

Ministry of Higher Education &
Scientific Research

University of Baghdad

The Institute of Laser for Postgraduate Studies



Simulation of Nanoparticles Formation by Ultrashort Laser Ablation

A thesis

Submitted to the institute of laser for postgraduate studies,
University of Baghdad in partial fulfillment of requirements for
the degree of Doctor of philosophy in laser.

By

Ahmed Obaid Soary

ABSTRACT

Femtosecond laser ablation of gold in water is studied numerically. Laser light absorption by a target is simulated using Single-Temperature Model (STM) in addition to the use of Two-Temperature Model (TTM) in order to compare the results of both models. Influences of laser parameters, target and liquid properties are considered in the study. Classical Nucleation Theory is used to calculate the free energy of critical particles production and size distribution of nanoparticles as functions of solution temperature, concentration and delay times during plume expanding. Finally the best conditions, which make the modeling of ultrashort laser absorption by using (STM) gives nanoparticles with desirable size distribution and dispersion are deduced. The obtained results demonstrated that the ablated species have higher temperature in case of STM. That leads to formation of larger NPs sizes but in higher populations although the high cooling rates and small critical particles sizes. That can be explained by continuing the aggregation processes for longer time. But considering shorter times for expanding plasma plume (less than $0.01\mu\text{s}$), we obtained better results. The best results in case of using (STM) may be obtained if the temperature is lower and enough for getting high cooling rates and small critical particles sizes, while the growth of large clusters will be limited. The study of the influence of

gold atoms concentration showed that the increasing of the solution concentration at the beginning of the aggregation stage affects only the total number of formed nanoparticles, whereas the mean diameter stays almost unchanged. We found that the free energy required to formation of critical partials at early nucleation stage is smaller at larger solution temperatures, i.e. at larger solution temperatures, the sizes of critical partials are smaller.



وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة بغداد

معهد الليزر للدراسات العليا

نمذجة تشكيل الجسيمات النانوية بواسطة الاستئصال بالليزر النبضي فائق المقصر

رسالة

مقدمة الى معهد الليزر للدراسات العليا جامعة بغداد وهي جزء من
متطلبات نيل درجة الدكتوراه في الليزر

من قبل

احمد محييد سواربي

تحت إشراف

أ.د. خليل ابراهيم حاجه

الخلاصة

نقدم دراسة عددية لإستئصال الذهب بليزر الفمتوسكند في الماء. استعملت طريقة نموذج درجة الحرارة الواحدة (STM) بالإضافة الى نموذج درجة الحرارةتين (TTM) لنمذجة امتصاص ضوء الليزر من قبل الهدف لغرض المقارنة بين نتائج الطريقتين . وقد اخذ بنظر الاعتبار دراسة تأثيرات معاملات الليزر والهدف والسائل . استعملت نظرية التنوية التقليدية لحساب الطاقة الحرة لانتاج الجسيم الحرج ولحساب التوزيع الحجمي للجسيمات النانوية كدالة لدرجة حرارة المحلول وتركيز المادة المستأصلة في المحلول وازمان التأخير خلال توسع عمود البلازما . اخيرا استنتجنا افضل الظروف التي من خلالها نحصل على الجسيمات النانوية المرغوبة باحجام صغيرة وتفريق قليل . النتائج المستحصلة اظهرت ان الجسيمات المستأصلة لها درجة حرارة اكبر في حالة تطبيق نموذج درجة الحرارة الواحدة مما يؤدي الى انتاج جسيمات نانوية باحجام اكبر لكن بمعدل انتاج كبير على الرغم من معدلات التبريد الكبيرة واحجام الجسيمات الحرجة الصغيرة . وفسرت تلك النتيجة باستمرار تجمع الجسيمات النانوية مع بعضها على شكل عناقيد لازمان اطول . لكن لازمان قصيرة ($0.01\mu s$) حصلنا على افضل النتائج لاحجام جسيمات نانوية صغيرة . ان افضل النتائج ممكن ان تستحصل في حالة استخدام نموذج الدرجة الواحدة (STM), اذا كانت درجة المحلول صغيرة بشكل كافي للحصول على معدل تبريد كبير واحجام جسيمات حرجة صغيرة وبنفس الوقت مناسبة لعدم استمرار عملية تجمع العناقيد الكبيرة . بينت دراسة تأثير تركيز ذرات الذهب ان زيادة تركيز المحلول عند بداية مرحلة التجمع تاتر فقط على العدد الكلي للجسيمات النانوية المتشكلة بينما يبقى الحجم بشكل عام غير متأثر . وجدنا ايضا بان الطاقة الحرة اللازمة لتشكيل الجسيمات الحرجة عند مرحلة التنوية المبكرة تكون اصغر عند درجات حرارة المحلول المرتفعة , اي ان حجوم الجسيمات الحرجة تكون اصغر عند زيادة درجة حرارة المحلول.