

# Modélisation thermo-optique semi-quantique du procédé d'ablation USPL sur des aciers GO

O. Maloberti<sup>a,b</sup>, M. Nesser<sup>b,a</sup>, P. Dupont<sup>a</sup>, J. Dupuy<sup>c</sup>, A. Henrottin<sup>d</sup>, J-P. Birat<sup>e</sup>, C. Pineau<sup>f</sup>, S. Panier<sup>b</sup>

<sup>a</sup>UNILASALLE Amiens, 14 quai de la Somme, 80080 Amiens, France

<sup>b</sup>LTI – UPJV, Laboratoire LTI, IUT d'Amiens Avenue des Facultés – Le Bailly, Amiens, 80025, France

<sup>c</sup>MULTITEL a.s.b.l., 2 rue Pierre et Marie Curie, Parc Initialis, Mons, 7000, Belgique

<sup>d</sup>LASEA, 31 rue Louis Plescia, 4102, Seraing, Belgique

<sup>e</sup>IFSTEELMAN, 5 rue du Gate-Chaux, 57280, Semecourt, France

<sup>f</sup>IRT – M2P, 4 rue Augustin Fresnel, Metz, 57070, France

**RESUME** – Dans un contexte de réduction des pertes et des vibrations dans les aciers électriques à grains Orientés (GO) par la technique de raffinement de domaines principaux à 180°, une nouvelle technique dite d'ablation laser à impulsions ultra courtes (USPL) est apparue. Ce travail propose de contribuer à la modélisation de l'interaction lumière-matière en régime USPL dans le but d'optimiser l'impact du procédé sur les performances des matériaux ferromagnétiques doux. L'article décrit, modélise et calcule une physique thermo-optique non linéaire et ultra-transitoire d'origine quantique pour laquelle l'acier est considéré comme un réseau d'atomes baignant dans un gaz d'électrons libres. Le modèle s'appuie sur une séparation entre le temps de diffusion thermique dans le gaz d'électrons et celui dans le réseau cristallin mais avec un couplage incontournable entre électrons et phonons, exacerbé par la génération d'un plasma à la température électronique  $T_e$ . Ce couplage fort permet le transfert d'énergie depuis le gaz d'électrons vers les phonons du cristal avec des conditions favorables de température du métal  $T_{ph}$  et de dépassement du seuil physique d'ablation par sublimation. Parmi les méthodes envisagées, seul un modèle moyen dit à deux températures, résolu analytiquement, permet de converger dans un temps raisonnable vers l'ensemble des solutions utiles à l'optimisation. La méthode des éléments finis permet cependant de consolider les courbes de températures impulsives obtenues.

**Mots-clés**—Aciers électriques, GO, raffinement de domaines magnétiques, procédés d'ablation, impulsions ultra-courtes, éléments finis, modèle semi-quantique à deux températures.

## 1. CONTEXTE ET ETAT DE L'ART

Le traitement de surface des aciers électriques est utilisé depuis la fin du 20<sup>ème</sup> siècle pour réduire les pertes [1-4]. La technique consiste classiquement à induire un raffinement des domaines magnétiques principaux à 180° à l'aide de ligne de gravure ou d'irradiation induisant localement une anisotropie de contraintes. Les premières techniques sont d'abord des procédés mécaniques [1], des arcs électriques [3] ou plasmas [2], lasers continus [4] puis des lasers à impulsions longues ou courtes [5, 6]. La technique USPL d'ablation a été proposée par le consortium du projet ESSIALL en 2017 [7]. Des études ont déjà été initiées dans [8] avec un modèle moyen d'ablation pour lequel il n'est possible de confronter les calculs aux mesures que partiellement. La simulation numérique par Éléments Finis (EF), utilisant des propriétés matériaux tabulées ou calibrées est une alternative pour consolider les transitoires thermiques calculés par un modèle analytique équivalent moyen et pour ensuite les confronter à des données physiques réalistes et fiables.

## 2. PROCEDE USPL D'ABLATION POUR LES ACIERS ELECTRIQUES

### 2.1. Comparaisons entre procédés USPL, SPL et LPL

Une référence [9] classe les procédés laser selon trois familles grâce à la durée des impulsions  $\tau$ . Le procédé par laser continu ou impulsions longues ( $\tau > 100$ ns, LPL) sera qualifié d'irradiation induisant uniquement des contraintes thermiques. Le procédé à impulsions courtes ( $10$ ps  $< \tau < 100$ ns, SPL) sera qualifié de « scribing » conduisant à une gravure limitée accompagnée d'effets thermiques. Le procédé à impulsions ultra-courtes ( $\tau \sim 500$ fs  $< \tau < 10$ ps, USPL), nommé ablation, intervient lorsque  $\tau$  est très inférieure au temps caractéristique de diffusion de la chaleur des électrons au réseau atomique ( $\tau_{e-ph} \sim 10$ ps) et lorsque la densité d'énergie du laser absorbée par la matière dépasse le seuil d'ablation ( $\sim 0.5$  J.cm<sup>-2</sup>), générant au point de focalisation un plasma à la température  $T_e$ . Il en découle une micro-explosion, un processus d'ablation par sublimation et la génération d'une onde de choc (discontinuité de température et pression) plus intense que pour les procédés LPL et SPL [8]. Si les procédés LPL ou SPL sont décrits à l'aide des lois classiques de la physique, le procédé USPL fait appel à des processus quantiques [10]. Toutes les variables utilisées dans cet article seront définies et décrites dans le glossaire (§ 6).

### 2.2. Source laser : Faisceau optique, focalisation et impulsion, transmittance et absorption de lumière

Les deux sources utilisées sont des lasers USPL de longueur d'onde  $\lambda = 1030$  nm, de largeur temporelle  $\tau = 500$  fs, limités en puissance moyenne à  $P_w < 4$  W (basse fluence) et  $P_w < 20$  W (haute fluence). Chaque source sera représentée par un faisceau gaussien, de largeur spatiale  $w_0 = 2r$  ( $\sim 10$  à  $50$   $\mu$ m), qui définit le flux thermique imposé sur le spot de focalisation de largeur spatiale  $f_x w_0$  (Figure 2). Chaque impulsion a une puissance crête  $\hat{P} = P_w / (f \cdot \tau)$  où  $f$  est sa fréquence de répétition (1 kHz à 1 MHz). Ainsi, l'intensité maximale  $\hat{I}$  correspond à la densité surfacique de puissance crête:  $\hat{I} = \hat{P} / (\pi (f_x r)^2)$ . Sans perte de généralité, nous approximerons la distribution temporelle (1) en créneau ou fonction porte  $I(t) = I((t - \tau/2)/(\tau))$  de durée égale à  $\tau$  (faisceau de type « top-hat » [11]).

$$I(t) = \hat{I} \cdot I((t - \tau/2)/(\tau)) \quad (1)$$

#### 2.2.1. Énergie et Fluence par impulsion ou cumulées

L'énergie fournie par la source laser est définie soit par impulsion soit sous sa forme cumulée pour toutes les  $N_p N$

$N_p (f_x w_0)/(v\tau)$  impulsions incidentes au même endroit compte tenu de la vitesse de balayage  $v$ , à l'aide de (2) :

$$E_1 = \tau \hat{P} = \frac{P_w}{f} \text{ et } E_N = N_p N E_1 = N_p \frac{f_x w_0 P_w}{v \tau f} \quad (2)$$

On définit la fluence du laser par la densité surfacique d'énergie (3) notée  $F_1$  pour une impulsion et  $F_N$  pour  $N_p N$  impulsions :

$$F_1 = \frac{E_1}{\pi(f_x r)^2} = \frac{P_w}{\pi(f_x r)^2 f} \text{ et } F_N = N_p N F_1 = N_p \frac{f_x w_0 P_w}{\pi(f_x r)^2 v \tau f} \quad (3)$$

$F_1$  et  $F_N$  seront parmi les variables les plus importantes de réglage du procédé, et ce, quelle que soit la configuration laser.

### 2.2.2. Transmittance $A$

La transmittance  $A$  représente la part d'intensité lumineuse qui n'est pas réfléchi ou diffractée sur la surface. Ce coefficient doit prendre en compte l'état de surface, la rugosité et donc la profondeur des gravures effectuées (voir § 4.4). La valeur nominale initiale pour la transmittance correspond à celle d'un acier usuel @ $\lambda \sim 1030$  nm, i.e.  $A = A_0 \approx 0.35$  s.u..

### 2.2.3. Absorption $\alpha$

Le métal, opaque à cette longueur d'onde, absorbe toute la lumière transmise avec atténuation exponentielle de l'onde dans l'épaisseur. La valeur nominale initiale de  $\alpha = \alpha_0$  est la part de la fluence seuil théorique d'ablation  $e_{th} \approx 0.44$  J.cm<sup>-2</sup> responsable de la sublimation [10] et est donc donnée par (4) :

$$\alpha_0 = (\rho \cdot L_v)/e_{th} \quad (4)$$

$\delta = \alpha^{-1}$  est la profondeur de pénétration de l'onde ( $\delta_0 \approx 91$  nm). La très forte intensité du laser ( $\hat{I} > 1$  TW.cm<sup>-2</sup>) pourra induire un processus d'absorption non linéaire  $\alpha(\hat{I})$  (§ 4.4).

### 2.2.4. Efficacité ou rendement d'ablation $\eta$

L'énergie transmise puis absorbée par le métal est à l'origine de l'ablation par sublimation. Cependant, les expériences ont révélé un ratio  $\eta$  entre énergie effective et énergie absorbée différent de la valeur nominale théorique  $\eta_0 = 1$ . Le processus peut s'accompagner d'effets thermiques et/ou mécaniques annexes pour de fortes fluences par rapport au seuil d'ablation (§ 4.4).

### 2.2.5. Source laser impulsionnelle effective

Pour le modèle EF, la source est représentée par une condition limite de flux thermique entrant  $S = S_{ef}(t) = A \cdot I(t)$  à travers le spot en surface (§ 3). Pour le modèle analytique moyen (§ 4), la source d'énergie  $S(t, z)$  [10] qui pénètre dans le matériau à l'instant  $t$  et à la profondeur  $z$  s'écrit (5) :

$$S = S_{an}(t, z) = A \cdot \eta \cdot \alpha \cdot I(t) \cdot e^{-\alpha z} \quad (5)$$

## 2.3. Principes physiques et thermiques de l'ablation

### 2.3.1. Fondements et équations du modèle

Les auteurs de [10, 12] identifient les phénomènes impliqués dans l'interaction laser-matière en régime ultracourt (pico, femto). Phase 1: Absorption de l'énergie par les électrons (Temps caractéristique: 10 fs) pour lesquels la température des électrons augmente mais pas celle de la matrice métallique. Phase 2: Diffusion de l'énergie des électrons aux phonons (Temps caractéristique: 10 ps) pour lesquels l'énergie thermique des électrons est transmise par couplage à la matrice. Les échelles de temps très différentes conduisent à adopter une vision semi-classique d'un métal [13] constitué de deux sous systèmes couplés : le gaz d'électrons  $e$  libres à la température  $T_e$  et les ions/atomes en réseau support de propagation des phonons  $ph$  à la température  $T_{ph}$  qui baignent dans ce gaz d'électrons.

## 2.3.2. Statistique quantique des électrons et phonons

### 2.3.2.1 Chaleur spécifique des électrons et phonons

La chaleur spécifique à volume constant est la variation d'énergie interne pour une variation de température à densité électronique  $n_e$  pour les électrons et ionique  $n_{ph}$  pour les phonons constantes. Nous obtenons d'une part la chaleur spécifique des électrons  $C_{ve}$  (6) et d'autre part celle des phonons  $C_{vph}$  [14] qui doit correspondre à la valeur tabulée connue du métal FeSi (voir glossaire § 6). Pour des températures suffisamment basses (i.e.  $T_e \ll T_F$ ), la chaleur spécifique des électrons peut s'écrire  $C_{ve} = C'_{ve} \cdot T_e$  [14,15] avec

$$C'_{ve} = \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B^2 n_e}{E_F} \quad (6)$$

La théorie donne  $1 < C'_{ve} \sim 80 < 100$  J.m<sup>-3</sup>.K<sup>-2</sup>. Sachant que  $T_e \sim 0.1 - 0.5 T_F$ , une calibration avec les mesures est proposée au § 4.4.

### 2.3.2.2 Couplage électrons – phonons

Les collisions entre électrons et phonons induisent un échange de puissance proportionnelle à la différence de température des deux sous-systèmes. La constante de couplage  $e - ph$  notée  $G$  provient de la variation d'énergie résultante. Ce travail a été réalisé par [16, 17] menant à une expression approchée pour  $G$  (7), normalement fonction de  $T_e$  [15,14] :

$$\frac{\pi^2}{6} m_e n_e V_s^2 = \frac{\pi^2 m_e n_e \epsilon_c^0 \omega_{ph}^2}{6 k_F^2} < G < \frac{m_e^2 n_e^2 (k_B T_D)^2 k_B}{16 \pi^3 \hbar^5} \quad (7)$$

La théorie donne  $0.1 < G \sim 1 < 10$  TW.cm<sup>-3</sup>.K<sup>-1</sup>. Une calibration non linéaire avec  $\hat{I} \sim 1 - 70$  TW.cm<sup>-2</sup> est proposée au § 4.4.

### 2.3.2.3 Conductivité thermique

La conductivité thermique des électrons est reliée à  $C_{ve}$  via le modèle de Drude (8) [14,15] où  $v_F$  est la vitesse de Fermi et  $\nu_e$  la fréquence de collisions des électrons.

$$\lambda_e \sim \frac{v_F^2}{2 \nu_e} C_{ve} \quad (8)$$

La théorie donne  $1 T_e < \lambda_e < 10 T_e$  W.m<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>. Les termes de conduction ( $\lambda_e, \lambda_{ph}$ ) sont très petits face aux inerties thermiques ( $C_{ve}, C_{vph}$ ) et au couplage ( $G$ ). Il seront négligés au § 4.

## 2.3.3. Modèle quantique à deux températures

Une fois intégrées les processus statistiques quantiques, l'évolution des températures des sous-systèmes électrons  $T_e$  et matrice  $T_{ph}$  est décrite [10, 15, 18] par un système d'équations aux dérivées partielles (EDP) couplées (9).

$$\begin{cases} C_{ve} \cdot \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla[\lambda_e \cdot \nabla(T_e)] - G \cdot (T_e - T_{ph}) + S \\ C_{vph} \cdot \frac{\partial T_{ph}}{\partial t} = \nabla[\lambda_{ph} \cdot \nabla(T_{ph})] - G \cdot (T_{ph} - T_e) \end{cases} \quad (9)$$

### 2.3.4. Conditions, seuil et calcul de l'ablation

Le phénomène de sublimation est conditionné par  $\tau \ll 10$  ps et un échauffement de la matrice supérieure à l'échauffement d'évaporation tel que  $T_{ph} > T_v$ . La quantité de matière ablatée est alors dérivée de (10) (avec  $L_f \sim 0.0033 \cdot L_v$ ) :

$$C_{vp} (\Delta T_{ph} - \Delta T_v) = \rho \cdot (L_v + L_f) \approx \rho \cdot L_v \quad (10)$$

## 2.4. Paramètres d'impacts considérés - Discussion

On s'intéressera aux impacts physiques du procédé USPL déjà en partie étudiés dans la référence [8] : 1) La température maximale  $T_{e,max}$  [K] des électrons du plasma, liée à la pression de l'onde de choc associée ; 2) La profondeur de la gravure  $p$  [μm] obtenue par ablation.

### 3. MODELISATION NUMERIQUE EF DU PROCEDE D'ABLATION

#### 3.1. Géométrie et physique du modèle

Le point de focalisation du faisceau laser quasi-monochromatique de type Gaussien étant circulaire de diamètre (10 à 50  $\mu\text{m}$ ) très petit devant la tôle (>60 mm), le problème sera considéré axisymétrique 2D (Figure 1).

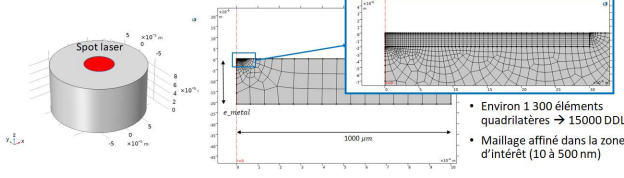


Figure 1: géométrie du problème d'interaction lumière – matière étudié.

#### 3.2. Formulation EF du modèle physique

##### 3.2.1. Modèle thermique couplé à deux variables d'état

La modélisation EF est basée sur le même système d'équations aux dérivées partielles (EDP) couplées (9), où le terme source  $S$  n'est présent que sous la forme d'une condition de flux thermique entrant au niveau de l'interface (§ 3.3.2).

##### 3.2.2. Thermodynamique – changement d'état

En régime d'ablation (§ 2.3.4), la matière dont la température dépasse  $T_v$  est sublimée instantanément sans passer par l'état liquide. Le phénomène est modélisé en EF en considérant un flux  $\Phi_{vap/abl}$  (11) de vaporisation ou d'ablation :

$$\Phi_{vap/abl} = v_{vap/abl} \rho (L_v + L_f) \quad (11)$$

où  $v_{vap/abl}$  est la vitesse des particules de métal sublimées.

#### 3.3. Conditions aux limites

Le problème compte 5 conditions aux limites (Figure 2) :

- Une condition d'axisymétrie sur l'axe de révolution ;
- Un flux thermique entrant imposé par le faisceau gaussien du laser sur la face supérieure (§ 3.3.1) ;
- Un flux de matière sublimée sur la face supérieure :  $\Phi_{vap} = h \cdot (T_{ph} - T_v)$  si  $T \geq T_v$  (§ 3.3.2) ;
- Une condition d'isolation ailleurs  $-n \cdot (-k \nabla T) = 0$  ;
- Une condition de flux source  $\Phi_{abl}$  d'ablation en volume si  $T_{ph} \geq T_v$  (§ 3.3.3).

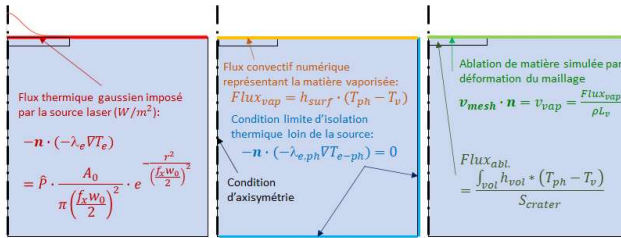


Figure 2: Conditions aux limites du domaine d'étude.

##### 3.3.1. Source laser : faisceau optique gaussien

La forme de la source est une gaussienne (12) qui définit le flux thermique imposé au centre du modèle 2D-axi-symétrique :

$$-n \cdot (-\lambda_e \nabla T) = \frac{4 \cdot A_0}{\pi (f_x \cdot w_0)^2} \cdot e^{-4 \cdot r^2 / (f_x \cdot w_0)^2} \quad (12)$$

##### 3.3.2. Conditions surfacique d'ablation de matière

Le flux de matière sublimée est représenté par un flux convectif de surface  $\Phi_{vap} \geq 0$  (13) avec  $h_{surf}$  un coefficient de

convection purement numérique tel que la température à l'interface ne dépasse jamais la température d'évaporation  $T_{vap}$  :

$$\Phi_{vap} = h_{surf} \cdot (T_{ph} - T_v) \text{ ssi } T_{ph} \geq T_v \quad (13)$$

##### 3.3.3. Volume d'ablation et zone affectée

Le phénomène d'ablation en volume est modélisé en considérant un flux source d'ablation  $\Phi_{abl} \leq 0$  (14) obtenu par intégration en volume d'une source thermique de type convective  $h_{vol}(T_{ph} - T_v)$  ssi  $T_{ph} \geq T_v$  et divisée par la surface libre du cratère  $S_{crater}$ , avec  $h_{vol}$  également un coefficient de convection purement numérique très grand imposant  $T_{ph} = T_v$  si  $T_{ph} \geq T_v$ .

$$\Phi_{abl} = v_{abl} \cdot \rho (L_v + L_f) = \frac{\int_{vol} h_{vol} \cdot (T_{ph} - T_v)}{S_{crater}} \quad (14)$$

#### 3.4. Maillage et remaillage

le problème est maillé avec environ 1 300 éléments quadrilatères (15000 Degrés De Liberté), affinés dans la zone d'intérêt, i.e. la zone du cratère (Figure 1). L'ablation de matière est simulée grâce à une déformation de l'interface métal – air et du maillage correspondant [19] avec une vitesse calculée  $v_{mesh}$  (15) à partir des flux de vaporisation et d'ablation définis ci-avant :

$$v_{mesh} \cdot n = v_{vap} - v_{abl} = \frac{+\Phi_{vap} - \Phi_{abl}}{\rho (L_v + L_f)} \quad (15)$$

avec  $n$  le vecteur normal à la surface ( $v_{vap} > 0, v_{abl} < 0$ ).

#### 3.5. Resultat des Simulations

##### 3.5.1. Propriétés des matériaux et calibration du modèle

L'acier test étudié ici est un FeSi GO conventionnel basse densité  $\rho = 7380 \text{ kg.m}^{-3}$  à forte teneur en silicium, d'épaisseur  $\zeta = 0.23 \text{ mm}$  (revêtement de  $3 \mu\text{m}$ ) nommé 23MXX. Les propriétés thermodynamiques et thermiques du métal sont :  $T_f = 1535 \text{ K}$  et  $T_v = 2861 \text{ K}$  les températures de fusion et de vaporisation ;  $L_f = 180 \text{ kJ/kg}$  et  $L_v = 6400 \text{ kJ/kg} \gg L_v$  l'enthalpie libre de fusion et de vaporisation ;  $C_{mph} = 460 \text{ J/kg.K}$  ;  $\lambda_{ph} = 25 \text{ W/m.K}$ . En toute rigueur, le modèle nécessite une calibration des coefficients  $A_0$ ,  $h$  et  $h_{vol}$  qui règlent la vitesse et le rendement d'ablation. Les propriétés thermiques  $C_{ve}$  et  $G$  doivent aussi être calibrées [19] pour régler  $T_e$ . Pour le cas test, les électrons ont des propriétés constantes :  $C_{ve} = 6 \cdot e^5 - 3 \cdot e^7 \text{ J.m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$  ;  $\lambda_e = 1 \cdot e^4 \text{ W.m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$  et  $G = 0.1 \text{ TW.cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$ . Enfin, les coefficients d'échange seront donnés par  $h = 1 \cdot e^{13} \text{ W/m.K}$  et  $h_{vol} = 1 \cdot e^{20} \text{ W/m}^3/\text{K}$ .

##### 3.5.2. Simulation pour une impulsion

L'unique configuration laser testé dans cette partie est la suivante :  $P_w = 2.3 \text{ W}$ ,  $f_x = 1.2$ ,  $w_0 = 50 \mu\text{m} \Rightarrow F_l = 11,71 \text{ J.cm}^{-2}$ .

##### 3.5.2.1 Simulation des températures lors d'une impulsion

Les températures  $T_e$  et  $T_{ph}$  simulées sont tracées Figure 3 ; où il est observé un 1<sup>er</sup> maximum  $T_{e,max} \sim 60 \text{ 000 K}$  à l'instant  $t = \tau$ , i.e. à la fin de l'impulsion [20]. La température  $T_{ph}$  ne croît à son tour que bien après l'impulsion pour atteindre la température d'évaporation  $T_v$  entre  $\tau_{e-ph}/3 \sim 10 \text{ ps}$  et  $5\tau_{e-ph} \sim 100 \text{ ps}$ .

##### 3.5.2.2 Volume et Profondeur d'ablation d'une impulsion

Si les températures calculées semblent concordantes entre les deux méthodes (numérique et analytique), la profondeur d'ablation d'une impulsion seule  $dp_1$  n'est quant à elle que de 7 Å pour le modèle numérique (Figure 4) contre 45 nm pour le modèle analytique moyen ainsi que pour l'estimation à partir des mesures (voir Figure 5 avec 100 impulsions).

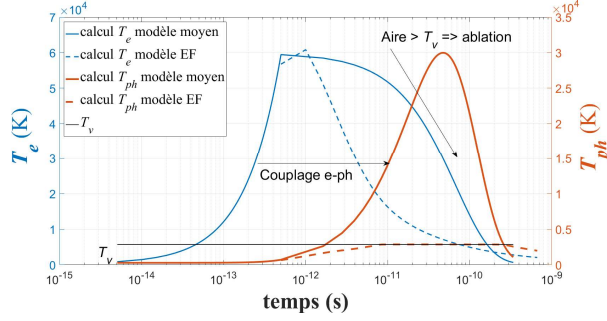


Figure 3: Températures simulées en EF et calculée selon un modèle moyen (voir § 3 et (17), (18) du § 4) au centre du cratère pour le premier matériau test et une impulsion en fonction du temps en échelle logarithmique.

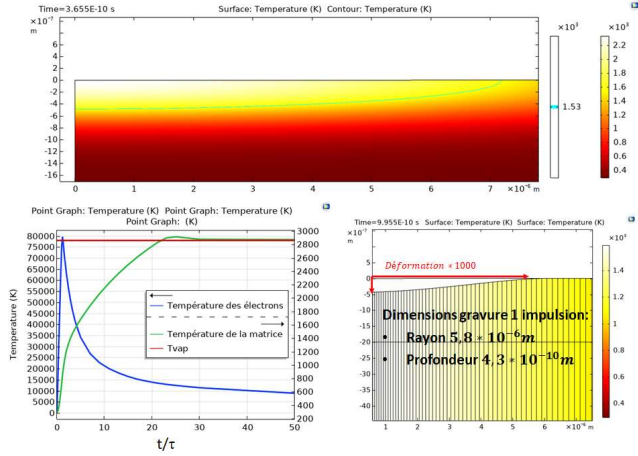


Figure 4: Simulation montrant  $T_e$  et  $T_{ph}$  et la gravure pour une impulsion.

### 3.5.3. Extrapolation pour $N$ impulsions

#### 3.5.3.1 Hypothèse athermique et fréquence de répétition

Les résultats obtenus Figure 3 montrent que tous les phénomènes transitoires prennent fin au-delà d'une durée  $10\tau_{e-ph} \sim 350\text{ps}$  (temps de relaxation de la matrice). La fréquence de répétition des impulsions étant fixée à  $f = 10\text{ kHz}$ , la période des impulsions est de  $T_L = 100\text{ }\mu\text{s} \gg 100\tau_{ph}$ .

#### 3.5.3.2 Volume et Profondeur d'ablation de $N$ impulsions

Il est donc raisonnable de considérer les impulsions successives indépendantes et de déterminer la profondeur totale  $p$  de l'ablation de  $N$  impulsions par :  $p = Ndp_1$  (Figure 5).

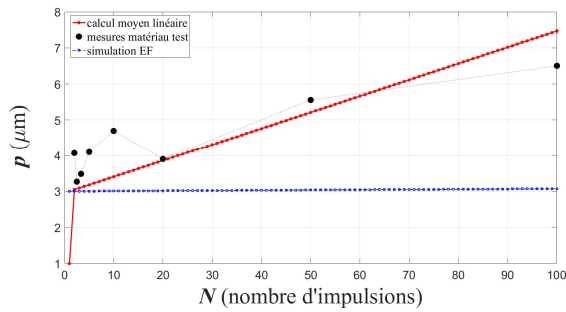


Figure 5: Profondeur du cratère simulée en EF, calculée avec le modèle analytique (§ 3 et (22), (23) du § 4) et mesurée pour  $F_I = 11,71\text{ J.cm}^{-2}$ .

### 3.6. Confrontations aux mesures, discussion et perspectives

La configuration laser test à fluence constante  $F_I = 11,71\text{ J.cm}^{-2}$  est celle d'une impulsion avec  $f=10\text{kHz}$  et une vitesse de balayage variable  $v=5, 10, 25, 50, 100, 150, 200, 250\text{ mm.s}^{-1}$ .

Un nombre croissant d'impulsions s'accumulent en chaque point de la gravure. Si la simulation EF des températures semble correcte, le temps de calcul est déraisonnable en 2D axisymétrique. Il est donc difficile d'imaginer ajouter ici des coefficients non linéaires pour la transmittance  $A$  avec l'état de surface, l'absorption  $\alpha$  et le rendement  $\eta$  avec la fluence. Par ailleurs, la vraie profondeur de gravure, seule grandeur vérifiable par les mesures, est encore erronée probablement à cause d'une calibration de paramètres à préciser. Nous lui préférons donc une résolution analytique du modèle à deux températures.

## 4. MODELE ANALYTIQUE MOYEN EQUIVALENT

### 4.1. Equations thermiques avec approximations

Avec la source  $S$  (5) et en négligeant les termes de conduction, le système d'équations (9) devient un système découplé (16) après dérivation de la première ligne et combinaisons de lignes :

$$\begin{cases} \tau_{e-ph} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \Delta T_e^2 + \Delta T_e^2 = 2 \frac{S}{C_{ve}} t \\ \tau_{e-ph} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \Delta T_{ph} + \Delta T_{ph} = \Delta T_e \end{cases} \quad (16)$$

Avec  $\tau_{e-ph} = C_{vph}/G$ ,  $\Delta T_{e-ph} = T_{e-ph} - T_0$ ,  $\Delta T_e^2 = T_e^2 - T_0^2$  où  $T_0$  est la température ambiante.

### 4.2. Modélisation d'une impulsion

#### 4.2.1. Résolution des équations du modèle

Le système d'équations (16) a les solutions suivantes :

##### 4.2.1.1 Pendant l'impulsion ( $0 \leq t \leq \tau$ )

$$\begin{cases} T_e = \sqrt{T_0^2 + 2 \frac{S\tau}{C_{ve}} \left( \frac{t - \tau_{e-ph}}{\tau} + \frac{\tau_{e-ph}}{\tau} e^{-t/\tau_{e-ph}} \right)} \\ T_{ph} = T_0 + \Delta T_e(\tau) \left( \frac{t - \tau_{e-ph}}{\tau} + \frac{\tau_{e-ph}}{\tau} e^{-t/\tau_{e-ph}} \right) \end{cases} \quad (17)$$

##### 4.2.1.2 Après l'impulsion ( $t \geq \tau$ )

$$\begin{cases} T_e = \sqrt{T_0^2 + \Delta T_e^2(\tau) e^{-\frac{(t-\tau)}{\tau_{e-ph}}}} \approx T_e + \Delta T_e(\tau) e^{-\frac{(t-\tau)}{2 \cdot \tau_{e-ph}}} \\ T_{ph} \approx T_0 + \left( \Delta T_{ph}(\tau) + 2 \Delta T_e(\tau) \left( e^{\frac{(t-\tau)}{2 \cdot \tau_{e-ph}}} - 1 \right) \right) e^{-\frac{(t-\tau)}{\tau_{e-ph}}} \end{cases} \quad (18)$$

##### 4.2.1.3 Températures maximales au centre du cratère

Le maximum de  $T_e$  (19) est obtenu pour  $t = t_{e,max} = \tau$  :

$$T_{e,max} = T_e(\tau) \quad (19)$$

Le max. de  $T_{ph}$  (20) pour  $e^{\frac{(t_{ph,max}-\tau)}{\tau_{e-ph}}} = 2 - \tau/(2 \cdot \tau_{e-ph})$  :

$$T_{ph,max} = T_0 + T_e(\tau) / \left( 2 - \tau / (2 \cdot \tau_{e-ph}) \right) \quad (20)$$

### 4.2.2. Equation estimant l'ablation de matière

#### 4.2.2.1 Seuil, palier et rendement d'ablation

La condition d'ablation donnée par (10) permet de définir la fluence seuil  $F_{th}$  (21) [10] calculée pour  $T_{ph,max}$  correspondant à la fluence  $A\eta F_I$  requise pour l'ablation à partir de la surface :

$$F_{th} = \left( \left( \rho \cdot L_v + C_{vph} \Delta T_v \right)^2 \left( e^{\frac{(t_{ph,max}-\tau)}{\tau_{e-ph}}} \right)^2 \right) / \left( \frac{\alpha C_{vph}}{C_{ve}} \tau G \right) \quad (21)$$

#### 4.2.2.2 Profondeur et volume d'ablation

On en déduit la profondeur d'ablation  $dp_1$  pour une impulsion :



$$dp_1 = \frac{1}{\alpha} \ln \left( \frac{A \cdot \eta \cdot F_1}{F_{th}} \right) \quad (22)$$

#### 4.2.3. Comparaisons de modèles pour 1 impulsion

L'acier étudié est le 23MXX avec des propriétés linéaires simplifiées pour le cas test :  $A = A_0 = 0.35$ ,  $\alpha^{-1} = \alpha_0^{-1} = 30 \text{ nm}$ ,  $C'_{ve} = 5.6 \text{ J.m}^{-3} \cdot \text{K}^{-2}$ ,  $G = 0.1 \text{ TW.cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$  et  $\eta = 1$ . Les températures  $T_e$  et  $T_{ph}$  calculées sont tracées Figure 3 ; avec les mêmes observations ( $T_{e,max} \sim 60\,000 \text{ K}$  à l'instant  $t = \tau$ ), mais  $T_{ph}$  n'est plus limitée par  $T_v$  où  $T_{ph} > T_v$  pendant l'intervalle de temps de l'ablation ( $T_{ph,max} \sim 35\,000 \text{ K}$  à l'instant où  $T_{ph} = T_e$  et  $T_{ph} > T_v$  entre  $\tau_{e-ph}/3 \sim 10 \text{ ps}$  et  $5\tau_{e-ph} \sim 100 \text{ ps}$ ).

#### 4.3. Modélisation de l'ablation pour $N$ impulsions

Pour toutes les fréquences de répétition  $f \geq 10 - 1000 \text{ kHz}$ , la période des impulsions est de  $T_L = 1 - 100 \mu\text{s} \gg 100\tau_{ph}$ . Bien qu'il n'y ait aucun recouvrement temporel entre deux impulsions successives (22) (voir § précédent), la profondeur  $p$  (23) de la gravure sera tout de même calculée de manière générale à l'aide d'une équation itérative incluant potentiellement des coefficients non linéaires :  $A(p, F_1)$ ,  $\alpha(\hat{l})$ ,  $G(\hat{l})$  et  $\eta(F_1)$ .

$$p(N_p N) = \sum_{i=1}^{N_p N} \frac{1}{\alpha(\hat{l})} \ln \left( \frac{A(p(i), F_1) \cdot \eta(F_1) \cdot F_1}{F_{th} (C'_{ve} G(\hat{l}) \alpha(\hat{l}))} \right) \quad (23)$$

L'application de la formule (23) avec des coefficients constants [21] permet, pour une configuration laser à relativement basse fluence, de calculer convenablement la profondeur de gravure obtenue après plusieurs nombres d'impulsions (voir Figure 5). Cependant les paramètres fixes précédents deviennent non constants si on change de configuration laser.

#### 4.4. Calibration du modèle et synthèse avec les mesures

L'acier étudié désormais est un FeSi GO conventionnel haute densité  $\rho = 7650 \text{ kg.m}^{-3}$  à faible teneur en Si, d'épaisseur  $\zeta = 0.27 \text{ mm}$  (revêtement de  $2 \mu\text{m}$ ) nommé R120-27. Les résultats sur un très grand nombre de « tirs » laser (variation de tous les paramètres:  $P_w = 1 - 20 \text{ W}$ ,  $v = 1 - 100 \text{ mm.s}^{-1}$ ,  $f_x = 1$ ,  $w_0 = 25 - 50 \mu\text{m}$ ,  $f = 10 - 100 \text{ kHz} \Rightarrow F_1 = 1 - 30 \text{ J.cm}^{-2}$  et  $F_N = 250 - 2500 \text{ J.cm}^{-2}$ ) nous conduit à proposer les calibrations des paramètres constants ( $C'_{ve} = 9.03 \text{ J.m}^{-3} \cdot \text{K}^{-2}$ ) et variables ((24) pour  $G$  et (25) pour  $A$ , (26) pour  $\eta$  et Figure 6). La forte intensité du laser, capable d'induire un plasma, exacerbe des effets non-linéaires (24) pour  $\alpha$  et pour  $G$  qui diminue et augmente en fonction de  $\hat{l}$  ( $\chi = 2.48e^{-36} \text{ A}^{-2}$ ).

$$\begin{cases} G = G_0 (1 + \chi(\hat{l})^2) \\ \alpha = \alpha_0 / (1 + \chi(\hat{l})^2) \end{cases} \quad (24)$$

L'expérience en micro-usinage classique permet de définir une limite pratique pour le facteur de forme des cratères au-delà d'une profondeur  $p \geq f_x w_0 / 2$ . Cette limitation peut se traduire pour chaque impulsion par une transmittance  $A$  (25) possédant un palier à 0.35 puis une décroissance au-delà d'une profondeur limite selon  $w_0$  et la fluence  $F_1$  ( $\beta = 180 \text{ s.u.}$  et  $p_{lim} \sim 19 \mu\text{m}$ ).

$$A = A_0 \left( 1 - \text{erf} \left( \beta \frac{p_{max} - p_{lim}}{p_{lim}} \right) \right) \quad (25)$$

On observe enfin que le rendement d'ablation  $\eta$  (26) peut décroître pour des fluences  $F_1 \geq F_{th}$  ( $\kappa \sim 0.94$ ). Deux régimes d'ablation sont identifiés: l'un pour les faibles fluences ( $F_{lim} \sim 6 \text{ J.cm}^{-2}$ ), l'autre pour les plus fortes fluences ( $F_{lim} \sim 12 \text{ J.cm}^{-2}$ ).

$$\eta = 1 - \text{erf} \left( \kappa \frac{F_1 - F_{lim}}{F_{lim}} \right) \quad (26)$$

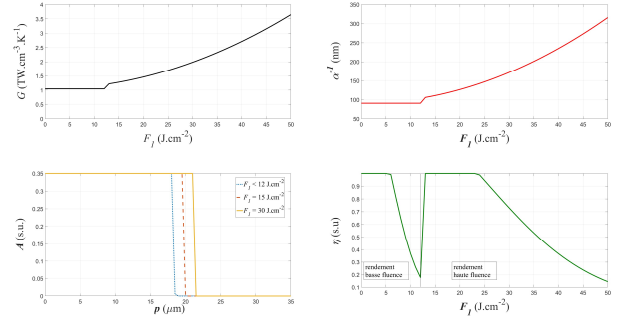


Figure 6: Résultats des calibrations expérimentales des paramètres inconnus du modèle d'ablation :  $G_{e-ph}(F_1)$ ,  $\alpha(F_1)$ ,  $A(p, F_1)$  et  $\eta(F_1)$ , selon des lois empiriques permettant d'estimer au mieux toutes les mesures (Figure 9)

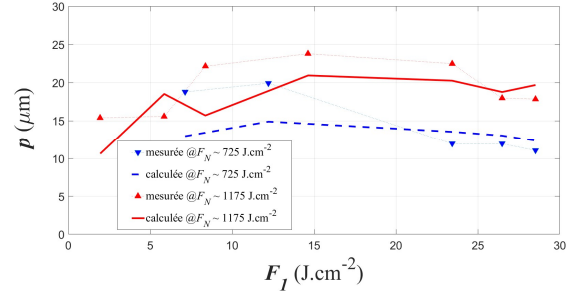


Figure 7: Profondeur du cratère calculée et mesurée en fonction de la fluence d'impulsion utilisée à fluence cumulée constante, faible et forte.

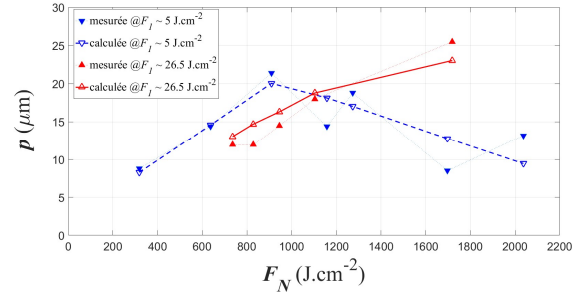


Figure 8: Profondeur du cratère calculée et mesurée en fonction de la fluence cumulée reçue à fluence d'impulsion constante, faible et forte.

Le résultat (25) a été calibré avec  $F_1$  croissante (variation de  $P_w$  et  $f$ ) ; mais  $F_N$  constante (Figure 7). Le résultat (26) a été calibré avec  $F_N$  croissante (variation de  $v$ ) ; mais  $F_1$  constante (Figure 8). Plus de 130 configurations laser ont été calculées grâce au modèle. La Figure 9 présente une synthèse des corrélations observées entre mesures confocales et calculs théoriques de  $p$ .

## 5. CONCLUSION ET PERSPECTIVES

La résolution analytique approchée, beaucoup plus simple et moins coûteuse en temps, est plus adaptée à l'optimisation du procédé USPL d'ablation pour les aciers électriques. Elle fournit les fluences  $F_1$  et  $F_N$  conduisant aux impacts physiques recherchés (température  $T_{e,max}$  et profondeur  $p$ ). Un effet de saturation, qui écrête  $p$  et peut provoquer de la refusion — re déposition ( $h$  non présentée), est révélé pour  $F_1$  et  $p$  supérieures à des limites identifiées. L'utilisation d'une fluence  $F_1$  majorée peut aider l'induction par le laser d'une onde de choc (LISW) favorable [22], générée par le plasma à une pression liée à  $T_{e,max}$  et  $\hat{P}$ . Les mécanismes expliquant les impacts  $T_{e,max}$  et  $p$  sur le magnétisme sont pour partie traités dans [23]. La physique relative à l'effet LISW fera l'objet d'une autre publication.

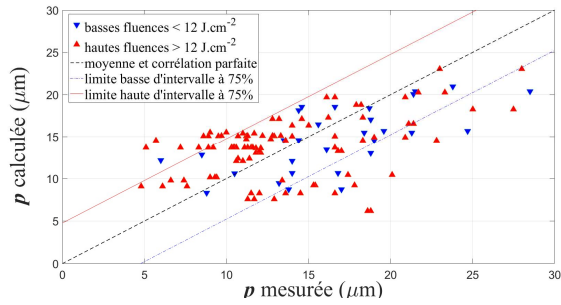


Figure 9: graphe de corrélation entre profondeur de cratère calculée et profondeur mesurée à l'aide d'un microscope confocal.

## 6. GLOSSAIRE

Tableau 1. Paramètres du laser et propriétés optiques du métal.

Nom	Valeur	Unité	Description
$\tau$	500	fs	Durée d'une impulsion laser
$N_p$	1 ou 2	s.u.	Nombre de passes du faisceau laser
$P_w$	0.5 – 20	W	Puissance moyenne du la source laser
$v$	1 – 10	mm/s	Vitesse de balayage du faisceau laser
$f$	1 – 100	kHz	Fréquence de répétition
$w_0$	25 – 50	$\mu\text{m}$	Largeur du spot laser (au waist)
$f_x$	1 – 1.5	s.u.	Coefficient de focalisation
$N$	-	s.u.	Nombre d'impulsions reçues en un point
$E_I$	-	$\mu\text{J}$	Energie par impulsion laser
$F_I$	-	$\text{J.cm}^{-2}$	Fluence par impulsion laser
$E_N$	-	mJ	Energie cumulée en chaque point
$F_N$	-	$\text{J.cm}^{-2}$	Densité d'énergie ou Fluence cumulée
$\hat{P}$	-	MW	Puissance crête d'une impulsion
$\hat{I}$	-	$\text{TW.cm}^{-2}$	Intensité laser d'une impulsion
$e_{th}$	0.5	$\text{J.cm}^{-2}$	Fluence seuil d'ablation nominale
$F_{th}$	-	$\text{J.cm}^{-2}$	Fluence seuil d'ablation recalculée
$A_0$	0.35	s.u.	Transmittance optique nominale
$A$	$A(p, F_I)$	s.u.	Transmittance optique atténuée
$p_{lim}$	5 – 20	$\mu\text{m}$	Profondeur palier d'ablation
$\beta$	180	s.u.	Paramètre d'atténuation de $A$
$\alpha_0$	0.011	$\text{nm}^{-1}$	Coefficient d'absorption nominal
$\alpha$	$\alpha(\hat{I})$	$\text{nm}^{-1}$	Coefficient d'absorption non linéaire
$\chi$	2.48e-36	$\text{A}^{-2}$	Coefficient non linéaire optique

Tableau 2. Propriétés thermiques et thermodynamiques de l'acier électrique.

Nom	Valeur	Unité	Description
$T_f$	1535	K	Température de fusion du métal FeSi
$T_v$	2860	K	Température de vaporisation du métal
$L_f$	180	$\text{kJ.kg}^{-1}$	Chaleur latente de fusion $\ll L_v$
$L_v$	6400	$\text{kJ.kg}^{-1}$	Chaleur latente de vaporisation
$\rho$	7.3-7.7	$\text{g.cm}^{-3}$	Masse volumique du métal FeSi
$\lambda_{ph}$	25	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$	Conductivité thermique du métal
$C_{mph}$	460	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	Chaleur spécifique massique du métal
$C_{vph}$	$\rho.C_{mph}$	$\text{J.m}^{-3}.\text{K}^{-1}$	Chaleur spéc. volumique du métal
$\lambda_e$	$1\text{--}5\text{e}^4$	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$	Conductivité du gaz d'électrons
$C_{me}$	$C_{ve}/\rho$	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	Chaleur spéc. massique des électrons
$C_{ve}$	$C_{ve}Te$	$\text{J.m}^{-3}.\text{K}^{-1}$	Chaleur spéc. volumique des e
$h_s$	$1\text{e}^{13}$	$\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$	Echange pour ablation de surface
$h_v$	$1\text{e}^{20}$	$\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$	Echange pour ablation de volume
$v_{vap/abl}$	-	$\text{m.s}^{-1}$	Vitesse des particules sublimées
$C_{ve}'$	5-10	$\text{J.m}^{-3}.\text{K}^{-2}$	Coefficient de chaleur spécifique
$G_0$	0.1-10	$\text{TW.cm}^{-3}.\text{K}^{-1}$	Coefficient de couplage e-ph nominal

$G$	$G(\hat{I})$	$\text{TW.cm}^{-3}.\text{K}^{-1}$	Coef. de couplage électron-phonons
$F_{lim}$	6-20	$\text{J.cm}^{-2}$	Fluence palier de rendement
$\kappa$	0.939	s.u.	Coef. de dégradation de rendement
$\eta$	$\eta(F_I)$	s.u.	Rendement d'ablation

Tableau 3. données quantiques et constantes fondamentales.

Nom	Valeur	Unité	Description
$n_e$	$1.69\text{e}^{29}$	$\text{m}^{-3}$	Densité volumique d'électrons libres
$E_F$	11.2	eV	Energie de Fermi d'occupation des e <sup>-</sup>
$k_F$	1.71	$\text{\AA}^{-1}$	Vecteur d'onde de Fermi
$T_F$	129°860	K	Température de Fermi
$v_F$	1985	$\text{km.s}^{-1}$	Vitesse de Fermi des électrons
$\nu_e$	41	THz	Fréquence de collisions des électrons
$\epsilon_e^0$	1.09	s.u.	Permittivité rel. des électrons de valence
$\omega_{ph}$	$8.58\text{e}^{13}$	$\text{rad.s}^{-1}$	Fréquence Plasma des ions métalliques
$V_{ph}$	5960	$\text{m.s}^{-1}$	Vitesse du son, des phonons
$k_D$	1.91	$\text{\AA}^{-1}$	Vecteur d'onde de Debye
$T_D$	464	K	Température de Debye
$h$	$6.63.\text{e}^{-34}$	$\text{m}^2.\text{kg.s}^{-1}$	Constante de Planck
$\hbar$	$h/(2\pi)$	$\text{m}^2.\text{kg.s}^{-1}$	Constante de Planck barre
$k_B$	$1.38.\text{e}^{-23}$	$\text{J.kg}^{-1}$	Constante de Boltzmann
$m_e$	$9.1.\text{e}^{-31}$	kg	Masse d'un électrons
$e$	$1.6.\text{e}^{-19}$	C	Charge d'un électron
$\epsilon_0$	$8.85.\text{e}^{-12}$	$\text{F.m}^{-1}$	Permittivité diélectrique
$N_A$	$6.02.\text{e}^{23}$	s.u.	Nombre d'Avogadro

Tableau 4. Variable d'état à calculer.

Nom	Valeur	Unité	Description
$p$	-	$\mu\text{m}$	Profondeur du cratère issue de l'ablation
$T_e$	-	K	Température du gaz d'électrons
$T_{ph}$	-	K	Température des phonons, ie du métal

## 7. REMERCIEMENTS

Nous remercions la commission européenne qui a partiellement financé ces travaux (GRANT NO. 766437) et à Elise Chevalier (SIMTEC) pour la mise en place du modèle numérique.

## 8. REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] P. Beckley et al., *J. Mat. Eng. Perf.*, vol. 3 (2), p. 209-213, 1994.
- [2] K. Sato et al., *JMMM*, vol. 112, no 1-3, p. 183-185, july. 1992.
- [3] P. Beckley et al., *J. Appl. Phys.*, vol. 57 (8), p. 4212-4213, 1985.
- [4] S. V. Ponnaluri, *J. Mat. Proc. T.*, vol. 112 (2-3), p. 199-204, 2001.
- [5] Y. Huang et al., *Int. J. Adv. Manu. Tech.*, vol. 70, p. 1-9, 2014.
- [6] I. Petryshynets et al., *AIP Adv.*, vol. 8, no 4, p. 047604, avril 2018.
- [7] J. Dupuy et al., *SPIE LASE conf.*, USA (2019), Proc. vol. 10911.
- [8] M. Nesser et al., *IEEE Trans. on Mag.*, vol. 58 (8), p. 1-5, 2022.
- [9] M. Nesser et al., *JMMM*, vol. 504, 15 June 2020, 166696.
- [10] A B. N. Chichkov et al., *Ap. Ph. M. S. Proc.*, vol. 63 (2), p. 109-115, 1996.
- [11] S. Rung, *Micromachines*, vol. 5, p. 943-953; 2014.
- [12] A. Tatra, *Physics Procedia*, vol. 83, p. 1339-1346, 2016.
- [13] Ashcroft & Mermin, *Solid State Physics*, Rinehart & Winston, N-Y, 1976.
- [14] S. Coudert, PhD thesis, ED SPL, Université de Bordeaux, France, 2020.
- [15] Z. Lin et al., *Physical Review B*, vol. 77, , 2008.
- [16] M. I. Kaganov et al., *J. Exp. Th.. Phys.*, vol. 4, 173, 1957.
- [17] S. I. Anisimov et al., *Sov. Phys. JETP*, vol. 39, p. 375, 1974.
- [18] J. Chen et al., *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 49, p. 307-316, 2006.
- [19] E.C. Chevallier et al., 24th-26th COMSOL conf. in Cambridge, 2019.
- [20] X. Y. Wang, *Physical Review B*, volume 50, number 11, 1994.
- [21] K.-H. Leitz, *Physics Procedia*, vol. 12, part B, p. 230-238, 2011.
- [22] P. Peyre et al., *Opt. Quantum Electron.*, vol. 27, p. 1213-1229, 1995.
- [23] O. Maloberti et al., *SMM '25th conference*, poster the 5<sup>th</sup> of may 2022.

