

Chemische Entwicklung in laser-induzierten Blasen

Daniel Schanz, Thomas Kurz, Dennis Kröniger, Werner Lauterborn

Drittes Physikalisches Institut, Georg-August-Universität, Göttingen, Germany, Email: dschanz@physik3.gwdg.de

Einleitung

Durch Fokussierung eines kurzen Laserpulses in einer Flüssigkeit kann durch optischen Durchbruch eine einzelne Blase zu exakt bestimmter Zeit an einem definierten Ort erzeugt werden. Diese Methode wurde ausführlich zur Untersuchung der Blasendynamik unter verschiedenen Bedingungen genutzt. In diesem Beitrag werden die gekoppelte hydrodynamische und chemische Entwicklung einer laserinduzierten Blase in Wasser untersucht. Dies geschieht mittels Molekulardynamiksimulation des Blaseninneren und Kontinuumsimulation des Blasenäußeren. Es werden sowohl nicht angeregte als auch beschallte Medien betrachtet. Die räumliche und zeitliche Entwicklung von Temperatur und Spezieskonzentrationen in der kollabierenden Blase werden dargestellt.

Modellierung der Blase

Ziel ist, eine durch einen Femtosekunden-Laserpuls erzeugte Blase in Wasser unter verschiedenen Bedingungen zu modellieren und Aussagen über die thermodynamische und chemische Entwicklung des Blaseninneren zu erhalten. Experimentelle Grundlage bilden die in [1] beschriebenen Versuche an akustisch angeregten Laserblasen. Der hierbei verwendete Laser hatte eine Energie von $0.22 \mu\text{J}$ bei einer Pulslänge von 130 fs .

Bei einem optischen Durchbruch wird in einem sehr begrenzten Gebiet kurzzeitig durch Ionisationsprozesse ein Plasma erzeugt. Die Elektronenenergie des Plasmas wird schnell an das Medium abgegeben, woraus ein starker Temperatur- und Druckanstieg resultiert. Der hohe Druck bewirkt die Ausbildung einer Kavitationsblase. Die Simulation einer Laserblase muss versuchen, die extremen Bedingungen des Durchbruchs in ihren Anfangsbedingungen zu beschreiben.

In dieser Arbeit wurde ein für die Simulation von Einzelsonolumineszenzblasen entwickeltes Molekulardynamiksystem [2] modifiziert. Das Modell beschreibt das Innere einer Blase orts- und zeitaufgelöst. Die Bewegung

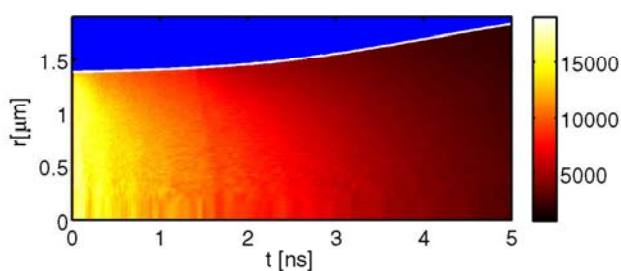


Abbildung 1: Entwicklung der Temperatur (in [K]) und des Blasenrandes direkt nach dem Laserpuls

des Blasenrandes wird durch die erweiterte Rayleigh-Plesset-Gleichung bestimmt. Verdampfung und Kondensation von Wasserdampf sowie dessen Dissoziation sind berücksichtigt. Die Reaktionen der Dissoziationsprodukte werden durch ein chemisches Modell beschrieben. Wärmeaustausch zwischen dem Inneren und dem kontinuumsmechanisch dargestellten Medium erfolgt bei Wandkollisionen der Teilchen. Die Entstehung des Plasmas kann durch das Modell nicht erfasst werden, da eine molekulardynamische Simulation der Elektronen zu aufwändig wäre. Die Simulation startet zu dem Moment, an dem das Elektronengas seine Energie an das Medium abgegeben hat.

Es wurden folgende Annahmen zum Zustand der Blase zu diesem Zeitpunkt gemacht:

- Die Blase besteht aus Wasserdampf mit einer Dichte von 350 kg/m^3 und einer Temperatur von 3000 K . Da die Blase zu diesem Zeitpunkt bereits zu einem gewissen Teil expandiert sein muss, wird nicht von der Wasserdichte ausgegangen.
- Ein Drittel des Wasserdampfes wurde von der Laserenergie dissoziiert und liegt als freie O - und H -Atome vor.
- Die Anfangsgröße der Blase wurde auf $1,4 \mu\text{m}$ festgesetzt. Dieser Wert wurde empirisch aus experimentellen Daten gewonnen.
- Die Blase wird als sphärisch angenommen. Eine eventuelle Elliptizität wird vernachlässigt.

Durch die explosionsartige Ausdehnung des Mediums wird eine Stoßwelle ausgesandt, welche das Wachstum der Blase hemmt. Da diese nicht durch das Rayleigh-Plesset-Modell erfasst wird, wird der Stoßdruck durch einen Gegendruck von 1 kbar simuliert, der während der ersten 10 ns der Simulation wirkt.

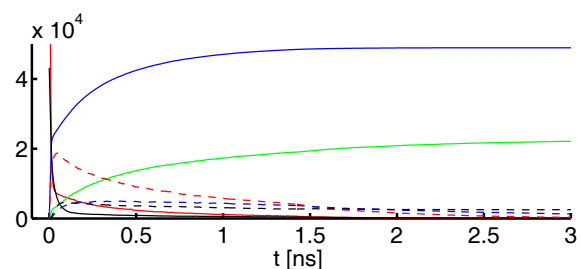


Abbildung 2: Anzahl simulierter Teilchen von H (—), H_2 (—), O (—), O_2 (—), OH (- -), HO_2 (- -) und H_2O_2 (- -) während der heißen Anfangsphase

Ergebnisse

In Abb. 1 ist die Entwicklung der Temperatur in der Blase unmittelbar nach dem Laserpuls dargestellt. Es ist eine sehr schnelle Freisetzung der in der Dissoziation des Wassers deponierten Energie zu beobachten: Die freien O - und H -Atome setzen durch endotherme Reaktionen viel Energie frei, die zu einem Anstieg der Temperatur von 3.000 K auf ca. 18.000 K in der gesamten Blase führt.

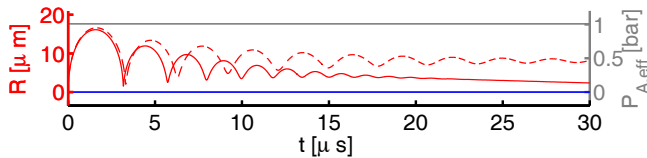


Abbildung 3: Radiusverlauf für eine nicht angeregte Blase ohne (- -) und mit Kondensation (—) der entstandenen Spezies

Wie in Abb. 2 zu sehen, entstehen hauptsächlich O_2 und H_2 , aber auch andere stabile Spezies wie HO_2 und H_2O_2 . OH wird anfänglich in relevantem Maße gebildet, reagiert aber schnell weiter, so dass es nach ca. 3 ps kaum noch in der Blase vorhanden ist. Zu diesem Zeitpunkt erreicht die Blase ein chemisches Gleichgewicht. Die Entwicklung der Blase nach dem Laserpuls hängt stark von dem Zustand des Mediums ab. Benutzt man nicht angeregtes Wasser, ergibt sich ein Radiusverlauf wie in Abb. 3 gezeigt: Die Blase schwingt durch die Laserenergie bis ca. $16,5 \mu\text{m}$ auf und oszilliert dann um einen Ruheradius von ca. $8 \mu\text{m}$. Geht man zusätzlich von einer geringen Lösung auch der chemischen Produkte aus, schrumpft die Blase schnell und verschwindet schließlich. Die Zentrumstemperaturen im ersten Kollaps (maximal 600 K) reichen nicht aus, um chemische Reaktionen auszulösen. Wird das Wasser akustisch angeregt, zeigt sich ein anderes Verhalten der Blase - abhängig vom Zeitpunkt des Laserpulses relativ zur Phase des Schallfeldes (ϕ_S). Abb.

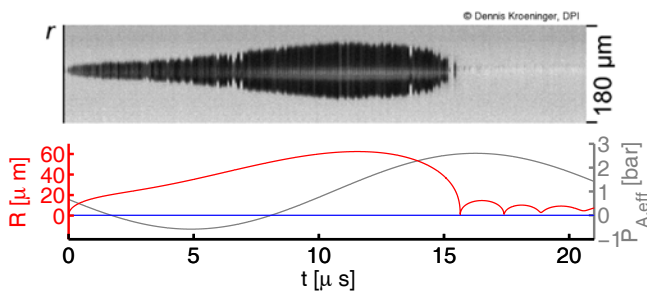


Abbildung 4: $R(t)$ für $\phi_S = 192^\circ$, experim. und simuliert.

4 und 5 zeigen die Entwicklung des Blasenradius für $\phi_S = 192^\circ$ sowie $\phi_S = 331^\circ$, jeweils im Vergleich zu Ergebnissen aus [1]. Die Amplitude des Schallfeldes betrug 1,59 bar, die Frequenz 44,0 kHz. Im ersten Fall ist zu erkennen, dass das Schallfeld das Wachstum der Blase unterstützt, so dass diese nach ca. $12 \mu\text{s}$ einen maximalen Radius von $62,4 \mu\text{m}$ erreicht. Dagegen wird die Blase im zweiten Fall zunächst komprimiert und fängt erst nach ca. $12 \mu\text{s}$ an wieder aufzuschwingen. Durch die fehlende Pulsenergie erreicht sie nur noch einen Maximalradius

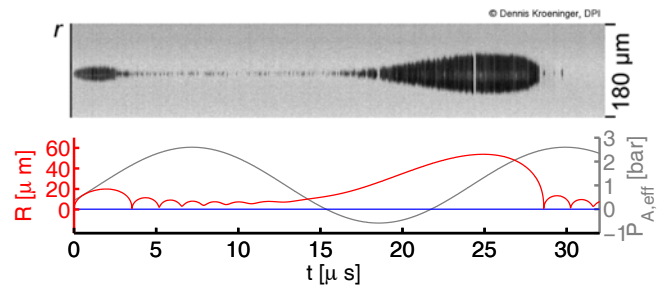


Abbildung 5: $R(t)$ für $\phi_S = 331^\circ$, experim. und simuliert.

von $53,8 \mu\text{m}$. Im Experiment sieht man Maximalradien von 58, respektive $49 \mu\text{m}$.

In Abb. 6 ist die Zentrumstemperatur für beide Fälle im Hauptkollaps dargestellt. Der größere Maximalradius führt im Falle von $\phi_S = 192^\circ$ zu höheren Temperaturen (bis 18.000 K). In beiden Fällen treten chemische

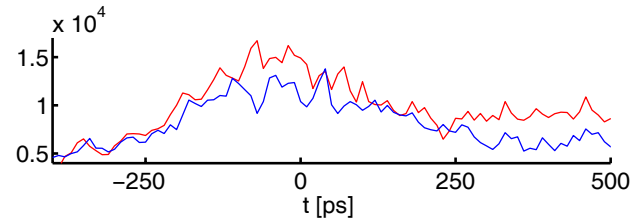


Abbildung 6: Zentrumstemperatur im Hauptkollaps für $\phi_S = 192^\circ$ (—) und $\phi_S = 331^\circ$ (—). $t=0$ bezeichnet den Zeitpunkt des minimalen Blasenradius

Reaktionen auf, da durch die hohen Temperaturen der noch vorhandene Wasserdampf teilweise dissoziiert wird. In Abb. 7 ist die chemische Entwicklung für $\phi_S = 192^\circ$ dargestellt. Die reaktiven Spezies O , H , OH und HO_2 werden in nennenswerter Anzahl gebildet und schnell wieder umgesetzt. Im Falle von $\phi_S = 331^\circ$ ergibt sich ein ähnliches Bild, die Ausbeute fällt durch die niedrigeren Temperaturen aber insgesamt geringer aus.

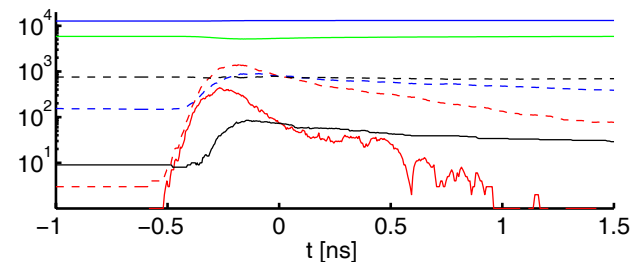


Abbildung 7: Anzahl simulierter Teilchen von H (—), H_2 (—), O (—), O_2 (—), OH (- -), HO_2 (- -) und H_2O_2 (- -) während des Hauptkollapses für $\phi_S = 192^\circ$

Literatur

- [1] Kurz, T., et al.: Optic cavitation in an ultrasonic field. Phys. Rev. E 74 (2006), 066307(7)
- [2] Schanz, D., Kurz, T., Lauterborn, W.: Fortschritte der Akustik - DAGA 2006, S. 363-364, Hrsg: Deutsche Gesellschaft für Akustik e.V., Berlin, 2006