

# Introduzione

Lo studio dell'effetto complessivo prodotto dall'interazione della radiazione elettromagnetica con un metallo o con un semiconduttore presenta notevoli difficoltà. Riflessione e trasmissione della radiazione, effetto fotoelettrico, eccitazione elettronica con la formazione di plasma costituito da coppie elettrone-buca, ionizzazione, assorbimento da portatori di carica liberi [1], emissione di cluster o atomi per rottura dei legami interatomici sono solo alcuni dei possibili fenomeni che si presentano. Se l'intensità della radiazione è sufficientemente elevata, come effetto indotto dalla trasmissione di energia dagli stati elettronici (o dal plasma) al reticolo, si può verificare un riscaldamento apprezzabile del solido con possibile cambiamento di fase, evaporazione, ebollizione, e persino vaporizzazione parossistica in prossimità della temperatura critica. Alcuni dei fenomeni elencati, tuttavia, presentano una soglia ben precisa (rispetto alle caratteristiche del fascio laser incidente quali lunghezza d'onda, durata dell'impulso e densità di energia) ed in molti casi non si riscontrano. Inoltre, al variare dei parametri dell'impulso laser, così come al variare della frazione di superficie colpita, della fase (solida, liquida) in cui si trova il sistema irraggiato e così via, solo alcuni di questi effetti possono risultare dominanti. Questo andamento permette di trattare l'interazione effettuando, di volta in volta, delle notevoli semplificazioni in base al regime caratteristico del problema che si intende studiare.

Tra la fine degli anni settanta e l'inizio dei primi anni ottanta, come conseguenza del notevole interesse nello studio del profilo di temperatura di un campione colpito da un impulso laser di notevole potenza, sono stati sviluppati modelli molto semplici ma efficaci per la simulazione con calcolo numerico del fenomeno

di trasporto di energia termica. In particolare si è constatato che, per un certo intervallo di energia e di durata dell'impulso laser, è possibile trattare il trasporto di calore all'interno del campione in termini della ben nota *legge di Fourier* [2,3] utilizzando metodi numerici alle differenze finite per l'integrazione delle equazioni [4,5,6,7]. Poichè, in un primo tempo, lo scopo fondamentale di queste ricerche è stato indirizzato verso lo studio del processo di "*laser annealing*" e lo studio della diffusione di impurezze nei metalli e nei semiconduttori in seguito al riscaldamento, si è trascurato l'effetto dell'evaporazione dalla superficie che, nella trattazione numerica, comportava condizioni al contorno più complicate. Questa limitazione è stata superata successivamente in altri lavori [8] ma sempre ignorando completamente la dinamica del gas sia nella fase di riscaldamento sia nella fase di raffreddamento del campione.

Recentemente l'interesse verso lo sviluppo di molte applicazioni connesse con l'analisi o con l'incisione (*texturing*) di superfici, con la deposizione di film sottili e con la produzione di ioni per la spettrometria di massa hanno spinto verso lo sviluppo di un modello numerico più completo e unificante di quelli attualmente disponibili che tenga conto del fenomeno dell'evaporazione di vari sistemi (metalli, ceramici, polimeri etc.) dall'inizio del riscaldamento del sistema fino a quando è avvenuta gran parte della ricondensazione del gas evaporato.

È proprio in questa direzione che abbiamo inteso sviluppare questa tesi. Abbiamo perciò simulato quello che avviene all'interno di un sistema metallico<sup>1</sup> colpito da un impulso laser di breve durata (dell'ordine delle decine di nanosecondi) ma di notevole flusso di potenza ( $> 1MW/cm^2$ ).

Quello che ci aspettava, in questo caso, era che il riscaldamento del sistema procedesse ben oltre il punto di fusione e che la superficie subisse una parziale evaporazione ed erosione. Questo è quanto abbiamo analizzato nella prima parte del nostro lavoro.

Al termine della durata dell'impulso laser, il gas evaporato in parte avrebbe dovuto

---

<sup>1</sup>Il modello tuttavia è del tutto generale e consente di trattare anche altri tipi di sistemi. Per fare questo è sufficiente cambiare, all'interno del programma elaborato, i valori dei parametri che tengono conto delle caratteristiche fisiche (temperatura di fusione e di ebollizione, conducibilità termica, etc.) del materiale che si vuole esaminare.

allontanarsi dal substrato, in parte ricondensare sulla superficie. L'esame della dinamica del gas è stato, infatti, l'oggetto della seconda parte di questo lavoro di tesi.

A causa della complessità dei fenomeni trattati non è stato possibile trovare una soluzione di tipo analitico del problema e abbiamo dovuto ricorrere così all'ausilio del calcolo numerico. Inoltre, al fine di ottenere dei risultati in tempi di calcolo ragionevoli, abbiamo fatto uso di alcune approssimazioni sulla fisica del problema. Tali semplificazioni verranno descritte nei vari capitoli di questa tesi.

In definitiva la struttura di questa tesi è la seguente:

- Capitolo 1 : in questo parte introduttiva abbiamo inteso dare una panoramica dei principali meccanismi di "sputtering" all'interno dei quali si colloca anche l'evaporazione di superfici mediante impulsi laser.
- Capitolo 2 : nella prima parte di questo capitolo abbiamo descritto i meccanismi che regolano l'interazione della radiazione laser con la materia, il riscaldamento del campione e la conduzione del calore all'interno dello stesso. Nella seconda parte abbiamo poi analizzato le transizioni di fase solido-liquido e liquido-gas, soffermandoci in particolare su quest'ultima.
- Capitolo 3 : questo capitolo vuole essere una sorta di rapida guida alla comprensione dei meccanismi che portano alle leggi della gas dinamica. Ecco quindi che, partendo dai meccanismi microscopici che regolano le collisioni tra le particelle del gas e facendo solo alcune ipotesi di carattere abbastanza generale, siamo giunti alla formulazione dell'equazione di Boltzmann. Le difficoltà incontrate nella risoluzione di tale equazione ci hanno costretto ad effettuare delle semplificazioni in base al regime in cui si trovava il gas in esame e ci hanno condotto alle equazioni della idrodinamica. Abbiamo esaminato, poi, la possibilità della formazione di onde d'urto e di onde di rarefazione all'interno di un processo idrodinamico. Abbiamo visto che, in corrispondenza della posizione di queste onde, la densità, la pressione e la velocità di flusso presentano delle discontinuità.

Una semplice analisi del problema ci ha consentito la formulazione di equazioni che collegano i valori di queste grandezze ai lati delle discontinuità stesse.

Nell'ultima parte di questo capitolo abbiamo riportato le linee essenziali di alcuni modelli che cercano di descrivere la dinamica del gas evaporato.

- Capitolo 4 : in questo capitolo abbiamo descritto i metodi numerici che ci hanno consentito di integrare al calcolatore le equazioni dell'idrodinamica con appropriate condizioni al contorno. In particolare nella prima parte abbiamo illustrato il metodo delle differenze finite, con il relativo criterio di stabilità e di convergenza per le soluzioni, che ci ha permesso di esaminare il processo di trasporto del calore.  
Nella seconda parte abbiamo descritto le linee essenziali del metodo di Godunov per la risoluzione dei problemi della gas dinamica.
- Capitolo 5 : questa parte della tesi è dedicata all'esposizione dei risultati ottenuti sia nella prima parte del lavoro (trasporto del calore) che nella parte conclusiva (studio della gas dinamica).
- Capitolo 6 : in questo capitolo si discutono le conclusioni tratte dal nostro studio e ha la pretesa di suggerire possibili sviluppi del modello.