ατόμων ενώ και οι μέγιστες θερμοκρασίες δεν διαφοροποιούνται ιδιαίτερα σε σχέση με τη χρονική διάρκεια του παλμού, κάτι που συμβαίνει σε λίγο μεγαλύτερο βαθμό και στην περίπτωση των προσομοιώσεων φίλμ αργύρου (Ag). Αντίθετα στην περίπτωση του χαλκού, λόγω των διαφορετικών ιδιοτήτων του, δεν παρατηρείται αυτό το φαινόμενο, παρά μόνο στην περίπτωση με ροή ενέργειας 0.5 J/cm^2 όπου ο ρυθμός αποδόμησης είναι περίπου ίδιος και στις τρεις περιπτώσεις χρονικής διάρκειας παλμού. Σε μεγαλύτερες ροές, η επίδραση φαίνεται να είναι ακόμα μεγαλύτερη. Τα αποτελέσματα και σε αυτή την περίπτωση συμφωνούν με τις παρατηρήσεις της βιβλιογραφίας σε άλλες περιπτώσεις.

Γενικά, από τη βιβλιογραφία έχει βρεθεί ότι η βελτίωση της ποιότητας της επιφάνειας της κατεργασίας 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.

Τέλος, με βάση τις μελέτες που έγιναν στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας, είναι σκόπιμο να γίνουν ορισμένες προτάσεις για μελλοντική έρευνα όπως:

- Επέκταση της μελέτης και σε παλμούς μεγαλύτερης διάρκειας, της τάξεως των ps ώστε να διερευνηθούν τα χαρακτηριστικά της κατεργασίας και σε αυτές τις περιπτώσεις και να συγκριθούν με τις περιπτώσεις χρήσης υπερβραχέων παλμών laser.
- Επέκταση της μελέτης για μεγαλύτερο εύρος τιμών ροής ενέργειας και σε μεγαλύτερου μεγέθους φιλμ ώστε να υπολογιστεί πιο αναλυτικά η εξάρτηση των χαρακτηριστικών της κατεργασίας με τις παραμέτρους του laser.
- Χρήση διαφορετικού μοντέλου υπολογισμού της ενέργειας του laser και διαφορετικών συναρτήσεων δυναμικού, καθώς και επέκταση της μελέτης σε άλλα είδη υλικών.

Βιβλιογραφία

- 1) High Power Laser Beam Machining of Structural Ceramics, Firestone, R.F. & Vesely, Jr. E.J., ASME Symposium of Advanced Ceramic Materials (1988), 215-227.
- 2) The Physical Mechanisms of Short Pulse Laser Ablation, von der Linde, D. & Sokolowski Tinten, K., Applied Surface Science, Vol. 154-155 (2000), 1-10.
- 3) Principles of Lasers, Svelto, O., Plenum Press, New York (1998).
- 4) 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.
- 5) 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.
- 6) 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.
- 7) 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.
- 8) Molecular Dynamics Simulation of Shock Waves in Laser-Material Interaction, Gacek, S.S., Iowa State University, 2009.
- 9) 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 334872742 (USA). © 2012.
- 10) Molecular Dynamics Simulation, Ogbonna, N., African Institute for Mathematical Sciences, Muizenberg, South Africa, May 2004.
- 11) 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), 12121218.
- 12) 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.
- 13) A Brief History of Laser Ablation, Miller, J.C., Laser Ablation: Mechanisms and Applications – II: AIP Conference Proceedings, Volume 288 (1993), 619-622.

- 14) 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.
- 15) 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.
- 16) Laser Soldering-New Light on an Old Joining Process, Messler, W.R., & Millard, D.L., Welding Journal, 73(10) (1994), 43-48.
- 17) Laser Forming, Geiger, M., Arnet, H. & Vollertsen, F., Proceedings of the LANE'94, I (1994), 8192.
- 18) 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.
- 19) Laser Technology in Processing of Coated Sheets, Poprawe, R., Klein, R. & Abram, L., Stahl und Eisen, 115(7) (1995), 31-37.
- 20) Model for the Temperature Gradient Mechanism of Laser Bending, Vollertsen, F., Proceedings of the LANE'94, I (1994), 345-360.
- 21) 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.
- 22) 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).
- 23) Improved Manufacturing Processes with High Power Lasers, Leidinger, D., Penz, A., & Schuöcker, D. (1995), Infrared Physics Technology, 36(1) (1995), 251-266.
- 24) Gas-Jet Laser Cutting, Babenko, V.P. & Tychinskii, V.P., Soviet Journal of Quantum Electronics, 2(5) (1973), 399-410.
- 25) On Laser Fusion Cutting of Metals, Schulz, W., Simon, G., Urbassek, H.M. & Decker, I., Journal Physics D: Applied Physics, 20 (1989), 481-488.
- 26) Laser Processing Integrated in Machine Tools-Design, Applications, Economy. Hügel, H., Rundlaff, T. & Wiedmaier, M., Proceedings of the LANE '94, I (1994), 439-453.
- 27) 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.

- 28) 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.
- 29) Introduction to Solid State Physics, Kittel, C., John Wiley & Sons (1976)
- 30) Molecular dynamics simulation using pair and many body interatomic potentials: ultrashort laser ablation of Fe, S.E. Imamova, P.A. Atanasov, N.N. Nedialkov, F. Dausinger, P. Berger (2005)
- 31) Molecular dynamics simulation of thermal and thermomechanical phenomena in picosecond laser material interaction, Xinwei Wang, Xianfan Xu (2003)
- 32) Molecular dynamics studies of ultrafast laser-induced phase and structural change in crystalline silicon, Chengjuan Yang, Yaguo Wang, Xianfan Xu (2012)
- 33) Laser ablation of iron by ultrashort laser pulses, N.N. Nedialkov, S.E. Imamova, P.A. Atanasov, G. Heuselb, D. Breitlingb, A. Ruf, H. Hugel, F. Dausinger, P. Berger (2004)
- 34) Picosecond pulsed laser ablation of silicon: a molecular-dynamics study, Patrick Lorazo, Laurent J. Lewis, Michel Meunier (2000)
- 35) Laser ablation of Ni by ultrashort pulses: molecular dynamics simulation, P.A. Atanasov, N.N. Nediakov, S.E. Imanova, A. Ruff, H. Hugel, F. Dausinger, P. Berger (2002)
- 36) Laser ablation thresholds of silicon for different pulse durations: theory and experiment, Harald O. Jeschke, Martin E. Garcia, Jorn Bonse, Jorg Kruger, Wolfgang Kautek (2002)
- 37) Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials, V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, S.I. Ashitkov, K. Nishihara (2009)
- 38) Multi-scale modeling of phase explosion in high fluence nanosecond laser ablation and clarification of ablation depth prediction criterion, Yunfeng Cao, Yung C. Shin (2015)
- 39) Plume splitting in pico-second laser-material interaction under the influence of shock wave, Sobieslaw Gacek, Xinwei Wang (2009)
- 40) Atomistic Simulation of Laser Ablation of Gold: Effect of Pressure Relaxation, G. E. Norman, S. V. Starikov, and V. V. Stegailov (2012)
- 41) Molecular-dynamics study of ablation of solids under femtosecond laser pulses, Danny Perez and Laurent J. Lewis (2003)
- 42) Laser ablation with short and ultrashort laser pulses: Basic mechanisms from molecular-dynamics simulations, Laurent J. Lewis, Danny Perez (2009)

- 43) Laser ablation of metals by femtosecond pulses: Theoretical and experimental study, N.N. Nedialkov, P.A. Atanasov, S. Amoruso, R. Bruzzese, X. Wang (2007)
- 44) Molecular dynamics simulation study of deep hole drilling in iron by ultrashort laser pulses, N.N. Nedialkov, P.A. Atanasov (2006)
- 45) Ultrashort-pulse laser ablation of gold thin film targets: Theory and experiment S. Amoruso, N.N. Nedialkov, X. Wang, G. Ausanio, R. Bruzzese, P.A. Atanasov (2014)
- 46) Bubble Nucleation in Liquids, Blander, M. & Katz, J., American Institute of Chemical Engineers Journal, 21(5) (1975), 833-848.
- 47) Manufacturing Systems: Theory and Practice, Chryssolouris, G., Second Edition, Second Edition, Springer, New York (2006).
- 48) 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)
- 49) Computer Simulation in Materials Science (Vol. 205), Meyer, M. & Pontikis, V., NATO ASI Series, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands (1991).
- 50) Feynman Lectures on Physics, Feynman, R.P., Leighton, R.B. & Sands, M., Addison-Wesley (1964).
- 51) Studies in Molecular Dynamics. General Method, Adler, B.J. & Wainwright, T.E., Journal of Chemical Physics, Vol. 31 (1959), 459.
- 52) 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).
- 53) Numerical Recipes, Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A. & Vetterling, W.T., Cambridge University Press, Cambridge (1986).
- 53) 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.
- 54) Configurational Bias Monte Carlo: A New Sampling Scheme for Flexible Chains, Siepmann, J.I. & Frenkel, D., Molecular Physics, Vol. 75 (1992), 59-70.
- 56) Recent Contributions of Statistical Mechanics in Chemical Engineering, Deem, M.W., AIChE Journal, 44 (1998), 2569-2596.
- 57) 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.

- 58) 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.
- 59) Phase Transition of a Hard Sphere System, Alder, B.J. & Wainwright, T.E., *Journal of Chemical Physics*, Vol. 27 (1957), 1208-1209.
- 60) *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Rapaport, D.C., Cambridge University Press, Cambridge, UK (1995).
- 61) *Computer Simulation of Liquids*, Allen, M.P. & Tildesley, D., Oxford University Press (1987).
- 62) *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*, Frenkel, D. & Smit, B., Academic Press, San Diego (1996).
- 63) Belak, J. and Stowers, I. F. A molecular dynamics model of the orthogonal cutting process. In *Proceedings of the ASPE Annual Conference*, Rochester, New York, 1990, p. 76.
- 64) Stowers, I. F., Belak, J., Lucca, D. A., Komanduri, R., Rhorer, R. L., Moriwaki, T., Okuda, K., Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H., Dow, T. A. and Drescher, J. D. Molecular dynamics simulation of the chip forming process in single crystal copper and comparison with experimental data. In *Proceedings of the ASPE Annual Conference*, 1991, pp. 100-103.
- 65) Belak, J., Boercker, D. B. and Stowers, I. F. Simulation of nanometer-scale deformation of metallic and ceramic surfaces. *MRS Bull.*, May 1993, 21(2),55-60.
- 66) Belak, J. Nanotribology: modeling atoms when surfaces collide. *Energy and Technology Review*, Lawrence Livermore National Laboratories (LLNL), August-September 1994, pp. 13-24.
- 67) Ikawa, N., Donaldson, R., Komanduri, R., Konig, W., McKeown, P. A., Moriwaki, T. and Stowers, I. Ultra precision metal cutting—the past, the present, and the future. *Ann. CIRP*, 1991, 40(2), 587-594.
- 68) Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H. and Ohmori, G. An atomistic analysis of nanometric chip removal as affected by tool-work interaction in diamond turning. *Ann. CIRP*, 1991, 40(1), 551-554.
- 69) Shimada, S., Ikawa, N., Ohmori, G. and Tanaka, H. Molecular dynamics analysis as compared with experimental results of micromachining. *Ann. CIRP*, 1992,41(1), 117-120.
- 69) Shimada, S., Ikawa, N., Tanaka, H., Ohmori, G., Uchikoshi, J. and Yoshinaga, H. Feasibility study on ultimate accuracy in microcutting using molecular dynamics simulation. *Ann. CIRP*, 1993, 42(1), 91-94.
- 71) Shimada, S., Ikawa, N., Tanaka, H. and Uchikoshi, J. Structure of

micromachined surface simulated by molecular dynamics analysis. *Ann. CIRP*,1994, 43(1), 51-54.

72) Inamura, T., Suzuki, H. And Takezawa, N. Cutting experiments in a computer using atomic models of a copper crystal and a diamond tool. *Int. J. Jap. Soc.Precision Engng*, 1991, 25(4), 259-266.

73) Inamura, T., Takezawa, N. and Taniguchi, N. Atomic- scale cutting in a computer using crystal models of copper and diamond. *Ann. CIRP*, 1992, 41(1),121-124.

74) Inamura, T., Takezawa, N. and Kumaki, Y. Mechanics and energy dissipation in nanoscale cutting. *Ann. CIRP*, 1993, 42(1), 79-82.

75) Inamura, T., Takezawa, N., Kumaki, Y. And Sata, T. On a possible mechanism of shear deformation in nanoscale cutting. *Ann. CIRP*, 1994, 43(1),47-50.

76) D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2nd edition, Cambridge University Press, 2004

77) Torrens, I. M. *Interatomic Potentials*, 1972 (Academic Press, New York).

78) S. Nose'. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble. *Molecular Physics*, 52(2):255–268, 1984.

79) P.A. Romero a, G. Ancaux a, A. Molinari b, J.-F.Molinari a, †, Insights into the thermo-mechanics of orthogonal nanometric machining, *Computational Materials Science* 72 (2013) 116–126.

80) Marshall, E. R. and Shaw, M. C. Forces in dry surface grinding. *Trans. ASME*, 1952, 74, 51-59.

81) Georgios C.Kyriakakis, Master Thesis: Material Removal via a Beam of Laser Rays: Experimental Study and Modeling using the Molecular Dynamics Method (2013)

82) J. Sotrop, J. Winter, S. Rapp, H. P. Huber, Understanding laser ablation efficiency, *Lasers & Sources*, 2015, SPIE Newsroom, DOI: 10.1117/2.1201508.006004

83) A. Tunnermann, S. Nolte, J. Limpert, Femtosecond vs. Picosecond Laser Material Processing: Challenges in Ultrafast Precision Laser Micromachining of Metals at High Repetition Rates, *Laser Technik Journal*, Vol. 7, Issue 1, 2010

84) K.-H. Leitz, B. Redlingshofer, Y. Reg, A. Otto, M. Schmidt, Metal Ablation with Short and Ultrashort laser pulses, *Physics Procedia* 12, 2011, 230-238

85) Διερεύνηση της σχέσης μεταξύ του ρυθμού φωτοαποδόμησης και της πυκνότητας ενέργειας κατά την κατεργασία αφαίρεσης υλικού με δέσμη Laser με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής, Διπλωματική εργασία, Εμμανουήλ Σιδέρης, 2016

86) Y.L. Yao, H. Chen, W. Zhang, Time scale effects in laser material removal: a review, *Int J Adv Manuf Technol*, 2005, 26, 598-608

87) P. A. Atanasov and N. N. Nedialkov, “Influence of the processing parameters on the ultrashort laser ablation of metals”, Proc. of SPIE Vol. 6346 63462Y-1.

88) Boris Le Drogoff, François Vidal, Stéphane Laville, Mohamed Chaker, Tudor Johnston, Olivier Barthélemy, Joëlle Margot, and Mohamad Sabsabi, “Laser-ablated volume and depth as a function of pulse duration in aluminum targets”, APPLIED OPTICS Vol. 44, No. 2, 10 January 2005.

89) N. N. Nedialkov, S. E. Imamova and P. A. Atanasov, “Ablation of metals by ultrashort laser pulses”, J. Phys. D: Appl. Phys. 37 (2004) 638–643.