



## Studying the thermal effects of nanosecond Nd: YAG laser -gold metal interactions

N.Javanmard<sup>1</sup>, M.Aliannezhadi<sup>1,2\*</sup>, m.sovizi<sup>3</sup>

*\*Assistant Professor, Semnan University, Semnan, Iran*

(Received: 09/03/2024 revised: 09/06/2024 Accepted:10/07/2024 published: 22/07/2024)

DOR: <https://dorl.net/dor/>

### Abstract

Today, the interaction of laser beams with materials has a wide range of interests in daily, industrial, scientific, and medical applications. In the paper, the interaction of a single nanosecond pulse of a second harmonic Nd-YAG laser with gold metal is investigated to obtain a more comprehensive understanding of the basics of laser beam interaction with metals and to evaluate the appropriate conditions for laser radiation. The simulations were done by solving the quadratic equation of heat in three dimensions with the Generalized Finite Difference Time Domain (G-FDTD) method using Fortran programming language. Also, metal properties such as the thermal conductivity and specific heat capacity of gold are considered as a function of temperature in the model so that the results are closer to reality. The results indicate that the energy per pulse and linewidth of the laser pulse and also the spot size of the laser beam have a significant effect on the distribution of temperature on the surface and depth of the gold and also on the heat-affected zone (HAZ). Indeed, the maximum temperature is directly related to increases in energy per pulse. While it shows an inverse relationship between the time linewidth of the laser pulse and the spot size of the laser beam. Also, the time of maximum temperature has a delay compared to the peak of the laser pulse, and this delay time shows a direct and linear relationship with the linewidth of the laser pulse. In addition, the dependences of the gold melting threshold to characteristic parameters of the laser including laser spot size, laser linewidth, and laser fluences are studied in the paper to provide a general map for users to achieve melting of the gold by exposing the nanosecond pulse of second harmonic Nd-YAG laser.

**Keywords:** Nanosecond pulsed laser, Linewidth of the laser pulse, laser-gold interaction, Generalized Finite Difference Time Domain (G-FDTD) method.

<sup>1</sup>Corresponding author E-mail: javan.nader@semnan.ac.ir

This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license.

علمی - پژوهشی

## بررسی اثرات گرمایی در برهم کنش لیزر نانوئانبه با فلز طلا

نادر جوانمرد<sup>۱</sup>، مریم علیان نژادی<sup>۲\*</sup>، مهدی سویزی<sup>۳</sup>

۱-دانشجوی دکتری، ۲-استادیار، ۳-دانشیار دانشگاه سمنان، سمنان، ایران  
(دریافت: ۱۴۰۲/۱۲/۱۹، بازنگری: ۱۴۰۳/۰۳/۲۰، پذیرش: ۱۴۰۳/۰۴/۲۰، انتشار: ۱۴۰۳/۰۵/۰۱)

DOR: <https://dorl.net/dor/>



\* این مقاله یک مقاله با دسترسی آزاد است که تحت شرایط و ضوابط مجوز (CC BY) Creative Commons توزیع شده است.

نویسندگان ©

ناشر: دانشگاه جامع امام حسین (ع)

### چکیده

امروزه برهم کنش باریکه‌های لیزری با مواد در گستره وسیعی از کاربردهای روزانه، صنعتی، علمی و پزشکی مورد توجه قرار دارد. در این مقاله برهم کنش تک پالس هارمونیک دوم لیزر پالسی نانوئانبه Nd-YAG با فلز طلا مورد بررسی قرار می‌گیرد تا شناخت بهتری از مبانی برهم کنش باریکه لیزری با فلزات حاصل شود و شرایط مناسب برای تابش لیزر مورد ارزیابی قرار گیرد. شبیه‌سازی‌ها با حل معادله درجه دوم گرما در سه بعد با روش تعمیم‌یافته تفاضل محدود حوزه زمان (G-FDTD) و با استفاده از زبان برنامه‌نویسی فرتن انجام شده است. خصوصیات فلز مانند ضریب هدایت گرمایی طلا و ظرفیت گرمایی ویژه آن در مدل‌سازی به صورت تابع دما در نظر گرفته شده است تا نتایج به واقعیت نزدیک‌تر شوند. بررسی‌ها نشان می‌دهد که انرژی هر پالس لیزر، پهنای زمانی پالس لیزر و شعاع باریکه لیزری بر توزیع دما در سطح و عمق فلز طلا و نیز بر ناحیه تحت تأثیر گرما مؤثر هستند و بیشینه دما با افزایش انرژی هر پالس رابطه مستقیم دارد؛ ولی با پهنای زمانی پالس و نیز اندازه لکه لیزری رابطه معکوس دارد. همچنین، بیشینه دما نسبت به قله پالس لیزری تأخیر زمانی دارد و این تأخیر با پهنای زمانی پالس رابطه مستقیم و خطی نشان می‌دهد. علاوه بر این، در این مقاله، وابستگی آستانه ذوب طلا به مشخصه‌های تابش لیزر مثل اندازه لکه لیزری، پهنای خط و شار انرژی لیزر مورد بررسی قرار می‌گیرد تا نقشه کلی برای کاربران برای دستیابی به شرایط ذوب با تابش تک پالس هارمونیک دوم لیزر پالسی نانوئانبه Nd-YAG فراهم شود.

**کلیدواژه‌ها:** لیزر پالسی نانوئانبه، پهنای پالس لیزر، برهم کنش لیزر با طلا، روش تعمیم‌یافته تفاضل محدود حوزه زمان.

### ۱- مقدمه

در برهم کنش نور با مواد فلزی عمدتاً فرآیندهای بازتاب و جذب به وقوع می‌پیوندند. معمولاً فلزات در دماهای قبل از دمای تبخیر ضریب بازتاب بزرگی دارند. در طی فرآیند بخشی از انرژی جذب شده به گرما تبدیل می‌شود. فرآیند حاکم در این برهم کنش‌ها با توجه به شرایط باریکه‌ی لیزر تابشی و فلز می‌تواند در محدوده‌ی برهم کنش‌های خطی یا غیرخطی قرار بگیرد [۷، ۸]. همچنین، در شرایطی که انرژی پالس لیزری نانوئانبه و یا تعداد پالس لیزر به حدی باشد که کندگی رخ دهد، باید اثر حفاظ پلاسمایی ناشی از کندگی فلزات را نیز در نظر گرفت [۹، ۱۰].

تحقیقات نظری و تجربی بسیاری با توجه به اهمیت برهم کنش لیزرهای پالسی با فلزات گزارش شده است که به عنوان نمونه به برخی از آنها اشاره می‌شود. شبیه‌سازی کندگی فلز آلومینیوم با لیزر پالسی نانوئانبه با مدل گرمایی گزارش شده است و در آن هدایت گرمایی یک بعدی با در نظر گرفتن وابستگی دمایی

برهم کنش لیزرهای پالسی با مواد در گستره وسیعی از کاربردها از جمله کاربردهای پردازش لیزری مواد، اپتوالکترونیک، فوتولتائیک، زیست‌حسگری، طیف‌سنجی رامان تقویت‌شده سطحی<sup>۱</sup> (SERS)، طیف‌سنجی فروشکست القایی لیزری<sup>۲</sup> (LIBS)، ماشین‌کاری دقیق، تولید نانوذرات، درمان غیرتهاجمی سرطان و غیره مورد توجه خاص قرار دارد [۱-۶]. اثرات حرارتی ناشی از برهم کنش لیزر با نانو ساختارهای فلزی از جمله لایه‌های نازک فلزی، نانوذرات و نانومیله‌ها یکی از محورهای مورد مطالعه در بسیاری از کاربردهای فوق می‌باشد.

\* رایانامه نویسنده مسئول: javan.nader@semnan.ac.ir

<sup>1</sup> Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS)

<sup>2</sup> Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS)

فلز طلا در سطح و عمق ماده بررسی می‌شود و تأثیر این عوامل بر دمای ایجاد شده در سطح و عمق ماده و ناحیه تحت‌تأثیر گرما (HAZ) مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. شبیه‌سازی‌ها با حل معادله گرما مبتنی بر قانون بقای انرژی و قانون هدایت گرمایی فوریه و با روش تعمیم‌یافته تفاضل محدود حوزه زمان<sup>۴</sup> (G-FDTD) به‌عنوان روشی بسیار توانمند در شبیه‌سازی هندسه و خواص مواد پیچیده برای کدنویسی در فرترن استفاده شده و در پایان نمودار وابستگی آستانه ذوب طلا به مشخصه‌های لیزر ارائه می‌شود که نقشه جامعی در اختیار کاربر قرار می‌دهد تا باتوجه‌به مشخصات لیزری که در دسترس دارد، بتواند مشخصه‌های تابش لیزر برای رسیدن به نقطه ذوب طلا یا دمای بالاتر از آن را مدیریت کرده و از اتلاف زمان و منابع، جلوگیری شود.

## ۲- مفاهیم نظری و روش شبیه‌سازی

پدیده‌های مختلف در طی برهم‌کنش پالس لیزر با فلزات اتفاق می‌افتند که دلیل آن خواص منحصربه‌فرد فلزات و خصوصیات نور لیزر است که در ادامه به برخی از این پدیده‌ها پرداخته می‌شود: معمولاً ضریب بازتاب فلزات در دماهای کمتر از دمای بحرانی بالا است و تأثیر آن‌ها باید در بررسی‌ها در نظر گرفته شود. علاوه بر این، پدیده جذب در برخی طول‌موج‌ها قابل‌توجه است و این جذب نور می‌تواند منجر به وقوع پدیده‌های مختلف از جمله گرمایش موضعی و ذوب شود. فرایند بخارشدن فلز طلا می‌تواند پس از عبور از فاز مذاب یا بدون عبور از فاز ذوب اتفاق بیفتد که وابسته به‌شدت و پهنای پالس لیزر است. در این فرآیند، اتم‌های سطحی انرژی کافی را از طریق جذب باریکه لیزری دریافت می‌کنند تا به فاز بخار بروند. تشکیل پلاسما پدیده دیگری است که در اثر جذب باریکه لیزری با شدت بسیار بالا می‌تواند رخ دهد. در این فرآیند، اتم‌های فلز یونیزه شده باعث ایجاد پلاسما می‌شوند که شامل الکترون‌های آزاد و یون‌های مثبت است. تابیده شده از پلاسما می‌تواند برای طیف‌سنجی و مطالعه ترکیب شیمیایی فلز استفاده شود. علاوه بر موارد فوق، برهم‌کنش نور لیزر با فلز ممکن است منجر به تغییرات مختلف سطحی شود که به پارامترهای لیزر و خصوصیات فلز بستگی دارد. از جمله این تغییرات می‌توان به تغییر در زبری سطح، جذب سطح، ایجاد ساختارهای با ابعاد میکرو یا نانو و تغییر در ساختار بلوری ماده اشاره کرد. وقوع این پدیده‌ها تحت‌تأثیر پارامترهای لیزری مانند طول‌موج، شدت، طول پالس و نرخ تکرار و نیز خواص فلز مانند تابش‌پذیری، هدایت حرارتی، نقطه ذوب و... قرار دارند.

اگر شدت لیزر کوچکتر از  $10^{10} \text{ w/cm}^2$  باشد، سازوکار برهم‌کنش لیزر-فلز در ناحیه جذب خطی قرار گرفته و پدیده‌ی غالب در توصیف برهم‌کنش پالس لیزرهای نانوآئینه با فلزات همان پدیده

مشخصه‌های آلومینیوم در محاسبات وارد شد [۱۱]. همچنین، مدل تفاضل محدود دو بعدی برای شبیه‌سازی کندگی کربنات تیتانیوم با لیزر پالس نانوآئینه به کار گرفته شد و توزیع دما و عمق کندگی با اعمال شار انرژی<sup>۱</sup> های مختلف گزارش شد [۱۲]. علاوه بر این، بررسی رفتار گذرای برهم‌کنش تک پالس لیزر نانوآئینه با لایه نازک طلا بر روی BK7 به‌صورت تئوری و بطور تجربی بررسی شده است و مقایسه‌ی نتایج شبیه‌سازی با نتایج تجربی به کمک روش تداخل‌سنجی نشان داد که همخوانی خوبی بین شبیه‌سازی و نتایج تجربی وجود دارد [۹]. نتایج این گروه نشان داد که، اندازه‌ی برآمدگی مرکزی در شبیه‌سازی و تجربه به ترتیب ۲۴ نانومتر و ۱۷ نانومتر است. در گزارش دیگری، چگالی انرژی آستانه‌ی ذوب لیزری لایه‌های فلزات نیکل و طلا در ضخامت‌های ۵۰ نانومتری تا ۷ میکرومتری با لیزر ۲۴۸ نانومتر با پالس‌های لیزری ۱۴ نانوآئینه‌ای بررسی شده است [۱۳]. علاوه، سازوکار و فرآیندهای تشکیل میکروساختارها و نانوآئینه‌های ناشی از تابش لیزرهای پالسی کوتاه و فوق‌کوتاه (نانوآئینه، پیکوآئینه و فمتوآئینه) بر لایه‌های فلزی نیز در مرجع [۱۴] ارائه شده است و در آن به امکان کنترل ویژگی‌های نانوآئینه‌ها (اندازه، مورفولوژی<sup>۲</sup>، شکل و ساختار) با کنترل پارامترهای لیزری (انرژی، طول موج و پهنای زمانی پالس)، مشخصات فیلم نازک فلزی (جنس و ضخامت) و ویژگی‌های زیر لایه نظیر هدایت گرمایی پرداخته شده است. بررسی‌ها نشان می‌دهد که تحقیقات در این حوزه به منظور شناخت مبانی برهم‌کنش تابش لیزری با فلزات و دستیابی به شرایط مناسب تابش برای کاربردهایی مانند ایجاد ساختارهایی در ابعاد نانو و میکرو، جوشکاری و سوراخکاری در حال انجام است و مورد توجه محققان قرار دارد [۱۵].

مشخصه‌های پالس لیزری مانند طول‌موج، پهنای عرضی و زمانی، انرژی و نرخ تکرار و همچنین خصوصیات نوری و مکانیکی ماده فلزی مانند ضریب بازتاب و جذب، ضخامت و ضریب هدایت گرمایی و علاوه بر این، جنس محیط پیرامون ماده در برهم‌کنش لیزر-فلز دارای اهمیت بسیاری هستند؛ بنابراین، برای رسیدن به نتیجه مطلوب باید این عوامل به‌دقت انتخاب شوند. واضح است که انتخاب اتفاقی و تصادفی پارامترهای مختلف برای انجام آزمایش‌های تجربی از نظر اقتصادی مقرون‌به‌صرفه نیست و باید مقادیر یا حداقل محدوده مقادیر مناسب برای انجام آزمایش قبل از شروع آزمایش به‌دقت انتخاب شوند؛ بنابراین، بررسی هر یک از این عوامل مؤثر در فرآیند دارای اهمیت است.

در این مقاله، تأثیر مشخصه‌های باریکه لیزر مانند توزیع شدت باریکه لیزر، پهنای عرضی و زمانی پالس نانوآئینه و انرژی هر پالس در برهم‌کنش تک پالس هارمونیک دوم لیزر Nd:YAG با

<sup>3</sup> Heat-affected zone (HAZ)

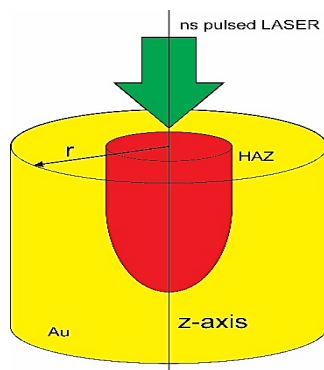
<sup>4</sup> Generalized Finite Difference Time Domain (G-FDTD)

<sup>1</sup> Fluence

<sup>2</sup> Morphology

در این رابطه  $\Lambda(t)$  ضخامت نوری پلوم<sup>۲</sup> کندگی (ذرات داغ کننده شده) است که حفاظ پلاسمایی را ایجاد می‌کند. همچنین،  $R$  ضریب بازتاب فلز،  $\tau$  پهنای زمانی پالس لیزر،  $w_0$  شعاع باریکه و  $\alpha_b$  ضریب جذب نوری ماده‌ی تحت تابش می‌باشند.

معادله (۱) در واقع یک معادله دیفرانسیل جزئی مرتبه دوم است که جواب تحلیلی آن را می‌توان در شرایط خاص و ساده پیدا کرد، اما عموماً حل تحلیلی آن غیرممکن است و باید از روش‌های حل عددی برای حل این معادله استفاده کرد. روش‌های حل عددی مانند روش اجزاء محدود (FEM)<sup>۳</sup>، روش تفاضل محدود (FDM)<sup>۴</sup>، روش عناصر مرزی (BEM)<sup>۵</sup> و روش تفاضل محدود حوزه زمان (FDTD)<sup>۶</sup> برای حل عددی این معادله پیشنهاد شده‌اند [۱۰، ۲۰، ۲۱]. روش G-FDTD روشی به روز و مناسب برای شبیه‌سازی در طول موج‌های مختلف طیف امواج الکترومغناطیسی است. در ضمن، زمان اجرای برنامه با اصلاح روش عددی در مقایسه با روش‌های متداول FDTD بیش از ده برابر کمتر شده است. برای این منظور، معادله (۱) با استفاده از روش G-FDTD و شرایط مرزی مناسب به یک معادله تفاضلی در بعد مکان و پیشرونده در بعد زمان تبدیل شد. در این شبیه‌سازی گام‌های زمانی برابر با ۱۰ فمتوثانیه و شبکه‌بندی مکانی به صورت متغیر انجام شد. نمایی از تابش پالس لیزر به فلز طلا در شکل (۱) نمایش داده شده است.



شکل (۱). طرح‌واره‌ای از تابش لیزر پالسی نانو ثانیه به فلز طلا. ناحیه تحت تاثیر گرما نیز به صورت نمادین در شکل نشان داده شده است. همچنین، طول موج ۵۳۲ نانومتر به دلیل جذب مناسب طلا در این طول موج در بررسی‌ها مورد استفاده قرار گرفت. در جدول (۱) کمیت‌های نوری و گرمایی بکار رفته در شبیه‌سازی‌ها در این طول موج و برحسب زمان آورده شده است، لازم به ذکر است که مقادیر کمیت‌ها در SI بیان شده‌اند [۹].

جدول ۱. مشخصات نوری و گرمایی طلا در شبیه‌سازی برهم‌کنش تابش پالس لیزری-فلز طلا [۹].

برمشتراک معکوس<sup>۱</sup> (IB) است [۱۶]. این پدیده را می‌توان به این صورت توصیف کرد که در ابتدا جذب فوتون توسط الکترون آزاد فلز صورت می‌گیرد و سپس انرژی از طریق برخورد الکترون-های پر انرژی به فونون‌های شبکه‌ی فلزی منتقل می‌شود. از آنجایی که زمان انتقال انرژی از الکترون به فونون‌های شبکه‌ی فلزی از مرتبه‌ی چند پیکو ثانیه است، بنابراین، در لیزرهای نانو ثانیه برخلاف لیزرهای فمتوثانیه زمان کافی برای انتقال انرژی وجود دارد و ماهیت فرآیند برهم‌کنش لیزر-فلز بر اثرات گرمایی یا به عبارتی پدیده فوتوگرمایی بنا می‌شود. به همین دلیل، معادلات انتقال گرما برای توصیف این برهم‌کنش در مقالات متعدد به کار گرفته شده است [۹، ۱۷، ۱۸] که می‌تواند آستانه ذوب یا تبخیر را در اختیار محقق قرار دهد.

هنگامی که ابعاد فلز در بررسی برهم‌کنش لیزر با فلز بزرگ‌تر از ۲۰ نانومتر باشد، معادله کلاسیکی وابسته به زمان می‌تواند برای انتقال گرما در سه بعد استفاده شود [۱۹]، که برابر است با:

$$\rho(\vec{r}, T) c_p(\vec{r}, T) \frac{\partial T(\vec{r}, t)}{\partial t} - \nabla \cdot [\kappa(\vec{r}, T) \nabla T(\vec{r}, t)] + \rho(\vec{r}, T) c_p(\vec{r}, T) v_s \nabla T(\vec{r}, t) = Q(\vec{r}, t) - L_i \quad (1)$$

در این جا  $\rho$  چگالی جرمی،  $r$  بردار مکان و  $c_p$  گرمای ویژه در فشار ثابت،  $\kappa$  هدایت گرمایی و  $v_s$  سرعت هدف نسبت به چشمه گرمایی است. سمت چپ معادله (۱) تغییرات دمایی ناشی از هدایت گرمایی را توصیف می‌کند و جمله همرفتی برای توصیف جابجایی ماده در دستگاه مرجع به معادله اضافه شده است. سمت راست نیز نرخ تولید گرمای حجمی،  $Q(\vec{r}, t)$  را نشان می‌دهد که مربوط به چشمه‌های گرمایی است. همچنین،  $i = m, v$  می‌باشد که  $L_m$  و  $L_v$  به ترتیب به گرمای نهان ذوب و تبخیر اشاره دارد و باید در زمان رسیدن به دمای ذوب و تبخیر فلز در معادله (۱) لحاظ شوند. هنگامی که دما روی سطح یا در عمق معینی از هدف از نقطه‌ی ذوب عبور می‌کند، هدف شروع به ذوب شدن می‌کند. ذوب‌شدگی معمولاً از سطح آغاز می‌شود و سپس جبهه‌ی مذاب با بالاتر رفتن دما به درون هدف نفوذ می‌کند. وقتی دمای سطح هدف به نقطه‌ی تبخیر می‌رسد، کندگی صورت می‌گیرد. بنابراین، وارد کردن این جملات در معادله الزامی است.

جمله‌ی چشمه گرمایی،  $Q(\vec{r}, t)$ ، در برهم‌کنش پالس لیزر نانو ثانیه با فلز به صورت زیر بیان می‌شود:

$$Q(x, y, z, t) = I_0 e^{-\Lambda(t)} (1 - R) \exp(-2r^2 / w_0^2) \times \alpha_b \exp(-\alpha_b z) \exp(-4 \ln 2 ((t - t_0) / \tau)^2) \quad (2)$$

<sup>۱</sup> Inverse Bremsstrahlung (IB)

<sup>۲</sup> Plume

<sup>۳</sup> Finite element method (FEM)

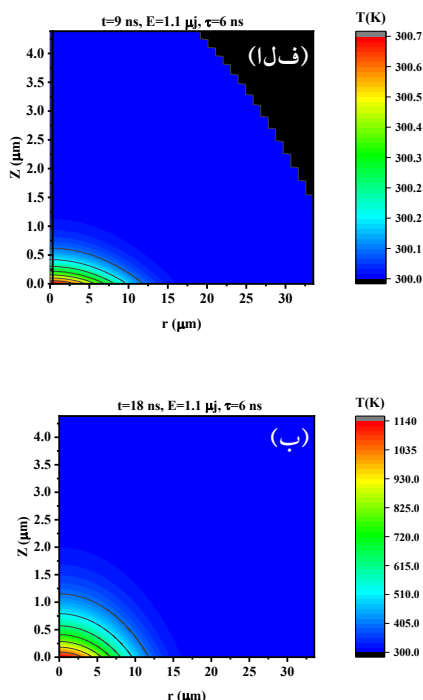
<sup>۴</sup> Finite difference method (FDM)

<sup>۵</sup> Boundary element method (BEM)

<sup>۶</sup> Finite difference time domain (FDTD)

باشد. نمودار توزیع دما در راستای انتشار نور لیزر،  $Z$ ، و نیز عمود بر راستای انتشار،  $r$ ، در زمان‌های مختلف (۹، ۱۸، ۲۷ و ۳۶ نانوآئینه) در شکل (۲) رسم شده است. برای وضوح بیشتر، خطوط هم دما نیز در این شکل نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، بیشترین دمای فلز در هر زمان در سطح فلز و در شعاع صفر مشاهده می‌شود و مقدار دما در هر  $Z$  خاص با فاصله از محور  $Z$  کاهش می‌یابد که این امر ناشی از جذب طولی انرژی پالس در راستای انتشار یا به عبارتی محور  $Z$  است که باعث کاهش شدت باریکه‌ی لیزری می‌شود.

از آنجایی که می‌توان مرز ناحیه HAZ طلا را حدود ۶۰۰ کلوین در نظر گرفت [۲۲، ۲۳]، نکته حائز اهمیت است که در نتایج مربوط به ناحیه HAZ به چشم می‌خورد این است که اگر وسعت ناحیه با دما فوق بررسی شود، وسعت این ناحیه در ابتدا روند افزایشی و سپس روند کاهشی نشان می‌دهد. این پدیده را می‌توان به این شکل توجیه کرد که با توجه به این که عمق نفوذ نور با طول موج ۵۳۲ نانومتر در طلا در حدود ۱۷/۵ نانومتر است، بنابراین، حرارت فقط در این حجم کوچک ایجاد شده است و با گذشت زمان حرارت ایجاد شده در اثر رسانش به نواحی دیگر نفوذ کرده و باعث بزرگ شدن ناحیه HAZ شده است ولی پس از گذشت زمان که انرژی پالس کاهش یافته است، دوباره ناحیه HAZ کوچک شده است. به عنوان مثال، در زمان ۳۶ نانوآئینه که عملاً تابش تک پالس لیزر به اتمام رسیده و تنها سازوکار حاکم پدیده‌ی رسانش است، کاهش دما و ناحیه HAZ مشاهده می‌شود (شکل ۲-د).



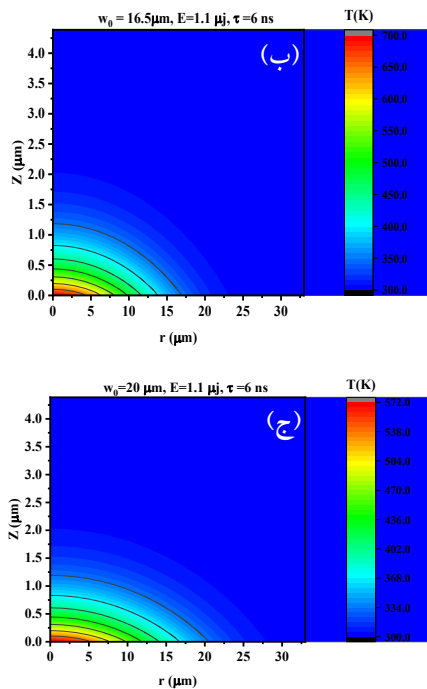
### ۳- نتایج و بحث

در این پژوهش از هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG با انرژی‌های ۰/۸، ۱/۱ و ۱/۴ میکروژول، پهنای زمانی پالس ۶، ۹ و ۱۲ نانوآئینه و اندازه لکه‌های لیزری مختلف (۱۱/۵، ۱۶/۵ و ۲۰ میکرومتر) برای شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است. ابعاد فلز طلا به شعاع  $r=3w_0$  و عمق  $z=250L_b$  در نظر گرفته شد که  $L_b$  عمق نفوذ در طلا می‌باشد که مقدار آن در طول موج ۵۳۲ نانومتر برابر ۱۷/۵ نانومتر است. این ابعاد به‌گونه‌ای انتخاب شده است که مناطق نزدیک به سطوح جانبی و سطح انتهایی تغییر دمای آن‌چنانی نداشته باشد و دمای این مناطق در دمای اولیه ۳۰۰ کلوین ثابت باقی بماند. زمان رسیدن پالس لیزر به بیشینه انرژی، در تمام شبیه‌سازی‌ها برابر با ۱۸ نانوآئینه انتخاب شد تا قلّه تمام پالس‌ها در یک‌زمان مشخص تشکیل شود و زمان رسیدن دما به بیشینه با این زمان مقایسه گردد. در این شبیه‌سازی معادله (۱) در بازه زمانی صفر تا ۳۶ نانوآئینه حل شد و توزیع دما به دست آمد. برای مدل‌سازی دقیق‌تر، مشخصه‌های فلز مانند ضریب هدایت گرمایی و ظرفیت گرمایی ویژه به‌صورت تابع دما در نظر گرفته شد. این تغییرات در جدول ۱ ارائه شده است.

به‌منظور اعتبارسنجی، نتایج حاصل از کد فرتن با روش G-FDTD با نتایج حاصل از حل تحلیلی در شرایط خاص (پیوست الف) مقایسه شد که نتایج موید صحت عملکرد کد می‌باشد. علاوه بر این، نتایج این کد با نتایج تحقیقات تجربی و شبیه‌سازی مرجع [۹] مقایسه شد. در این مقاله، شار انرژی لیزری مربوط به آستانه‌ی ذوب طلا تحت تابش هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG با پهنای پالس ۶ نانوآئینه به‌صورت تجربی و تئوری به ترتیب  $0.3 \text{ J/cm}^2$  و  $0.24 \text{ J/cm}^2$  گزارش شده است و مقدار شبیه‌سازی شار انرژی آستانه‌ی ذوب با کد مقاله فعلی برابر با  $0.268 \text{ J/cm}^2$  به دست آمد که بیانگر کاهش اختلاف بین مقادیر تجربی و شبیه‌سازی و قابل اعتبار بودن نتایج شبیه‌سازی است.

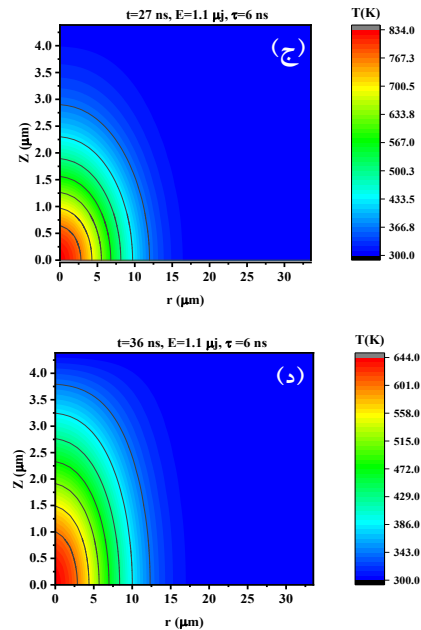
### ۳-۱. توزیع دما در زمان‌های مختلف

در این بخش تابع توزیع دما در زمان‌های مختلف بررسی می‌شود. برای این منظور مشخصات پالس لیزر Nd-YAG ثابت در نظر گرفته شده است و انرژی هر پالس ۱/۱ میکروژول، پهنای زمانی پالس ۶ نانوآئینه و شعاع لکه لیزری ۱۱/۵ میکرومتر می‌-



شکل (۳). توزیع دما در فلز طلا تحت تابش توسط هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG با انرژی پالس ۱/۱ میکرو ژول، پهنای زمانی پالس ۶ نانوثانیه و شعاع لکه لیزری الف) ۱۱/۵، (ب) ۱۶/۵ و (ج) ۲۰ میکرومتر در زمان ۱۸ نانوثانیه.

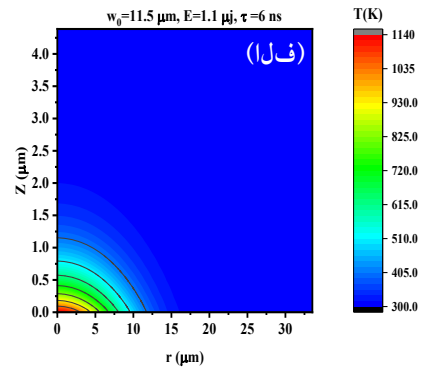
در شکل (۴) به منظور بررسی تحول زمانی دمای نقطه بیشینه و نیز تاثیر اندازه لکه بر آن، نمودار تحول زمانی دمای نقطه  $(r=0, Z=0)$  به ازای شعاعهای مختلف لکه لیزری ارائه شده است. بیشینهی دمای ناشی از تابش لیزر با اندازه لکه ۱۱/۵ میکرومتر برابر ۱۳۱۷ کلوین است، در حالی که بیشینهی دمای این نقطه با اندازه لکهی لیزری ۲۰ میکرومتر به ۶۲۶ کلوین افت پیدا کرده است که این امر ناشی از توزیع انرژی هر پالس در سطح گستردهتر و در نتیجه کاهش شدت تابش لیزری می‌باشد. همانطور که مشاهده می‌شود که مقدار بیشینه دما در تمام اندازه لکه‌های لیزری تقریباً ۲ نانوثانیه پس از قله پالس لیزری رخ داده است و سپس کاهش دما مشاهده می‌شود که این کاهش دما به دلیل تضعیف شدت پالس با زمان و پدیده رسانش حرارتی در فلز طلا است. علاوه براین، افزایش دمای بیشینه با زمان در شعاع باریکه لیزری ۱۱/۵ میکرومتری با آهنگ تندتری اتفاق افتاد که این امر ناشی از تمرکز بیشتر انرژی لیزر در یک ناحیه کوچک و افزایش سریع دما در نقطه مرکزی فلز طلا است. با توجه به نتایج بدست آمده، در صورتی که ذوب فلز طلا و افزایش دمای بیشتر مطلوب باشد و تابش لیزری با پهنای زمانی پالس ۶ نانوثانیه در دسترس کاربر قرار داشته باشد، باید شرایطی فراهم شود که شعاع باریکه لیزری کمتر از ۱۱/۵ میکرومتر باشد یا انرژی هر پالس بیشتر از ۱/۱ میکروژول اختیار شود. در صورتی که هیچ یک

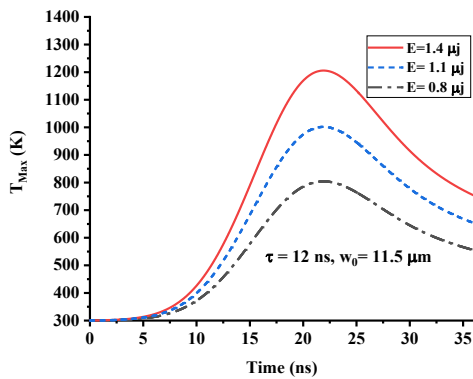


شکل (۲). توزیع دما در فلز طلا تحت تابش توسط هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG با انرژی پالس ۱/۱ میکروژول، پهنای زمانی پالس ۶ نانوثانیه و اندازه لکه لیزری الف) ۱۱/۵ میکرومتر در زمان های الف) ۹، (ب) ۱۸، (ج) ۲۷، (د) ۳۶ نانوثانیه.

### ۳-۲. تاثیر اندازه لکه لیزری

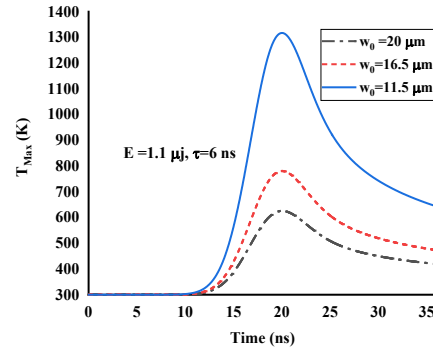
به منظور بررسی تأثیر اندازه لکه باریکه لیزری، هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG با انرژی پالس ۱/۱ میکروژول، پهنای زمانی پالس ۶ نانوثانیه و شعاعهای مختلف لکه (۱۱/۵، ۱۶/۵ و ۲۰ میکرومتر) مورد بررسی قرار گرفت و نتایج توزیع دما در زمان قله پالس‌های لیزری یعنی در زمان ۱۸ نانوثانیه و در انرژی ثابت پالس ثابت در شکل (۳) نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل (۳-الف) تا (۳-ج) مشاهده می‌شود، افزایش شعاع لکه لیزری باعث کاهش دمای بیشینه شده است. همچنین، دمای سایر نقاط و نیز شعاع و ارتفاع ناحیه HAZ به شعاع باریکه لیزری بستگی دارد.





شکل (۵). نمودار تحول زمانی دمای بیشینه طلا تحت تابش توسط هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG با پهنای زمانی پالس ۱۲ نانوثانیه، شعاع لکه ی ۱۱/۵ میکرومتر و انرژی‌های پالس مختلف.

از این موارد امکان پذیر نباشد، باید از تابش چندین پالس لیزری استفاده شود.

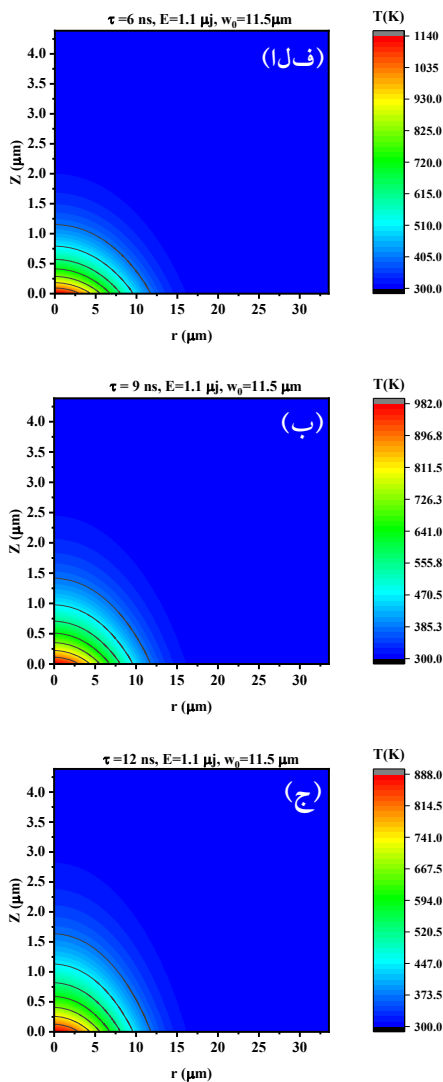


شکل (۴). نمودار تغییرات دمای طلا بر حسب زمان تحت تابش توسط هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG با پهنای زمانی پالس ۶ نانوثانیه، انرژی پالس ۱/۱ میکروژول و شعاع‌های لکه‌ی ۱۱/۵، ۱۶/۵ و ۲۰ میکرومتر.

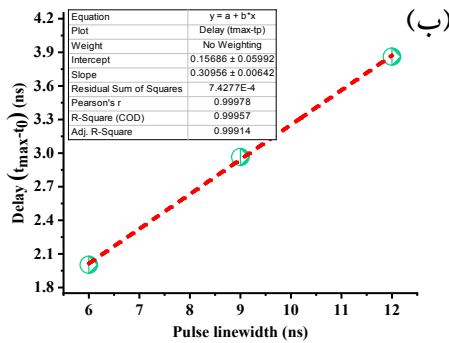
### ۳-۳. تاثیر انرژی پالس و پهنای زمانی پالس لیزر

در شکل (۵)، تحول دمای بیشینه طلا بر حسب زمان برای تابش هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG با پهنای زمانی پالس ۱۲ نانوثانیه، شعاع باریکه لیزری ۱۱/۵ میکرومتر و انرژی‌های ۰/۸، ۱/۱ و ۱/۴ میکروژول رسم شده است. همانطور که در شکل مشخص است، بیشینه‌ی دما با افزایش انرژی پالس لیزری از ۰/۸ به ۱/۴ میکروژول افزایش یافته و از ۸۰۴ کلوین به ۱۲۰۵ کلوین رسیده است.

در شکل (۶)، نمودار توزیع فضایی دما در فلز طلای تابش شده با لیزر Nd-YAG با طول موج ۵۳۲ نانومتر با انرژی پالس ۱/۱ میکروژول، شعاع لکه‌ی لیزری ۱۱/۵ میکرومتر و پهنای زمانی مختلف (۶، ۹ و ۱۲ نانوثانیه) در زمان رسیدن پالس به قله (۱۸ نانوثانیه) نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که دمای بیشینه با افزایش پهنای پالس، کاهش یافته و بیشینه‌ی دما با افزایش پهنای زمانی پالس از ۶ به ۱۲ نانوثانیه، از ۱۳۱۷ کلوین به ۱۰۰۱ کلوین رسیده است. این امر به علت ثابت بودن انرژی کل هر پالس لیزر و کاهش توان باریکه لیزری با افزایش پهنای زمانی پالس است. علاوه بر این، توزیع دمای فلز و نیز ناحیه HAZ به پهنای پالس لیزر بستگی دارد که دلیل آن توان متفاوت تابش و نیز نقش رسانندگی فلز طلا است.



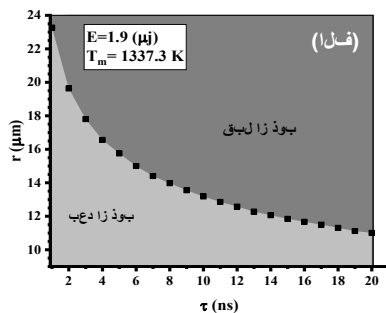
شکل (۶). نمودار توزیع فضایی دما در فلز طلا تحت تابش توسط هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG با انرژی پالس ۱/۱ میکروژول، اندازه لکه لیزری ۱۱/۵ میکرومتر و پهنای زمانی پالس لیزری الف (۶، ب) ۹ و ج) ۱۲ نانوثانیه در زمان رسیدن پالس لیزر به بیشینه توان (۱۸ نانوثانیه).



شکل (۷). الف. نمودار تحول زمانی دمای نقطه بیشینه طلا با انرژی پالس ۱/۱ میکروژول، اندازه لکه لیزری ۱۱/۵ میکرومتر و پهنای زمانی مختلف پالس لیزری و ب) نمودار تاخیر زمانی بیشینه دما نسبت به قله پالس بر حسب پهنای زمانی پالس.

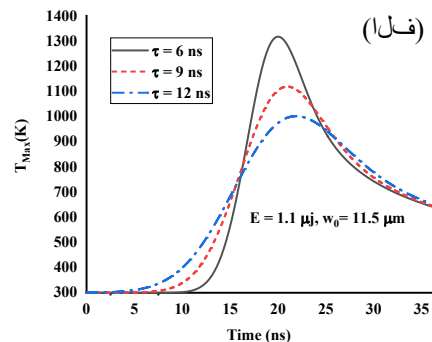
### ۴-۳. آستانه ی ذوب طلا بر حسب مشخصه های تابش

در شکل های (۸- الف) و (۸- ب) نمودار آستانه ذوب طلا در انرژی ۱/۹ میکروژول بر حسب اندازه لکه لیزری و نیز پهنای زمانی ۱ تا ۲۰ نانوثانیه ارائه شده است. همچنین، ناحیه مربوط به مشخصات تابش برای شرایط قبل و بعد از ذوب نیز بر روی شکل نشان داده شده است. شکل (۸- الف) نشان می دهد که دستیابی به ذوب با لیزرهای با پهنای زمانی بالاتر فقط با متمرکز کردن باریکه لیزری اتفاق می افتد و در صورتی که به عنوان مثال پهنای پالس ۲۰ نانوثانیه باشد، اندازه لکه لیزری باید تا ۱۱/۰۱ میکرومتر کاهش یابد تا به آستانه ذوب برسد. همچنین، نتایج شکل (۸- ب) نشان می دهد که شار انرژی مربوط به آستانه ذوب طلا برای پهنای پالس ۱، ۶، ۹ و ۱۲ نانوثانیه به ترتیب برابر  $0.111 \text{ J/cm}^2$  و  $0.268 \text{ J/cm}^2$  و  $0.33 \text{ J/cm}^2$  و  $0.382 \text{ J/cm}^2$  می باشد که بیانگر اهمیت بالای پهنای زمانی پالس بر فرآیندهای حاکم است. این نمودارها به کاربر این امکان را می دهد تا با توجه به پهنای پالس هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG که در دسترس دارند، بتوانند باریکه لیزری را متمرکز و به ذوب یا شرایط بالای ذوب دست پیدا کنند.



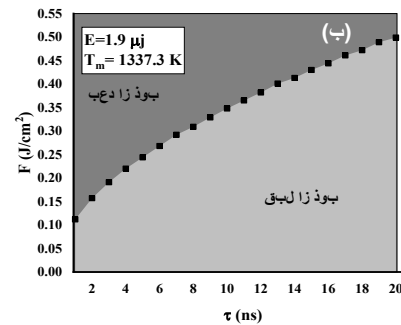
در شکل (۷- الف)، تحول زمانی دمای نقطه  $(r = 0, z = 0)$  به ازای پهنای زمانی مختلف پالس لیزر ارائه شده است. همانطور که در شکل مشخص است، افزایش و سپس کاهش دما در هر پهنای پالس لیزر مشاهده می شود، اما در هر حال، مقدار بیشینه دما و نیز زمان وقوع آن به پهنای زمانی پالس بستگی دارد. نتایج نشان می دهد که دمای بیشینه در تابش پالس های ۱۲ و ۶ نانوثانیه به ترتیب ۱۰۰۱ و ۱۳۱۷ کلوین می باشد که بیانگر رابطه معکوس بین بیشینه دما و پهنای پالس لیزری است که دلیل آن افزایش توان قله ی پالس لیزری با کاهش پهنای پالس لیزری است. همچنین، افزایش سریع دما در شرایط با پهنای زمانی کوچکتر (۶ نانوثانیه) نسبت به سایر موارد مشاهده می شود که این امر به دلیل دریافت انرژی تابشی بیشتر در زمان کوتاهتر است. از آنجایی که این جذب در زمانی بسیار کوتاه اتفاق افتاده است، بنابراین، نقش رسانش و انتقال گرما به سایر نقاط نسبت به پالس های پهن تر (۹ و ۱۲ نانوثانیه)، کمتر است و فلز طلا تا دمای بالاتری نسبت به سایر شرایط گرم شده است. کاهش دما نیز پس از اتمام پالس لیزر به دلیل تبادل حرارتی ناشی از اختلاف دمای نقاط مختلف از طریق رسانش طلا، رخ داد که این مطلب در نمودارها مشاهده می شود.

بعلاوه، زمان رسیدن دمای نقطه  $(r = 0, z = 0)$  به بیشینه دما نسبت به زمان قله پالس تاخیر دارد و برای پهنای زمانی مختلف پالس لیزر یکسان نیست. برای دریافت اطلاعات کمی، نمودار تاخیر زمانی بیشینه دما نسبت به قله پالس بر حسب پهنای زمانی پالس در شکل (۷- ب) ارائه شده است. نتایج نشان می دهد که رابطه خطی بین زمانی که دمای نقطه  $(r = 0, z = 0)$  طلا بیشینه مقدار را دارد با پهنای زمانی پالس لیزر وجود دارد که شیب این خط به نوع فلز بستگی دارد و برای طلا ۰/۱۵۷ می باشد.





- [3]. M. Aliannezhadi, M. H. Mozaffari, and F. Amirjan, "Optofluidic R6G microbubble DBR laser: A miniaturized device for highly sensitive lab-on-a-chip biosensing," *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, vol. 53, p. 101108.10.1016/j.photonics2023.101108.
- [4]. S. Song et al., "A critical review on the simulation of ultra-short pulse laser-metal interactions based on a two-temperature model (TTM)," *Optics & Laser Technology*, vol. 159, p. 109001.101016/j.optlastec.2022.109001, 2023.
- [5]. J. Khalilzadeh, A. Arab Khorasani, H. Zaki Dizaji, and Y. Shahamat, "Design of a Hybrid Enhanced Photocathode Based on Plasmonic Nano-Grating," *Scientific Journal of Applied Electromagnetics*, vol. 9, no. 2, pp. 27-33, 2021. (in Persian) DOR: <https://dor.isc.ac/dor/20.1001.1.26455153.1400.9.2.4.3>
- [6]. A. Riahi, M. Heydari-Dayeni, m. vahedi, J. Khalilzadeh, and y. shahamat, "Simulation and Fabrication of Tapered Fiber Optics Hydrogen Sensor," *Scientific Journal of Applied Electromagnetics*, vol. 6, no. 1, pp. 15-21, 2018. (in Persian) DOR: <https://dor.isc.ac/dor/20.1001.1.26455153.1397.6.1.3.9>
- [7]. [F. Damavandi Kamali, A. Ebrahimzadeh, and M. Yazdi, "Calculation of Attenuation in Rain Medium with Realistic Rain drops Shapes Modeling by the FDTD Method," *Scientific Journal of Applied Electromagnetics*, vol. 8, no. 1, pp. 1-7, 2020. (in Persian) DOR: <https://dori.net/dor/20.1001.1.26455153.1399.8.1.1.1>
- [8]. M. Aliannezhadi, F. Shahshahani, and V. Ahmadi, "Analysis of Raman QWS-DFB Fiber Laser Considering Nonlinear SPM and XPM Effects," *Scientific Journal of Applied Electromagnetics*, vol. 2, no. 4, p. 5, 2015. (in Persian) DOR: <https://dori.net/dor/20.1001.1.26455153.1393.2.4.6.0>
- [9]. V. Dimitriou, E. Kaselouris, Y. Orphanos, M. Bakarezos, N. Vainos, M. Tatarakis, and N. Papadogiannis, "Three dimensional transient behavior of thin films surface under pulsed laser excitation," *Applied Physics Letters*, vol. 103, no. 11, p. 114104, 10.1063/1.4821274, 2013.
- [10]. X. Li and Y. Guan, "Theoretical fundamentals of short pulse laser-metal interaction: A review," *Nanotechnology and Precision Engineering*, vol. 3, no. 3, pp. 105-125.10.1016/j.npe.2020.08.001, 2020.
- [11]. Y. Zhang, D. Zhang, J. Wu, Z. He, and X. Deng, "A thermal model for nanosecond pulsed laser ablation of aluminum," *AIP Advances*, vol. 7, no. 7.10.1063/1.4995972, 2017.
- [12]. N. A. Vasantgadkar, U. V. Bhandarkar, and S. S. Joshi, "A finite element model to predict the ablation depth in pulsed laser ablation," *Thin Solid Films*, vol. 519, no. 4, pp. 1421-1.10.1016/j.tsf.2010.09.016, 2010
- [13]. E. Matthias et al., "The influence of thermal diffusion on laser ablation of metal films," *Applied Physics A*, vol. 58, pp. 129-136.10.1007/BF00332169, 1994.



شکل (۸). الف، نمودار آستانه‌ی ذوب طلا تحت تابش توسط

هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG با انرژی ۱/۹ میکروژول بر حسب اندازه لکه لیزری و پهنای زمانی پالس و ب) شار انرژی لیزر متناظر با آستانه ذوب طلا بر حسب پهنای زمانی پالس.

#### ۴- نتیجه‌گیری

امروزه اطلاعات مربوط به برهم‌کنش لیزرهای پالسی با مواد مختلف از جمله فلزات و غیر فلزات به دلیل کاربرد گسترده این پدیده مورد توجه خاص قرار دارد. پردازش لیزری فلزات و لایه‌های نازک به صورت آزمایشگاهی و صنعتی با پشتوانه کارهای نظری امکان‌پذیر شده است و این شبیه‌سازی‌ها احتمال شکست را کاهش داده و باعث صرفه‌جویی در هزینه‌ها می‌شوند. در این مقاله برهم‌کنش لیزرهای نانوثانیه با فلز طلا مورد بررسی قرار گرفت و تأثیر پارامترهای مختلف تابش لیزری بر دمای فلز گزارش شد و در نهایت نمودار وابستگی آستانه ذوب طلا به مشخصه‌های تابش ارائه شد. نتایج بررسی‌ها نشان داد که افزایش انرژی پالس لیزر باعث افزایش دمای بیشینه و نیز تغییر در توزیع دما در فلز و ناحیه HAZ می‌شود و در صورتی که دمای بالاتر در ناحیه خاص مطلوب باشد، می‌توان شرایطی فراهم کرد که اندازه لکه لیزری کاهش یابد. کاهش پهنای زمانی پالس لیزر نیز باعث افزایش سریع دما در ناحیه تابش و تغییر ناحیه تحت‌تأثیر دما (HAZ) شد. همچنین، نمودار آستانه ذوب بر حسب اندازه لکه و پهنای زمانی مربوط به تابش هارمونیک دوم لیزر Nd-YAG می‌تواند شرایط مناسب برای تابش فلز طلا را با توجه به لیزر موجود در آزمایشگاه و پدیده مورد نظر در اختیار کاربر قرار دهد.

#### ۵- مراجع

- [1]. P. Malik, J. N. Acharyya, M. Shanu, A. Kuriakose, S. Ghosh, P. Srivastava, and G. V. Prakash, "Studies on Femtosecond Laser Textured Broadband Anti-reflective Hierarchical a-SiNx: H Thin Films for Photovoltaic Applications," *ACS Applied Energy Materials*. 10.1021/acsaem.2c03984, 2023.
- [2]. J. Bonse and J. Krüger, "Structuring of thin films by ultrashort laser pulses," *Applied Physics A*, vol. 129, no. 1, p. 14. 10.1007/s00339-022-06229-x, 2023.

- [14]. F. Ruffino and M. G. Grimaldi, "Nanostructuring of thin metal films by pulsed laser irradiations: a review," *Nanomaterials*, vol. 9, no. 8, p. 1133.10.3390/nano908
- [15]. E. G. Gamaly, *Femtosecond laser-matter interaction: theory, experiments and applications*. CRC Press, 2011.
- [16]. M. Stafe, A. Marcu, and N. N. Puscas, *Pulsed laser ablation of solids: basics, theory and applications*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [17]. A. V. Gusarov and I. Smurov, "Thermal model of nanosecond pulsed laser ablation: Analysis of energy and mass transfer," *Journal of applied physics*, vol. 97, no. 110.1063/1.1827321, 2005.
- [18]. I. Naqvi and B. Yilbas, "Laser nanosecond pulse heating of surfaces and thermal stresses," *Numerical Heat Transfer, Part A Applications*, vol. 40, no. 3, pp. 295-316.10.1080/10407782.2001.10120638, 2001.
- [19]. D. Bäuerle, *Laser processing and chemistry*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [20]. M. Sovizi and M. K. Omrani, "Simulation and analysis of ultra-small optical microdisk resonators with random edge roughness: modification of the matrix model," *Physica Scripta*, vol. 93, no. 11, p. 115501.10.1088/1402-4896/aad740, 2018.
- [21]. M. Sovizi and R. Massudi, "Thermal distribution calculation in diode pumped Nd:YAG laser rod by boundary element method," *Optics & Laser Technology*, vol. 39, no. 1, pp. 46-52.10.1016/j.optlastec.2005.05.010, 2007.
- [22]. K. A. Elsayed et al., "Thermal, dielectric and optical studies on cellulose acetate butyrate-gold nanocomposite films prepared by laser ablation," *Journal of Materials Research and Technology*, vol. 23, pp. 419-437.10.1016/j.jmrt.2023.01.012, 2023.
- [23]. M. Shah, K. Zeng, and A. A. Tay, "Mechanical characterization of the heat affected zone of gold wirebonds using nanoindentation," *J. Electron. Packag.*, vol. 126, no. 1, pp. 87-93.10.1115/1.1648062, 2004.