КОМП’ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ВНЕСЕННЯ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК В МАТЕРІАЛ ПІД ДІЄЮ ЛАЗЕРНИХ УДАРНИХ ХВИЛЬ.

Маньовська О.А.

Тернопільський національний університет імені Івана Пулюя,
e-mail: manjovska@gmail.com

Особливістю обробки матеріалів наносекундним лазерним імпульсом є виникнення в матеріалі ударної хвилі. Розвиток лазерної ударно-хвильової технології як методу обробки матеріалів викликає необхідність вивчення процесів, що відбуваються в матеріалах, коли опромінення, з метою підсилення тиску ударної хвилі, здійснюється в прозорому конденсованому середовищі (ПКС).

Ударну хвилю, що виникає в матеріалі при дії на нього потужного лазерного випромінення, називають лазерною ударною хвилею, під якою розуміють різке стрибкоподібне збільшення тиску в опромінюваному матеріалі, який поширюється в ньому з надзвуковою швидкістю та стійкий по відношенню до малих збурень свого профілю.

Експерименти по внесенню вуглецевих нанотрубок в матеріал під дією лазерних ударних хвиль проводились нами разом з Інститутом металофізики ім. Г.В.Курдюмова НАН України показали підвищення термоелектронної емісії нанотрубок.

Дана робота присвячена комп’ютерному моделюванню процесу внесення вуглецевих нанотрубок в матеріал під дією лазерних ударних хвиль, а саме розрахунків температурних полів в матеріалах, які зазнали опромінення потужними лазерними імпульсами.

Процес внесення вуглецевих нанотрубок в матеріал має деякі особливості. Окрім наявності на поверхні матеріалу шару нанотрубок, для підвищення тиску, опромінення проводиться в прозорому конденсованому середовищі. При аналізі процесів враховується, по-перше, насипний характер нанотрубок і можливість проникнення, внаслідок цього, лазерного випромінення безпосередньо на поверхню підкладки. По-друге, вуглецеві нанотрубки неоднорідно розподіленні по товщині зразка, тому окремі шари нанотрубок зміщені один відносно іншого і мають, таким чином, неоднакову кількість нанотрубок.

Розрахунки температури, тиску та напруження в матеріалах при дії лазерного імпульсу, коли опромінення відбувається на повітрі, проведені в ряді робіт [1-3], тому в даній роботі представлено розрахунки температури в матеріалі при опроміненні його наносекундним лазерним імпульсом в ПКС.

Комп’ютерне моделювання процесу внесення вуглецевих нанотрубок в матеріал під дією лазерних ударних хвиль складається з декількох етапів та проводиться за допомогою різних методів. На першому етапі проводиться розрахунок температурного поля в матеріалі під дією лазерного імпульсу в

режимі генерації ударної хвилі. Другий етап — моделювання процесу дії ПКС на внесення вуглецевих нанотрубок в матеріал.

При попаданні лазерного імпульсу на поверхню зразка-„сендвіча”, який складається з підкладки, на яку нанесений шар нанотрубок, які розчинені у толуолі, та покритій шаром ПКС, приповерхневий шар перетворюється у плазму, а в глибину зразка поширюється теплова і ударна хвилі.

При моделюванні розподілу температури в матеріалі під дією лазерного імпульсу в режимі генерації ударної хвилі, коли опромінення відбувається в ПКС були прийняті наступні умови:

1. $r_0 = \sqrt{a\tau}$ (r_0 - розмір плями на поверхні зразка, a - температуропровідність зразка, τ - тривалість імпульсу), задача теплопровідності зводиться до одномірної,
2. шар, в якому відбувається процес поглинання $\delta = 1/\mu$, де μ — коефіцієнт поглинання.

Під час дії лазерного імпульсу, шар товщиною $\delta = 1/\mu$ поглинає енергію, випаровується, перетворюється у плазму і передає свою енергію наступним шарам.

Проведені нами розрахунки показали, що незважаючи на зростання коефіцієнту поглинання у звичайних умовах з підвищенням температури за час дії імпульсу, в нашому випадку, внаслідок високих густин потоку лазерної енергії (до 10^9 Вт/см^2), поверхневий шар досягає стану плазми за короткий час (< 5нс) практично для всіх досліджуваних металів та сплавів. Тому коефіцієнт поглинання приймався постійним. Для режиму з модульованою добротністю, що відповідає короткому часу дії лазерного імпульсу, в початковий момент дії часову структуру імпульсу описують лінійною залежністю від часу для $t > 10^{-9}$ с (рис. 1).

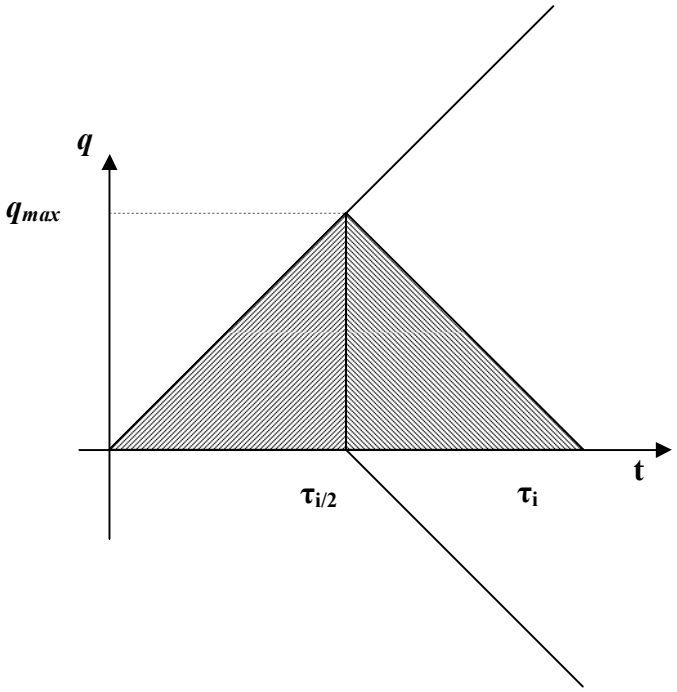

Рис.1. Часова – енергетична структура лазерного імпульсу в режимі модульованої добротності.

Комп’ютерне моделювання проводиться на основі розв’язків диференціального рівняння II – го роду

$$T(z,t) = \frac{q\sqrt{a}}{\lambda\tau_i}(4t)^{3/2} i^3 erfc\frac{z}{2\sqrt{at}} \qquad (1)$$

де T – температура зразка на глибині z в момент часу t,

λ – коефіцієнт теплопровідності,

q – густина енергії,

a – коефіцієнт температуропровідності,

z – глибина,

Ierfc(u) - інтеграл ймовірності.

При застосуванні графічного методу моделювання нами було встановлено, що на форму модельованого лазерного імпульсу і його відповідність реальному впливає момент включення фіктивного джерела. З фізичних міркувань випливає, що при лінійному спаданні енергії імпульсу дія джерела енергії не припиняється.

Використовуючи теорію фіктивних джерел, отримано аналітичний розв’язок:

$$T(z,t) = \frac{q\sqrt{a}}{\lambda\tau_i}\left[(4t)^{3/2} i^3 erfc\frac{z}{2\sqrt{a\tau}} - (4(t-\tau))^{3/2} i^3 erfc\frac{z}{2\sqrt{a(t-\tau)}}\right]. \qquad (2)$$

При опроміненні матеріалу в ПКС процес дещо ускладнюється, оскільки процес нагрівання матеріалу значно продовжується після закінчення лазерного імпульсу. Джерелом енергії стає плазма матеріалу, утворена лазерним імпульсом і затримана ПКС.

Тривалість такого імпульсу визначається за допомогою формули

$$\tau = \frac{2l}{c}, \qquad (3)$$

де l – товщина ПКС, c – швидкість звуку в даному ПКС.

Густина потоку, внаслідок перерозподілу енергії між зразком і ПКС, зменшується і дорівнює приблизно половині густини потоку лазерного імпульсу.

Після закінчення імпульсу на глибині z температура є більшою за температуру кипіння даного матеріалу. На цій глибині починається випромінювання, що призводить до порушення контакту. Розподіл температури в зразку обчислюється за формулою:

$$T = \frac{T_0 x^2}{(t+\frac{x^2}{2a})2a} e^{-\frac{z^2}{4a(t+\frac{x^2}{2a})}}. \qquad (4)$$

При моделюванні встановлено, що для початку плавлення поверхні алюмінію достатньо 5% енергії лазерного імпульсу, що був застосований в наших експериментах. Враховуючи особливості процесу внесення нанотрубок в матеріал, для обчислення енергії, яка потрапляє на підкладку, нами було

прийнято, що $E = kE_{пог}$, де k — коефіцієнт, який визначається співвідношенням максимуму густини насипаних вуглецевих нанотрубок до густини вуглецю

$$k = \frac{\rho_{вуг.нанотрубок}}{\rho_C}. \qquad (5)$$

Згідно цих міркувань k=0,25, а енергія, яка потрапляє на поверхню підкладки становить ≈25% від падаючої енергії на зразок–„сендвіч”.

При одночасному нагріванні нанотрубок і підкладки відбувається проплавлення підкладки та втиснення нижнього шару нанотрубок в підкладку. Оскільки процес нагрівання залежить від теплофізичних властивостей матеріалів, то за час нагрівання вуглецевих нанотрубок товщиною 2 мкм, наприклад, шар алюмінію товщиною 7 мкм прогріється до температури плавлення.

За допомогою моделювання встановлено, що при опроміненні покритої вуглецевими нанотрубками підкладки, кінцевий шар нанотрубок не прогрівається. Тому розігрівання поверхні підкладки при впровадженні нанотрубок відіграє первинну роль.

При опроміненні в ПКС процес значно відрізняється, оскільки частина нанотрубок вплавляються в підкладку. На основі комп’ютерного моделювання, електронно-мікроскопічного аналізу та картини розльоту нанотрубок можна дати наступне пояснення процесів, що відбуваються при внесені нанотрубок в алюміній та фторопласт. В перший момент дії лазерного імпульсу енергія випромінювання поглинається верхнім шаром нанотрубок. Розрахунки показують, що за 1 нс температура цього шару досягає температури плазми. При цьому, якщо вважати, що нанотрубки утворюють суцільний шар товщиною 20 мкм, то вплавлення нанотрубок в алюмінієвий та фторопластовий зразки неможливе, тому що навіть при ідеальному тепловому контакті температура на границі шару нанотрубок з підкладкою не перевищує 1 *K*, при умові, що процес нагрівання складається не тільки із нагрівання лазерним імпульсом, але й з післядії, пов’язаною з плазмою, що, як вже зазначалось, діє протягом часу в 20 разів більшого від тривалості імпульсу.

При опроміненні на повітрі алюмінієвого зразка за допомогою мікроскопії та хімічного аналізу виявлено внесення нанотрубок. Проте при таких же умовах опромінення фторопластового зразка внесення нанотрубок не спостерігається. Оскільки коефіцієнт поглинання фторопласту є порядку 1 $м^{-1}$, вся енергія лазерного імпульсу поглинається зразком. При опроміненні фторопластового зразка на повітрі поверхня зразка залишається незмінною. Коли опромінення відбувається в ПКС, на поверхні фторопластового зразка помітні внесені нанотрубки.

Для пояснення факту внесення вуглецевих нанотрубок в фторопластову підкладку при наявності ПКС необхідно враховувати твердість фторопласта, величина якої є дуже мала і дорівнює 4-5 $кгс/мм^2$.

Виходячи з цього, нанотрубки втискаються у фторопластову підкладку за рахунок меншої величини твердості матеріалу та збільшенні тиску плазми на нанотрубки при наявності ПКС.

Розроблена програма дозволила розв’язати і інші задачі. Так, за допомогою комп’ютерного моделювання температурного поля були проаналізовані експериментально отримані електричні сигнали, що виникають на контакті двох металів при дії лазерного імпульсу в режимі генерації ударної хвилі. Дослідження показали, що термоелектричний сигнал, який виникає при дії лазерних ударних хвиль на матеріал, залежить від параметрів ударної хвилі та фізичних властивостей матеріалу.

Розроблена модель розрахунку температурного поля матеріалу, опроміненого в прозорому конденсованому середовищі лазером, що генерує ударні хвилі може застосовуватись як одна із складових експрес-методики діагностування пошкоджень в матеріалах.

Висловлю подяку проф. Нікіфорову Ю.М., доц. Ковалюку Б.П. та доц. Гладьо В.Б. за допомогу та надання необхідних матеріалів.

[1] Кузяков Ю.Я., Трофимов И.А., Широков И.Я. Комп’ютерное моделирование абляции под воздействием наносекундного лазерного импульса на графитовую пластинку // ЖТФ.- 2005.- Т. 78, Вып.2.- С. 14-19.

[2] Yilbas B.S., Shuja S.Z., Arif A., Gondal M.A. Laser-shock procesing of steel // Journal of Materials Processing Technology.- 2003.- V. 135.- P. 6-17.

[3] Thorslund T. Kahlen F., Kar A. Temperatures, pressures and streeses during laser shock processing // Optic and Laser in Engineering.- 2003.- V. 39.- P. 51-71.