

금속의 펨토초 어블레이션의 수치해석

오부국*(포항공대 대학원 기계공학과), 김동식(포항공과대학교 기계공학과)
김재구(한국기계연구원), 이제훈(한국기계연구원)

Numerical analysis of fs laser ablation of metals

B. K. Oh(POSTECH), D. S. Kim(POSTECH),
J. G. Kim(KIMM), J. H. Lee(KIMM)

ABSTRACT

Although there are many numerical models to simulate fs laser ablation of metals, no model can analyze the ablation phenomena over a wide range of fluence. In this work, a numerical code for simulating the fs laser ablation phenomena of metals has been developed. The two temperature model is employed to predict the ablation rate and the crater shape of metals using phase explosion mechanism in the relatively high fluence regime. Also, the ultrashort thermoelastic model is used for the low fluence regime to account for spallation of the sample by high strain rate. It has been demonstrated that the thermoelastic stress generated within the sample can exceed the yield stress of the material even near the threshold fluence. Numerical computation results are compared with the experiment for Cu and Ni and show good agreement. Discussions are made on the hydrodynamic model considering phase change and hydrodynamic flow.

Key Words : femtosecond laser ablation (펨토초 레이저 어블레이션), metal(금속), phase explosion (상폭발), numerical analysis (수치해석), thermoelasticity (열탄성), two temperature model (2 온도모델).

1. 서론

펨토레이저를 이용하면 펄스폭이 짧기 때문에 열확산 길이가 나노초 가공에 비해 매우 작게 되어 펨토초 펄스를 이용한 정밀가공분야의 응용이 확대되고 있다. 하지만 현재 상용화된 재료가공 공정에 많이 이용되는 나노초(ns) 펄스와 달리 서브피코초(sub-picosecond) 이하의 지속시간을 갖는 펨토초 펄스는 비평형 상태에 의한 다양한 물리적 현상을 동반하게 된다. 금속의 경우 플루언스에 따라 파쇄, 상폭발 등이 주요한 어블레이션 모델로 알려져 있다. 금속 펨토초 어블레이션을 수치모사 하기 위한 다양한 연구가 진행되어 왔으나 관심영역이 수십 μm 에 이르며 다양한 플루언스 범위에 대한 수치해석 코드는 아직 개발되지 않았다. 따라서 본 연구에서 상폭발 모델에 의한 금속의 2 차원 가공형상을 예측하고, 비교적 낮은 플루언스에서 주요한 파쇄현상을 예측하기 위해 극초단 열탄성 모델을 도입하여 시편 내부의 열응력분포를 알아본다. 또한 상변화, 유동의 효과를 고려한 보다 정확한 모델에 대한 방향을 제시한다.

2. 이론 모델 및 수치해석 기법

금속의 경우 펨토초 펄스가 조사되면 전자온도(T_e)와 격자온도(T_i)의 비평형 상태가 나타나 식(1)과

같은 2 온도 모델을 도입해야 한다(H_i : 격자엔탈피, C_e : 전자비열, k_e : 전자 전도도, k_i : 격자 전도도, S : 에너지생성항, G : 에너지결합상수, t : 시간).

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla \cdot (k_e \nabla T_e) - G(T_e - T_i) + S \quad (1)$$

$$\frac{\partial H_i}{\partial t} = \nabla \cdot (k_i \nabla T_i) + G(T_e - T_i)$$

전자와 격자의 열물성치는 참고문헌[1]의 값들을 사용하였다. 어블레이션 한계 플루언스 근처에서의 상폭발 모델은 실험결과를 잘 설명하지 못한다. 따라서 다른 어블레이션 기작으로서 파쇄가 제안되었다. 펨토초 펄스폭에 의하여 열확산 길이는 매우 감소하게 되면서 시편 표면에 온도구배는 급격히 증가하게 된다. 따라서 열탄성 효과에 의해서 시편 내부에 열응력이 발생하게 되며 재료의 항복강도를 충분히 넘어서 어블레이션이 일어나게 된다. Chen 은 기존의 2 온도모델에 열탄성 방정식을 결합하여 수치해석을 수행하였다.² 식(2)-(3)는 펨토초 펄스에 의해 시편 내부에 발생하는 극초단 열탄성 방정식을 보여준다(λ : lame 상수, μ : 전단계수, α : 선형 팽창계수, ρ : 밀도, u_z : z 방향 변위, A_z : Blast 계수, Γ : 인공점성, σ_{zz} : z-방향 수직응력, T_0 : 기준온도).

$$\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} - (3\lambda + 2\mu) \alpha \frac{\partial T_i}{\partial z} \quad (2)$$

$$+ 2\Lambda_{zz} \left(T_e \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) + \frac{\partial \Pi}{\partial z}$$

$$\sigma_{zz} = (\lambda + 2\mu) \epsilon_{zz} - (3\lambda + 2\mu) \alpha (T_i - T_0) \quad (3)$$

3. 결과 및 토의

상폭발 모델을 이용하여 Ni, Cu 의 어블레이션 을 예측한 결과를 Fig. 1 에 나타내었다. 이 결과는 식(1)로부터 얻어진다. 어블레이션 조건은 격자의 온도가 스피노달 온도(T_{sp})에 도달하면 모재로부터 제거된다고 본다. Fig. 1로부터 어블레이션 양은 고 플루언스 영역에서 비교적 잘 일치 하고 있음을 볼 수 있다. 하지만 낮은 플루언스 영역 즉 빔의 가장 자리에서 실험결과를 잘 설명하지 못하며 상폭발 모델에 의해서 어블레이션 문턱 값을 결정짓기 힘들다는 것을 알 수 있다.

낮은 플루언스 영역에서의 금속의 어블레이션을 설명하기 위하여 열탄성효과를 보기 위해 식(2)-(3)를 통해서 Ni 시편 내부의 응력 분포를 Fig. 2 에 나타내었다.

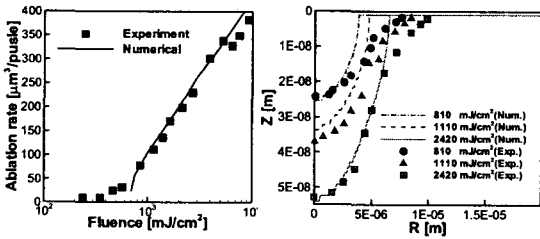


Fig. 1 (a) Ablation rate of Cu at different fluences (150fs, 780nm, 50 pulses) (b) crater shape of Ni (220fs, 800nm, 100 pulses)

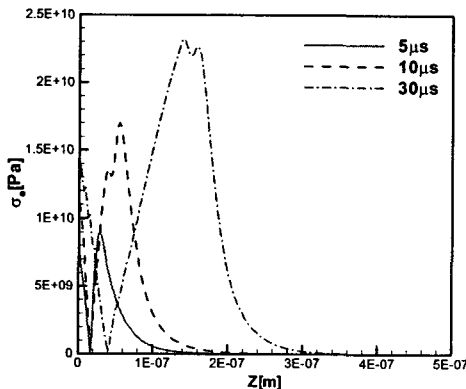


Fig. 2 Distribution of stresses induced by fs laser in Ni (220fs, 800nm, 250 mJ/cm²)

여기서 항복조건으로 von-Mises 응력(σ_e)를 사용 하였다. 경계조건으로 레이저 조사표면에서는 자유 응력상태, 깊이 끝 단에서는 고정단 조건을 주었다. Fig. 2로부터 5ps 에서 이미 Cu 의 항복강도(σ_y) 1 ~ 2GPa 을 능가하는 것을 볼 수 있다. 즉 한계플루언스 영역의 낮은 에너지를 조사할 경우에도 급격한 온도구배와 전자-격자의 비평형으로 인해서 시편 내부에 재료의 제거가 가능함을 알 수 있다. 하지만 5ps 에는 이미 100nm 깊이까지 용융된다. 용융이 시작되면 더 이상 응력에 대한 저항성을 잃게 되며 유동을 일으키게 된다. 또 σ_e 가 깊이 방향으로 진행되기 때문에 단지 σ_e 와 σ_y 의 크기만으로는 어블레이션을 결정짓기 힘들 것으로 예상된다. 지금 현재로서는 유동현상과 열탄성 효과가 결합되어 나타나기 때문에 어블레이션의 경계를 결정짓기가 힘들다. Chen 의 연구는 용융문제를 고려하지 않았지만 실제 용융에 의한 효과를 고려해야 하며 또 재료의 항복 조건을 설정하는 것 또한 중요한 문제이다.

4. 결론

본 논문에서는 기존 연구와 달리 금속의 펨토 초 어블레이션 현상을 전 플루언스 영역에 걸쳐 수치모사하기 위한 모델을 정립했다. 고 플루언스 영역에서 실험과 계산을 통해서 어블레이션율이 상폭발 모델에 의해서 잘 일치함을 볼 수 있었다. 그러나 낮은 플루언스 영역에서 상폭발 모델이 잘 일치하지 않기 때문에 극초단 열탄성 모델을 도입하였다. 극초단 열탄성 모델을 이용한 계산을 통해 재료 내부에 발생하는 열탄성 응력의 크기가 재료의 항복강도를 넘어서게 됨을 볼 수 있었다. 본 연구에 이용된 모델에서는 재료의 팽창, 용융물의 유동 등이 고려되지 않았으므로 이를 보완하기 위한 연구가 진행 중이다.

후 기

본 연구는 핵심연구 개발사업(첨단레이저-재료 반응 모사용 전산해석 기법 개발) 지원으로 수행되었다.

참고문헌

- Hohlfeld, J., Wellershoff, S. S., Gudde, J., Conrad, U., Jahnke, V. and E. Matthias, "Electron and Lattice Dynamics Following Optical Excitation of Metals," Chemical Physics, Vol. 251, pp. 237-258, 2000.
- Chen, J. K., Beraun, J. E. and Tzou, D. Y., "Thermomechanical Response of Metals Heated by Ultrashort-pulsed Lasers," Journal of Thermal Stresses, Vol. 25, pp. 539-558, 2002.