

Modélisation expérimentale par équations aux critères adimensionnels de l'interaction laser/matière

Jiri MARTAN^{1,2}, Nadjib SEMMAR^{1*}, Josef KUNES²

¹Groupe de Recherche sur l'Energétique des Milieux Ionisés, UMR-CNRS-6606, 14 rue d'Issoudun, BP 6744, 45067 Orléans Cedex 2, France.

²NTC-Department of physics, University of West Bohemia, Univerzitni 22, 306 14 Plzen, Czech Republic.

* (auteur correspondant : nadjib.semmar@univ-orleans.fr)

Résumé - Dans ce travail nous nous intéressons à la modélisation 'expérimentale' des processus thermiques induits par lasers pulsés, et notamment pour des temps d'interaction nanosecondes. Des résultats expérimentaux concernant les processus de chauffages, de fusion et de formation du plasma sont rassemblés ici sous forme de nombres adimensionnels afin de construire des modèles expérimentaux pour chacun des processus à partir du théorème-Pi. Essentiellement, quatre relations sont proposées pour déterminer l'incrément maximale de la température de surface, le seuil énergétique de fusion, la durée de la zone fondue, et enfin le seuil énergétique de formation du plasma induit par laser.

Nomenclature

Voir les tableaux (1) et (2) dans le paragraphe 2. Théorie et modèle de similitude

1. Introduction

La simulation des processus thermiques induits par des lasers nanosecondes, par des modèles analytiques devient inappropriée lorsqu'il s'agit de prendre en compte la thermodépendance des paramètres thermophysiques, ou encore lorsque se produisent des changements de phase tels que la fusion, l'ablation ou la formation d'un plasma de surface. Une expression analytique pour la température de surface dans le cas d'un milieu semi-infini irradié avec une source spatialement homogène est proposée dans [1]. De même un modèle analytique pour étudier la zone fondue dans les mêmes conditions précédentes a été développé dans [2], et avec prise en compte de pertes thermiques par des conditions aux limites 'convectives' dans [3]. Des modélisations numériques plus élaborées ont permis de travailler selon des hypothèses plus réalistes et proches des conditions expérimentales. L'étude numérique de l'ablation laser (pulsé) de surfaces métalliques est présentée dans [4]. La cinétique de fusion dans le cas de certains métaux et alliages métalliques largement développée dans la référence [5], et dans le cas de couches minces métalliques dans [6]. Dans tous les cas, ces études suggèrent de réaliser un travail de modélisation, et ensuite de simulation de cas d'interaction singuliers. Une généralisation de ces modèles d'interaction ne pouvant se faire qu'à travers un nombre important de résultats, et notamment expérimentaux. C'est précisément cette approche de modélisation expérimentale que nous développons par le concept de la similitude et des critères adimensionnels. L'objectif est de construire des modèles prédictifs facilement utilisables dans l'ingénierie laser.

Sur la figure 1, nous représentons un synoptique de l'interaction laser matière pour identifier les paramètres intervenants lors de l'irradiation d'une surface. En particuliers, nous précisons que lors de l'interaction nanosecondes, les processus thermiques élémentaires sont :

- Un chauffage rapide de la surface suivi par l'établissement d'un fort gradient thermique.
- Initiation d'une zone fondue et diffusion thermique en phase liquide.
- Formation d'une phase vapeur suivie de l'allumage d'une plume plasma induit par laser.

2. Théorie et modèle de similitude

Après le choix des paramètres physiques (propriétés thermophysiques, optiques,...) et technologiques (longueur d'onde du laser, durée d'interaction) nous avons construit dans un premier temps, un tableau résumant l'essentiel des dimensions des grandeurs physiques de l'interaction laser dans le cas de la fusion.

Symbole	Désignation	L (m)	M (kg)	T (s)	Θ (K)
a_S	Diffusivité thermique, état solide	2	0	-1	0
a_{SL}	Diffusivité thermique, état solide à T_f	2	0	-1	0
c_S	Chaleur spécifique, état solide	2	0	-2	-1
c_{SL}	Chaleur spécifique, état solide à T_f	2	0	-2	-1
L_f	Chaleur latente de fusion	2	0	-2	0
D	Dimension de l'échantillon	1	0	0	0
R_S	Réflectivité, état solide	0	0	0	0
t_p	Durée du pulse laser	0	0	1	0
t_f	Durée de la zone fondue	0	0	1	0
T_f	Température de fusion	0	0	0	1
T_{max}	Température de surface maximale	0	0	0	1
$T_{réf}$	Température de référence	0	0	0	1
λ_S	Conductivité thermique, état solide	1	1	-3	-1
λ_{SL}	Conductivité thermique, état solide à T_f	1	1	-3	-1
ϕ	Densité de puissance	0	1	-3	0

Tableau 1 : Matrice des dimensions pour l'interaction laser/matière

L'analyse par le théorème de similitude de Vaschy-Buckingham (ou théorème-Pi) permet d'identifier six nombres adimensionnels simples et 4 nombres adimensionnels complexes, sur les quinze grandeurs répertoriées. Ces nombres adimensionnels sont consignés dans le tableau 2. Le modèle générale qui est appliquée pour déterminer la température maximale en surface (Θ_{max}), la durée des zones fondues (\hat{t}), le seuil énergétique de fusion (Ki_{SF}) et enfin le seuil énergétique de formation d'un plasma (Ki_{SP}), est un modèle explicite sous un forme monômiale en loi puissance, c'est-à-dire :

$$\pi_1 = k_1 \cdot \pi_2^{k_2} \cdot \pi_3^{k_3} \dots \pi_N^{k_N} \quad (1)$$

où π_1, \dots, π_N , sont des nombres adimensionnels, et $k_1 \dots k_N$ des constantes qui seront déterminées par des mesures, par un raisonnement heuristique ou encore par une analyse physique de la relation [7].

<i>Symbole</i>	<i>Signification physique de la grandeur</i>
<i>Grandeurs adimensionnelles</i>	
R_S	Réfectivité, état solide
<i>Nombres adimensionnels simples</i>	
$A_{SL} = \frac{a_{SL}}{a_S}$	Variation de la diffusivité thermique en fonction de la température, état solide.
$C_{SL} = \frac{c_{SL}}{c_S}$	Variation de la chaleur spécifique en fonction de la température, état solide.
$\hat{t} = \frac{t_f}{t_p}$	Durée de fusion
$\Theta_f = \frac{T_f}{T_{réf}}$	Température de fusion
$\Theta_{\max} = \frac{T_{\max}}{T_{réf}}$	Température maximale de surface

$\Lambda_{SL} = \frac{\lambda_{SL}}{\lambda_S}$	Variation de la conductivité thermique en fonction de la température
<i>Nombres adimensionnels complexes</i>	
$Fo = \frac{a_S t_p}{D^2}$	Nombre de Fourier, durée de pulse
$Ki = \frac{\phi D}{\lambda_S T_{réf}}$	Nombre de Kirpitchenov, irradiation laser de la surface
$\Pi_1 = \frac{c_S D^2 T_{réf}}{a_S^2}$	Propriétés thermiques de l'état solide à la température de référence
$\Pi_2 = \frac{c_S T_{réf}}{L_f}$	Nombre de Stefan, rapport de la chaleur sensible à la chaleur latente de fusion

Tableau 2 : Nombres adimensionnels utilisés dans les modèles de l'interaction laser/surface

2.1. Modèle de la température maximale de surface

Un nombre important de mesure de la température de surface à l'échelle nanoseconde a été réalisé par radiométrie infrarouge sur diverses surfaces métalliques et de semi-conducteurs [8-10]. Un exemple de ces mesures est illustré sur la figure 2 dans le cas d'un laser Nd :YAG quadruplé à 266 nm de longueur d'onde et de 5 ns de durée de pulse, et sur la figure 3 dans le cas d'un laser KrF à 248 nm de longueur d'onde et de 25 ns de durée de pulse. Les températures maximales ainsi mesurées entre l'ambiance et jusqu'à 3000 K pour un large éventail de matériaux sont modélisées selon la relation (1). L'expression du modèle expérimental associé est donné par :

$$\Theta_{\max} = 1.74.Fo^{0.54} \cdot [(1 - R_S)Ki]^{0.996} \quad (2)$$

Des études statistiques [11] concernant la dispersion du modèle proposé par rapport aux résultats expérimentaux (voir figure 4) ont montré une bonne corrélation sur un nombre de mesure supérieur à 1000. Nous précisons que la courbe expérimentale correspond à une moyenne sur le nombre total de mesures effectuées (de 10 à plus de 1000 points de mesure). Pour ces mêmes conditions expérimentales, nous testons le modèle avec plusieurs matériaux différents. L'augmentation du maximum de température de surface a pour objectif de montrer uniquement la dispersion des résultats en fonction de l'augmentation de nombre d'expériences. Cette remarque reste valable pour la figure 5.

Pour tester ces modèles, nous avons réalisé deux comparaisons par rapport à des résultats de simulation numérique [12]. Un traitement de surface de fer (Fe) par laser KrF (248 nm) de 55 ns de durée de pulse et pour des fluence laser de 0.5 à 1.0 J/cm², donne une température de

surface maximale entre 800 et 1450 K. La relation (2) appliquée aux mêmes conditions de traitement donne une sous estimation de la température maximale dans l'intervalle 593 à 1186 K. Dans la référence [4] le traitement de surface de fer avec un laser KrF de 30 ns de durée de pulse donne un maximum de température de surface de 3650 K pour une fluence de 2.0 J/cm². La relation (2) donne dans pour ces dernières conditions une température de surface de 3134 K, soit de façon générale une sous estimation de 20 à 30%. En toute évidence, ces écarts sont attribués à la foi aux hypothèses de travail considérées dans les modèles numériques mais aussi à la difficulté d'estimer les valeurs exactes de la réflectivité de surface à la longueur d'onde 248 nm.

2.2. Modèle pour la durée maximale de la zone fondue

Nous avons, avec les mêmes concepts précédents, construit un modèle expérimental pour estimer la durée de la zone fondue suite à une interaction laser nanoseconde. Le résultat de cette modélisation donne :

$$\hat{t} = 8.56 \times 10^{-4} [(1 - R_S) K_I]^{2.28} \Pi_1^{-0.507} \Lambda_{SL}^{-0.722} C_{SL}^{-2.56} \quad (3)$$

Nous avons constaté que ce temps maximal de fusion était faiblement corrélé à la chaleur latente de fusion (Π_2) pour des durée d'interaction entre 20 et 40 ns. Nous précisons que la relation (3) a été établie à partir de 458 mesures de temps de fusion par laser KrF [11]. La dispersion des résultats du modèle par rapport aux mesures est représentée sur la figure 5. De façon identique à la figure 4, cette courbe ne donne pas une tendance 'physique' de la durée de fusion en fonction du nombre d'expérience, mais une tendance numérique entre la dispersion mesure (une seule courbe moyenne des mesures) par rapport au modèle expérimentale (autant de point de que nombre d'expériences).

2.3. Modèle pour le seuil énergétique de fusion et de formation du plasma

Nous avons appliqué le théorème de Vaschy-Buckingham au calcul des seuils énergétiques de fusion et de formation de plasma induit par lasers nanosecondes. Les expériences ont été réalisées par réflectométrie et pyrométrie résolues en temps [13]. L'ensemble des résultats peut être alors modélisé par les relations suivantes :

Dans le cas du seuil de fusion, c'est le nombre adimensionnel K_i^* explicité par la relation (4) qui indique la fluence laser nécessaire pour initier le processus de fusion.

$$(1 - R_S) K_{i_F}^* = 21.91 \Pi_1^{0.229} A_{SL}^{0.625} C_{SL}^{2.28} \Theta_f^{0.61} \quad (4)$$

Dans le cas du seuil de formation d'un plasma (relation (5)), celui-ci ne considère qu'un nombre réduit d'expériences, liées aux observations répétées sur les matériaux : Cu, Mo, Ni, Si et l'acier inox. 17246. Ce modèle a été testé et comparé à des données de simulation dans la référence [12] pour un laser KrF de 55 ns de durée de pulse. Dans ces conditions le seuil de vaporisation du fer a été calculé à 2.4 J/cm², alors que le modèle donne une surestimation de ce seuil à 7.5 J/cm².

$$(1 - R_S) K_{i_{Pl}}^* = 27.71 \Pi_1^{0.239} \quad (5)$$

Précisons que dans la relation (4) le nombre de Kirpichev est relatif à la température de fusion ($T_{réf} = T_f$), et que dans la relation (5) à la température de vaporisation ($T_{réf} = T_v$). Cette remarque est également valable pour le nombre Π_1 .

3. Conclusion

Nous avons proposé des modèles aux nombres adimensionnels qui permettent d'estimer correctement la température de surface, la durée de fusion, la fluence seuil de fusion dans le cas de traitement de surfaces essentiellement métalliques par des lasers pulsés, dans l'UV (à 248 et 266 nm) et pour des durée de pulse variant entre 5 et 50 ns. La comparaison de ces modèles construits à partir d'un nombre élevés de mesure (plus de 1000 mesures pour la température, et de 400 pour la durée de fusion) permet en effet d'estimer aisément la température de surface maximale et la durée de fusion avec une dispersion acceptable. En revanche, la relation (5) reste perfectible étant donné le nombre réduit d'expérience menée dans ce domaine. Notamment il convient d'augmenter du point de vue de la modélisation l'influence de paramètres physiques tels que les chaleurs latentes d'ébullition, la pression de vapeur, les phénomènes de photoionisation, précurseurs à l'allumage des plasmas. Ces considérations feront l'objet de nos travaux futurs.

Références

- [1] M. Von Almen, Laser-beam interactions with materials, Springer Verlag, Berlin, 1987.
- [2] V.N. Tokarev, A.F.H. Kaplan, *J. Appl. Phys.* 86 (1999), 2836-2846.
- [3] B.S. Yilbas, M. Kaylon, *Int. J. Heat Mass Transfer* 45 (2002), 1571-1582.
- [4] S. Fahler, H.-U. Krebs, *Appl. Surf. Sci.* 96-98 (1996), 61-65.
- [5] G. Nicolas, A. Yanez, A. Ramil, J.C. Alvarez, E. Saavedra, A. Garcia-Beltran, C. Molpeceres, M. Autric, J.L. Ocana, *Appl. Surf. Sci.* 138-139 (1999), 169-173.
- [6] N. Semmar, C. Georges, C. Leborgne, *Microelectron. J.*, 33 (2002), 705-710.
- [7] T. Szirtes, Applied Dimensional Analysis and Modeling, Mc Graw Hill, New York, 1998.
- [8] J. Martan, O. Cibulka, N. Semmar, *Appl. Surf. Sci.*, 253-3 (2006), 1170-1177.
- [9] J. Martan, N. Semmar, C. Boulmer-Leborgne, P. Plantin, E. Le Menn, *Nano & Micro. Thermo. Eng.*, 10-4 (2006), 333-344.
- [10] J. Martan, *PhD thesis*, Université d'Orléans/University of West Bohemia, Plzen, december 2005.
- [11] J. Martan, J. Kunes, N. Semmar, *Appl. Surf. Sci.*, à paraître (2007).
- [12] P. Shaaf, *Prog. Mater. Sci.*, 47 (2002), 1-161.
- [13] N. Semmar, J. Martan, O. Cibulka, C. Leborgne, Actes SFT N°14, pp 875-880, Ile-de-Ré (2006).

Figures

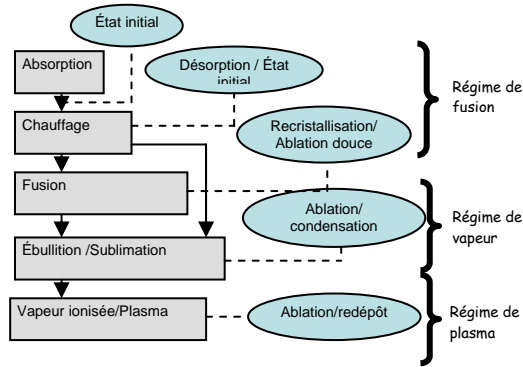


Figure 1 : Synoptique de l'interaction laser/matière

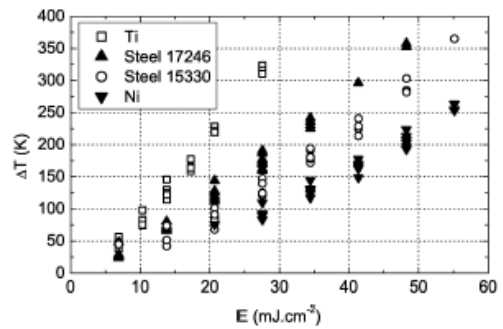


Figure 2 : Température maximale de surface en fonction de la fluence laser

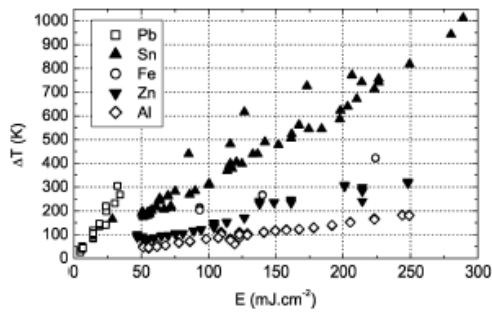


Figure 3 : Température maximale de surface en fonction de la fluence laser

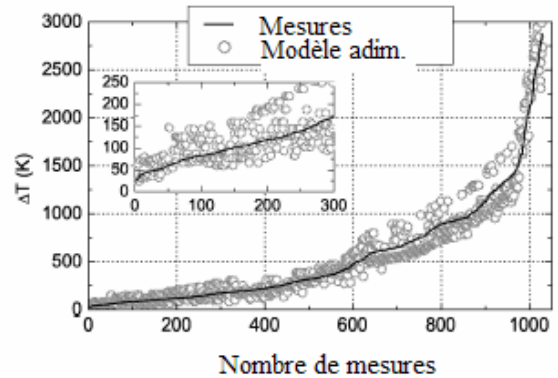


Figure 4 : Température maximale de surface fonction du nombre de mesures : Dispersion modèle adimensionnel/mesures.

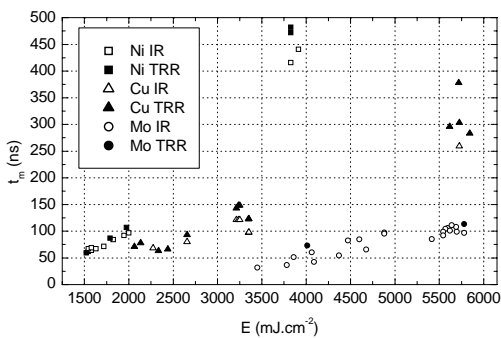


Figure 5 : Durée maximale de fusion fonction de la fluence laser, mesurée par méthode infrarouge (IR) et par thermoreflectance (TRR).

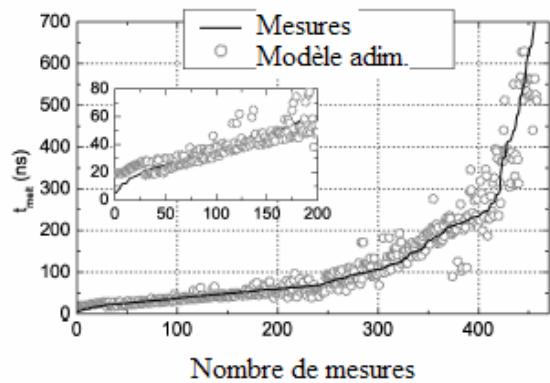


Figure 6 : Durée maximale de fusion fonction du nombre de mesures .Dispersion modèle adimensionnel /mesure.