

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗМЕРА ПОР НА ПОРОГ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

И.А. Евдокимова¹, М.С. Григорьева^{1,2}, А.Ю. Харин¹, И.Н. Завестовская², В.Ю. Тимошенко^{1,2,3}

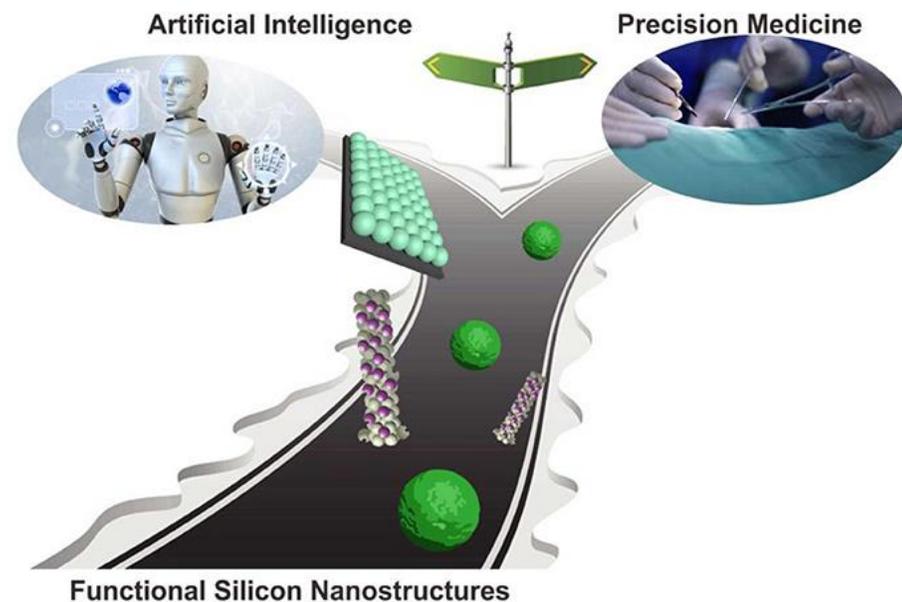
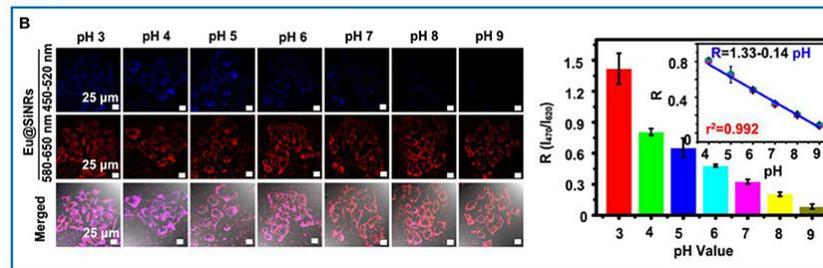
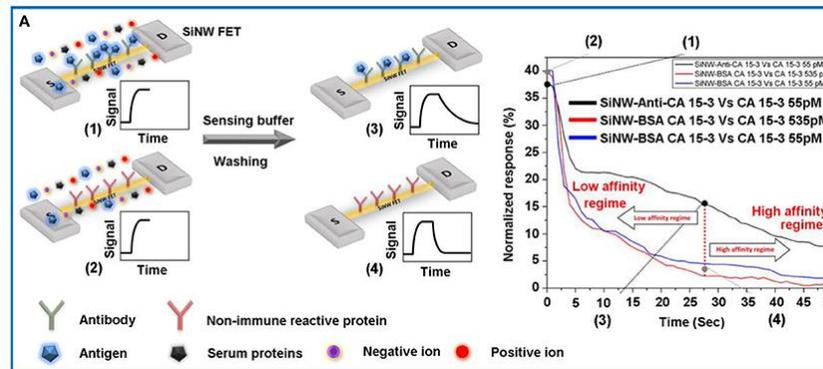
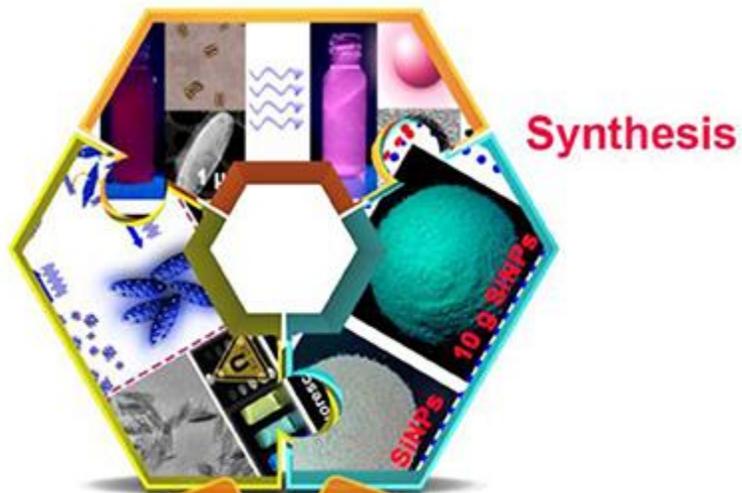
¹ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

² *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

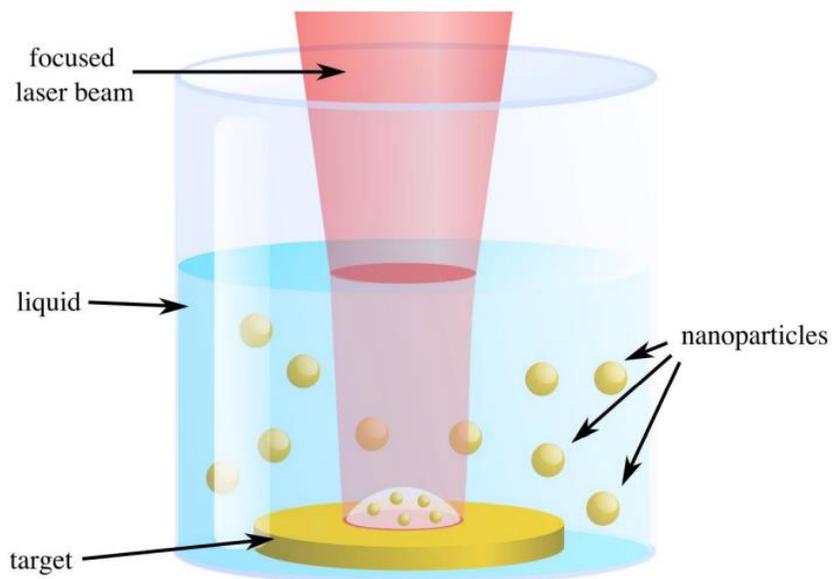
³ *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

Москва – 2021

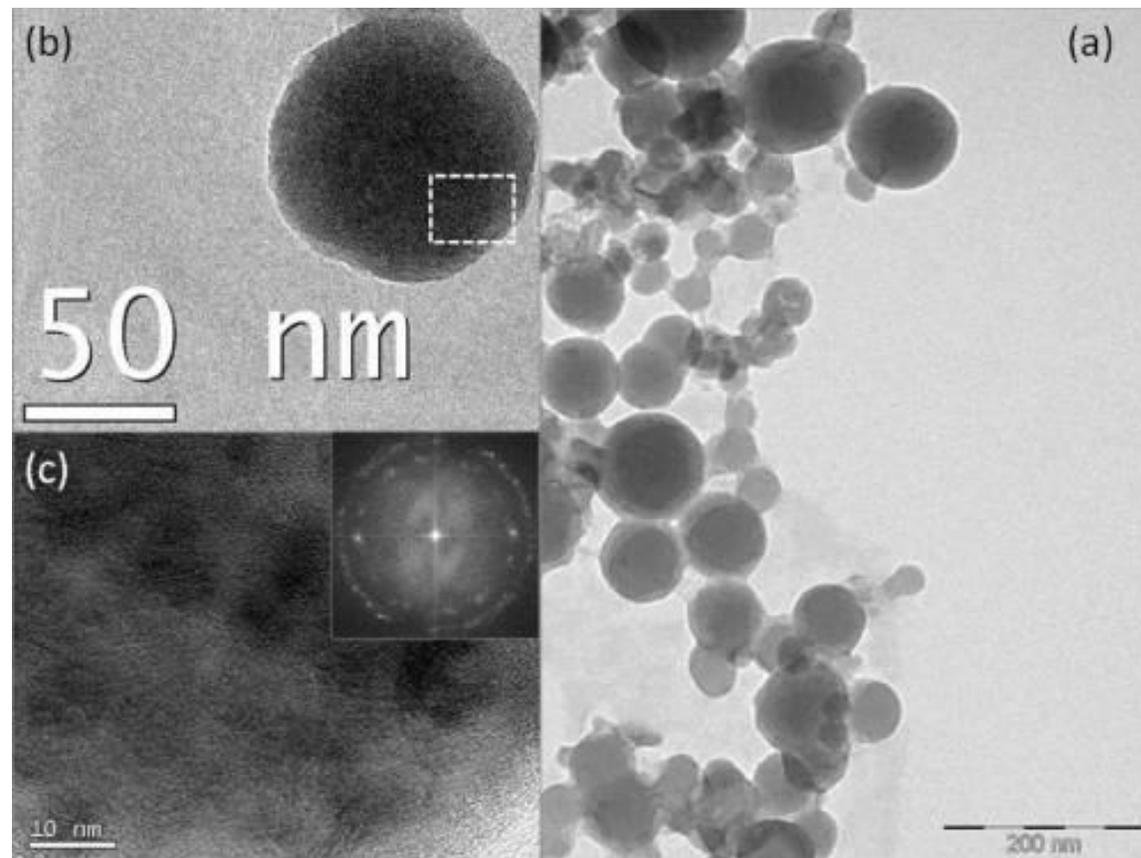
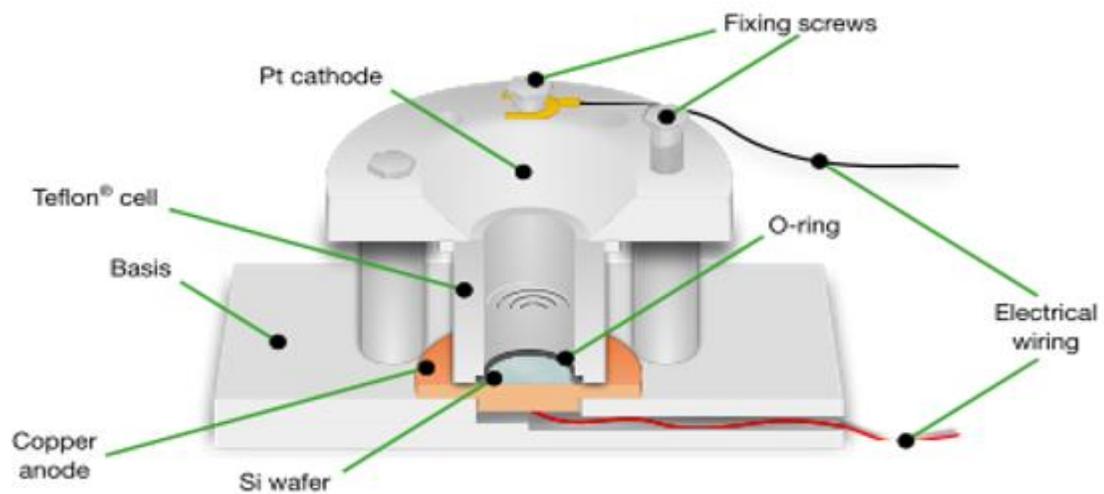
Применение кремниевых наночастиц в биомедицине



Синтез кремниевых наночастиц



Porous silicon



Описание моделирования

- Расположение атомов такое же, как в c-Si с постоянной решетки 5,43 Å;
- Длина волны 1064 нм;
- Длительность импульса 100 фс;
- Пористость 50 и 70%;
- Размер пор 1-5 нм;
- Плотность потока лазерного излучения от 0,005 до 0,1 Дж/см²;
- Температурный профиль соответствует двухфотонному поглощению, изменение интенсивности:

$$\frac{dI}{dx} = -aI - bI^2$$
$$I(x) = -\frac{a}{b} \exp\left(\frac{a}{b}C\right) / \left(\exp\left(\frac{a}{b}C\right) - \exp(ax)\right)$$

Из граничного условия:

$$C = \frac{a}{b} \ln \frac{I_0}{\left(I_0 + \frac{a}{b}\right)}$$

a - коэффициент поглощения, b - вырожденный коэффициент двухфотонного поглощения, I_0 – начальная интенсивность.

Пористость мишени

- Объемная пористость:

$$P = \frac{V_{\Pi}}{V_0}$$

V_{Π} - объем пор, V_0 - общий объем

- Плотность и линейный коэффициент поглощения

$$\rho = \rho_0(1 - P)$$

$$\alpha = \alpha_0(1 - P)$$

ρ_0 и α_0 - плотность и линейный коэффициент поглощения при $P = 0$, соответственно.

- Радиус поры рассчитывается с использованием логнормального распределения:

$$f(r) = \frac{1}{\sigma r \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(\ln(\frac{r}{r_0}))^2}{2\sigma^2} \right]$$

r_0 - средний размер пор.

Порог абляции

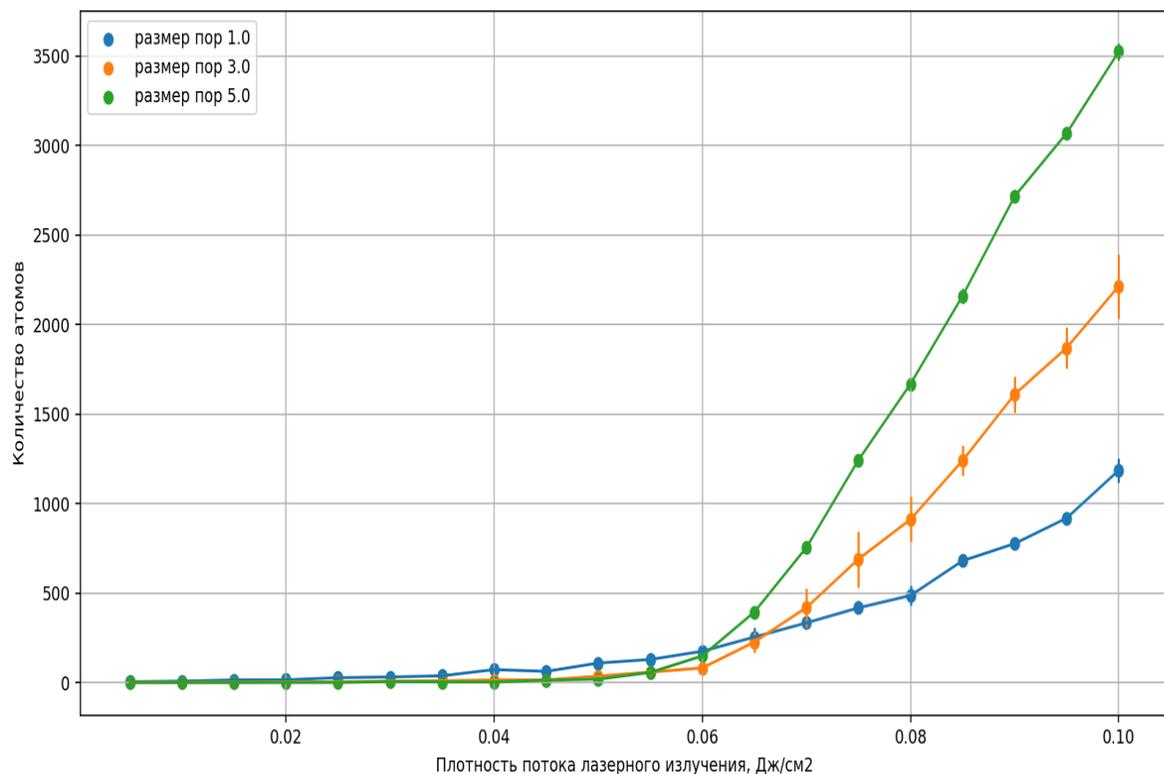


Рис. 1. Число аблированных атомов для различных значений плотности энергии лазерного импульса при лазерном облучении с $\lambda = 1064$ нм и различным размером пор при пористости 50%.

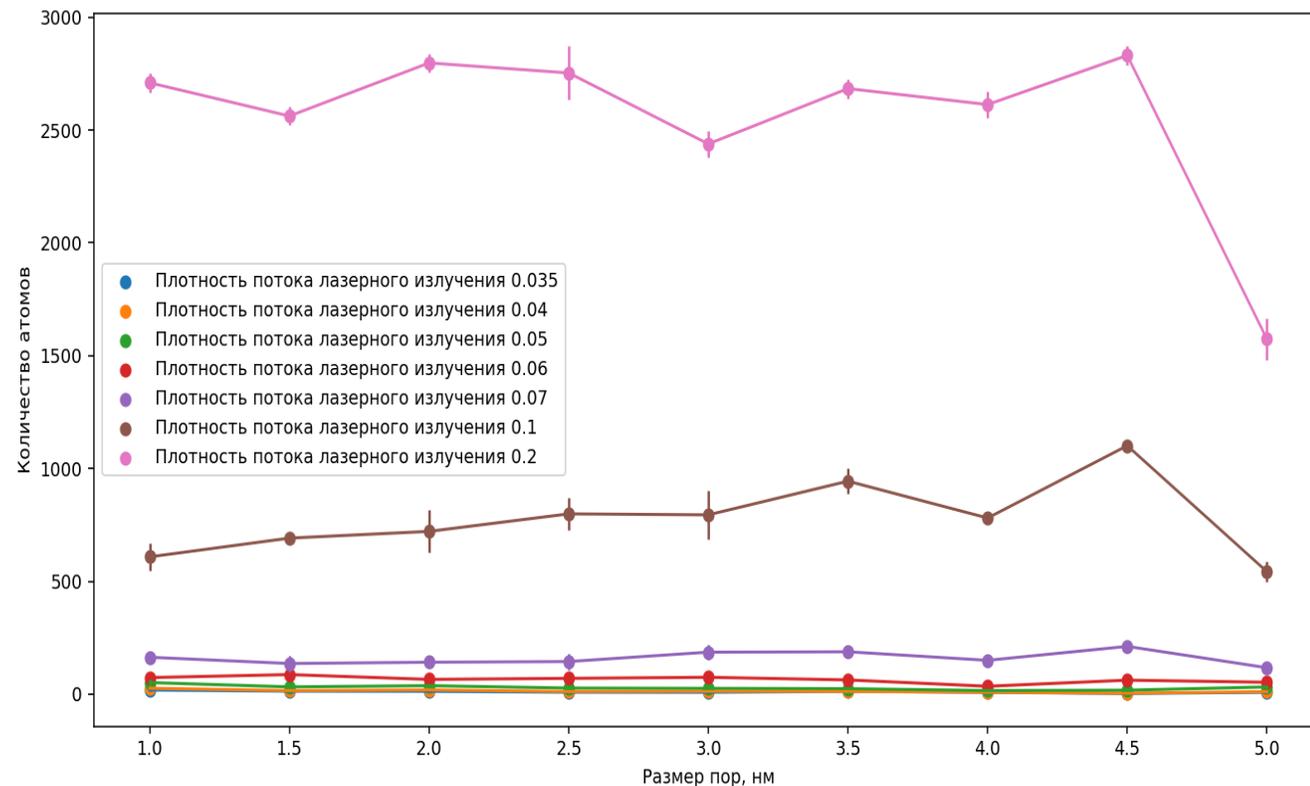
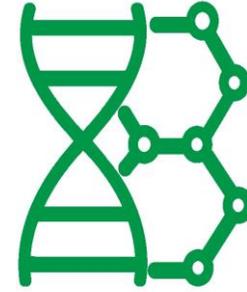


Рис. 2. Число аблированных атомов для различных значений размера пор при разной плотности энергии лазерного импульса при лазерном облучении с $\lambda = 1064$ нм при пористости 50%.

Заключение

1. Абляция мишени из пористого кремния при облучении ультракоротким лазерным импульсом моделируется с помощью метода молекулярной динамики.
2. Моделирование показало, что размер пор влияет на порог лазерной абляции.
3. При малых размерах пор (1 нм) порог абляции снижается на 50% относительно крупных пор с размером 5 нм.
4. Несмотря на снижение порога абляции, эффективность абляции при малом размере пор существенно ниже, чем при абляции мишеней с большим размером пор.
5. Результаты полезны для лазерной обработки мишеней на основе кремния.



СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!