



Modélisation de la structuration d'un matériau diélectrique irradié par une impulsion laser femtoseconde

Romain Beuton

► To cite this version:

Romain Beuton. Modélisation de la structuration d'un matériau diélectrique irradié par une impulsion laser femtoseconde. Physique [physics]. Université de Bordeaux, 2018. Français. NNT : 2018BORD0231 . tel-01982072

HAL Id: tel-01982072

<https://theses.hal.science/tel-01982072>

Submitted on 15 Jan 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

École doctorale des Sciences Physiques et de l'Ingénieur

THÈSE

pour obtenir le grade de docteur délivré par

Université de Bordeaux

Spécialité Laser, Matière et Nanosciences

présentée par

Romain BEUTON

Modélisation de la structuration d'un matériau diélectrique irradié par une impulsion laser femtoseconde

Soutenue publiquement le 16 novembre 2018 devant le jury composé de :

Pr. Bertrand AUDOIN	Professeur Université de Bordeaux	Président
Dr. Tatiana ITINA	Directeur de recherche CNRS	Rapporteur
Dr. Olivier UTÉZA	Directeur de recherche CNRS	Rapporteur
Dr. François COURVOISIER	Chargé de recherche CNRS	Examineur
Dr. Pierre-Henri MAIRE	Directeur de recherche CEA	Invité
Dr. Guillaume DUCHATEAU	Ingénieur-Chercheur CEA	Directeur de thèse
Dr. Benoît CHIMIER	Chargé de recherche CNRS	Co-directeur de thèse

Remerciements

Ce travail de thèse a été mené au Centre Laser Intense et Applications (CELIA, UMR5107) à Talence et co-financé par le CEA et la Région Nouvelle-Aquitaine que je remercie tout particulièrement.

Je remercie sincèrement Tatiana Itina et Olivier Utéza d'avoir accepté d'être les rapporteurs de cette thèse et pour l'attention qu'ils y ont portée. Je remercie également les autres membres du jury qui ont évalué ce travail : Bertrand Audoin, François Courvoisier et Pierre-Henri Maire.

Je tiens à remercier très sincèrement mon directeur et mon co-directeur de thèse, Guillaume Duchateau et Benoît Chimier, pour m'avoir offert l'opportunité de mener cette thèse et de m'avoir guidé tout au long de ces trois années. Leurs conseils avisés, leur disponibilité et leur soutien m'ont permis d'avancer efficacement et sereinement dans mon travail et je leur en suis très reconnaissant.

Je souhaite également remercier toutes les personnes qui ont participé à ce travail de thèse et qui m'ont aidé dans sa réalisation. Je pense notamment à Jérôme Breil, David Hébert, Rachel Nuter, John Lopez et Konstantin Mishchik.

Je voudrais exprimer ma gratitude à l'ensemble des personnes du CELIA pour leur convivialité et leur sympathie. Ces trois années dans ce laboratoire auront été une expérience enrichissante.

Je tiens à dire un grand merci à mes amis et collègues thésards, notamment, Alex, Antoine, Corentin, Maxime et Quentin. On a fait un bout de chemin ensemble durant trois ans et même plus pour certains. Nos routes se séparent aujourd'hui mais je garde l'espoir qu'elles se croiseront de nouveau un jour.

Je remercie du fond du coeur mes parents, ma soeur et toute ma famille pour leur soutien sans faille tout au long de ma vie et de mes études.

Enfin, je tiens à remercier Sophie qui est à mes côtés depuis plus de douze années maintenant. Son énergie, son soutien et son amour m'ont permis d'aborder la vie et mon travail de manière sereine. Elle est ma plus grande force.

Table des matières

Liste des notations principales	7
Introduction et contexte de l'étude	9
1 Modélisation des mécanismes physiques de la structuration par laser femtoseconde	17
1.1 Interaction laser-matériau diélectrique	20
1.2 Rhéologie des matériaux	30
2 Simulations Thermo-Élasto-Plastique de la formation de cavités dans la silice fondue	49
2.1 Etat de l'art expérimental et théorique	51
2.2 Evolution du code hydrodynamique CHIC et hypothèses de la simulation thermo-élasto-plastique	54
2.3 Simulations d'une cavité unique	58
2.4 Simulation de la formation de multiple cavités	73
3 Simulations de la structuration de la silice fondue par un faisceau de Bessel-Gauss femtoseconde	89
3.1 État de l'art expérimental et théorique de l'interaction de faisceaux de Bessel-Gauss avec les matériaux	91
3.2 Simulations du dépôt d'énergie induit par un faisceau de Bessel-Gauss dans la silice	94
3.3 Simulations Thermo-Élasto-Plastique de la déformation d'un volume de silice par un faisceau de Bessel-Gauss	105
Conclusion et perspectives	123
A Fonctions spéciales	129
B Modèles de viscoélasticité linéaire	131
C Critères de plasticité	135
D Validation de la diffusion de la chaleur monotempérature	137
E Modèle de prédiction du rayon de cavité final	139
Liste des communications	151

Liste des notations principales

Les notations en **gras** désignent des vecteurs.

Constantes physiques

$\hbar$	Constante réduite de Planck
ε_{perm}^0	Permittivité diélectrique du vide
μ_0	Perméabilité magnétique du vide
c	Vitesse de la lumière
k_B	Constante de Boltzmann
m_e	Masse (m_e)
e	Charge de l'électron

Paramètres laser

λ_L	Longueur d'onde
ω_L	Fréquence
I_L	Intensité
τ_L	Durée d'impulsion

Constantes du matériau

E_{BG}	Énergie de la bande interdite
T_F	Température de Fermi
n_{v0}	Densité initiale d'électrons de valence
n_0	Indice de réfraction linéaire
ρ_0	Densité initiale du matériau
c_V	Capacité thermique massique
E_{Young}	Module de Young
K	Module d'élasticité isostatique (<i>bulk modulus</i>)
ν	Coefficient de Poisson
Y_0	Limite élastique initiale
G_0	Module de cisaillement initial
Y_{LEH}	Limite élastique d'Hugoniot
L_t, L_c	Limite de résistance en traction (L_t) et en compression (L_c)

Interaction laser-matériau

$\mathbf{E}$	Champ électrique
$\mathbf{B}$	Champ magnétique
$\mathbf{D}$	Champ de déplacement électrique
$\mathbf{J}$	Densité de courant électrique
$\mathbf{J}_{ioni}$	Densité effective de courant d'ionisation
$\mathbf{P}_{polar}$	Vecteur polarisation
$\chi^{(i)}$	Tenseur de susceptibilité électrique d'ordre i
n_e	Densité électronique en bande de conduction
$\mathbf{v}_e$	Vecteur vitesse des électrons de conduction
E_e	Densité d'énergie électronique
P_e	Pression électronique
ν_e	Fréquence de collision totale des électrons
ν_{e-e}	Fréquences de collision électron-électron
ν_{e-i}	Fréquences de collision électron-ion
ν_{e-n}	Fréquences de collision électron-neutre
ν_{e-ph}	Fréquences de collision électron-phonon
ω_p	Fréquence plasma
n_c	densité critique du matériau
τ_{rec}	Temps de recombinaison des électrons
Ω	Taux d'ionisation total
Ω_{PI}	Taux de photoionisation
Ω_{IPI}	Taux d'ionisation par impact
γ	Paramètre d'adiabaticité de Keldysh
C_{ve}, C_{vi}	Capacité calorifique électronique (C_{ve}) et ionique (C_{vi})
T_e, T_L	Température électronique (T_e) et du réseau (T_L)

Hydrodynamique, mécanique et thermodynamique

σ	Contrainte mécanique en traction/compression
τ	Contrainte de cisaillement
ε	Déformation mécanique
ρ	Densité du matériau
$\bar{\sigma}$	Tenseur des contraintes de Cauchy
$\mathbf{U}$	Vecteur vitesse d'écoulement
e_{tot}, e_{int}	Énergies totale (e_{tot}) et interne (e_{int}) spécifiques
P	Pression thermodynamique
$\bar{\bar{S}}$	Tenseur déviateur des contraintes
$\bar{\bar{D}}, \bar{\bar{D}}_0$	Tenseur taux de déformation ($\bar{\bar{D}}$) et sa partie déviatorique ($\bar{\bar{D}}_0$)
$\bar{\bar{D}}^p$	Tenseur taux de déformation plastique
$\bar{\bar{W}}$	Partie antisymétrique du gradient des vitesses
Y, G	Limite élastique (Y) et module de cisaillement (G) du matériau
η	Viscosité dynamique
λ_{th}	Conductivité thermique

Introduction et contexte de l'étude

*« Apprends à reconnaître
lorsqu'il est important de ne pas
se précipiter. Cours lorsqu'être
le premier est important ; avance
à ton rythme sinon. Il n'est pas
nécessaire de toujours porter le
premier coup, de fournir la
première solution, ou d'atteindre
un but avant tout le monde. En
fait, il est parfois vital de porter
le dernier coup, de fournir la
dernière réponse, ou d'arriver
après tout le monde. »*

Maître Wiwa - Instructrice Jedi
de l'Ancienne République

En 1950, plusieurs dizaines d'années après la description du principe d'émission stimulée par Albert Einstein [1, 2], Alfred Kastler (prix Nobel de physique en 1966) met au point un système de pompage optique essentiel à l'élaboration d'un laser. En 1953, le premier Maser, source de lumière stimulée dans le domaine micro-onde et ancêtre du laser, est conçu [3]. En 1960, Théodore Maiman obtient la première émission laser nanoseconde à l'aide d'un cristal de rubis placé dans une cavité optique [4]. Dès 1963, la génération de chocs par laser, de l'ordre de quelques GPa à l'intérieur d'un métal, est observée [5]. En 1964, Hargrove *et al.* [6] mettent au point une méthode de blocage de mode de cavité obtenant ainsi des impulsions sub-nanosecondes. Dès lors, les lasers ont trouvé rapidement des applications industrielles et technologiques. En 1965, une première application voit le jour, consistant à percer des cristaux de diamant, matière la plus dure connue, avec un laser à rubis [7]. Différentes applications, telle que la découpe par laser de plaques de métal, sont mises au point. À la fin des années 1970, ces procédés sont introduits en milieu industriel et le laser devient un outil indispensable en micro-usinage, dû à sa grande vitesse d'opération, sans contact et sans usure [7]. Dans les années 1980, l'élaboration de différentes techniques et systèmes optiques ont permis d'abaisser encore les durées d'impulsions, jusqu'aux échelles de temps de la femtoseconde, avec notamment l'apparition du CPM (Colliding Pulse Mode-locked laser) [8]. Cependant, avec la diminution de la durée d'impulsion, les puissances crêtes des impulsions lasers pouvaient atteindre une centaine de GW et endommageaient les milieux amplificateurs. Une méthode appelée « *amplification à dérive de fréquence* » a donc été développée [9], consistant en l'étirement, l'amplification, puis la recompression des impulsions, afin d'éviter ce problème. Ainsi sont apparus les lasers sub-picosecondes.

Les lasers couvrent aujourd'hui un vaste domaine d'applications, dont quelques exemples sont mentionnés ci-après. De manière fondamentale, les impulsions lasers ultra-brèves sub-picosecondes avec une intensité modérée permettent l'observation des dynamiques moléculaire et atomique. En outre, l'observation de ces dynamiques microscopiques donne accès à l'étude des réactions chimiques, des changements de phase et des phénomènes collisionnels. La technologie laser a en particulier servi à l'étude de systèmes quantiques. Notamment, Serge Haroche et David J. Wineland, colauréats du prix Nobel 2012, ont mis au point des méthodes expérimentales permettant la mesure et la manipulation de systèmes quantiques individuels. En particulier, ils ont été capables de piéger un photon unique dans une cavité et de l'observer sans le détruire. Ils ont ainsi pu observer le phénomène de décohérence quantique et ont démontré la possibilité d'opérations de logique quantique ouvrant la voie à de nouvelles méthodes de traitement de l'information [10].

Plus récemment, les américains Rainer Weiss, Barry C. Barrish et Kip Thorne, ont été récompensés d'un prix Nobel en 2017 pour leur contribution dans l'observation des ondes gravitationnelles, sources de déformations de l'espace-temps, prédites par la relativité générale d'Einstein. Cette observation a été rendue possible avec l'élaboration d'une expérience d'interférométrie particulière, nommée LIGO (Laser Interferometer Gravitational-Wave Observatory) [11]. De manière simplifiée, un laser Nd :YAG à 1064 nm est séparé en deux faisceaux qui se propagent dans les deux bras de l'interféromètre longs de 4 km. Au bout de ceux-ci, les deux faisceaux sont réfléchis et interfèrent, donnant lieu à une figure d'interférence particulière. Le passage d'une onde gravitationnelle dans l'un des bras modifie la longueur de celui-ci et change alors la figure d'interférence. Ainsi peuvent être détectées ces ondes.

Les lasers femtosecondes sont également un outil précis, intéressant pour micro-structurer les solides et les études menées tout au long de cette thèse ont notamment pour objectif de comprendre et décrire les phénomènes physiques prenant place dans ce domaine d'application particulier. Ces lasers sont utilisés pour la découpe, la soudure, le marquage et l'ablation par laser des matériaux mais ils trouvent aussi des applications en photonique pour la fabrication de réseaux de diffraction, pour la formation de guides d'onde [12–14] ou encore pour le stockage de données optiques dans le volume des matériaux transparents [15–20]. Cette dernière application, notamment, consiste à fortement focaliser une impulsion laser ultra-courte à l'intérieur d'un matériau transparent pour créer des changements structuraux localisés et permanents, modifiant ainsi l'indice de réfraction. Les structures formées sont généralement des cavités dont les diamètres sub-micrométriques donnent lieu à de hauts contrastes de l'indice de réfraction. Ce processus est alors utilisé pour enregistrer des informations numériques (des bits de données), en trois dimensions, en marquant plusieurs plans dans la matière tels qu'illustrés Fig. 1. L'utilisation, par la suite, d'un second laser permet la *lecture* des informations contenues dans le volume avec l'analyse de la lumière transmise. Cette méthode, applicable dans différents matériaux transparents, a l'avantage de pouvoir stocker de grandes quantités de données dans un volume restreint (de l'ordre de 10^{13} à 10^{15} bits/cm³).

De nos jours, de nouvelles applications de micro-structuration des matériaux, de plus en plus complexes et prometteuses, continuent encore d'être développées [21–35]. Lorsqu'un laser femtoseconde est focalisé en surface ou en volume d'un diélectrique, l'énergie qu'il dépose, très localisée au niveau de la tache focale, est suffisante pour modifier la matière en l'échauffant très rapidement [16, 17]. Un plasma surdense, avec une densité électronique supérieure à la densité critique du matériau, est produit et entouré de matière froide et solide (les temps de diffusion de la chaleur étant de l'ordre de la micro-seconde).

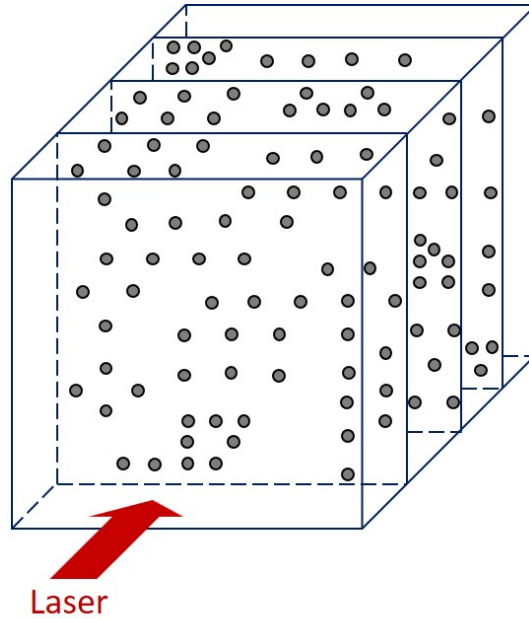


FIGURE 1 – Illustration schématique du stockage de données optique 3D. Un laser est focalisé dans le volume de matériau et génère des changements structurels permanents selon des motifs particuliers (écriture). Puis l'analyse de la lumière transmise par un second laser de moindre intensité au travers du volume permet la lecture des informations contenues dans celui-ci.

Puis, bien après le passage de l'impulsion, sur une échelle de temps de la pico-seconde, le plasma, en se détendant, va induire un choc avec des pressions de l'ordre de plusieurs GPa jusqu'au TPa [16, 17]. Celui-ci va alors déformer le solide et induire, en fonction du matériau et de son amplitude, des modifications permanentes voire des fractures si le processus n'est pas maîtrisé.

La compréhension des mécanismes de l'interaction laser-matière et des phénomènes de relaxation modifiant les structures irradiées est aujourd'hui un enjeu majeur dans de nombreux domaines. La modélisation et la simulation numérique, dans la description de la propagation d'un laser dans le matériau et de la déformation de la matière, sont alors cruciales. La matière solide, excitée par une source lumineuse délivrée par un laser intense, va voir ses propriétés intrinsèques être modifiées par un ensemble de mécanismes, évoluant sur des échelles de temps allant de quelques femtosecondes à plusieurs nanosecondes, voir microsecondes (Fig. 2). Quelques centaines de femtosecondes d'abord suffisent aux électrons, bien plus légers et faciles à mettre en mouvement que les ions, pour absorber l'énergie véhiculée par les photons de l'impulsion laser. Quelques picosecondes ensuite sont nécessaires pour transférer toute l'énergie absorbée aux ions du réseau cristallin, précédemment immobiles et imperturbés. Une modélisation de ces phénomènes est possible par la résolution des équations de Maxwell couplée à la description de la dynamique électronique afin de prédire le dépôt d'énergie, *i.e.* la carte de température dans le matériau, en fonction des paramètres du laser et des propriétés optiques et électroniques du matériau. La matière chauffée et dans un état instable va alors opérer différents changements de phase, arborant différents comportements afin de relaxer l'énergie laser absorbée et retrouver un nouvel état d'équilibre. Sur plusieurs dizaines et centaines de picosecondes, interviennent les processus hydrodynamiques et mécaniques. Le réseau ionique se met en mouvement

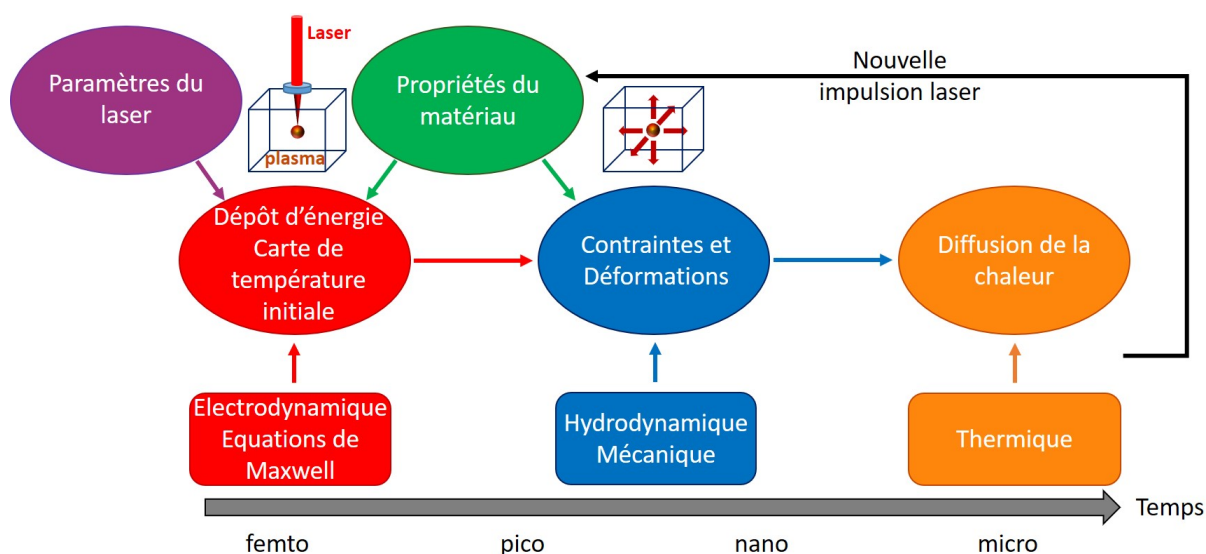


FIGURE 2 – Schéma montrant le caractère multi-physique et multi-échelle de l'interaction laser-solide.

sous l'effet du dépôt d'énergie et, en fonction des paramètres du matériau, la matière va subir plusieurs changements de phase et se déformer mécaniquement jusqu'à se stabiliser après quelques nanosecondes ou plus en fonction de la durée de l'impulsion laser et de son énergie. Enfin, sur l'échelle de temps de la microseconde (dans le cas des diélectriques notamment) prennent place les phénomènes de diffusion de la chaleur. Le matériau retourne à un état d'équilibre et subit une resolidification. Dans le cas des lasers femtosecondes, la durée d'impulsion (dépôt d'énergie) étant inférieure aux temps de relaxation évoqués ci-dessus, le dépôt d'énergie peut être découplé des phénomènes hydrodynamiques et de diffusion de la chaleur.

Plusieurs travaux théoriques et numériques significatifs ont été menés depuis les années 1990 sur l'étude de la modification des matériaux transparents par laser femtoseconde. Des travaux ont d'abord été menés en ne considérant qu'un comportement fluide de la matière irradiée [17–19], puis en considérant les propriétés mécaniques de la matière solide [36–41]. Bien que les travaux expérimentaux aient donné lieu à de nombreux procédés technologiques et applications, les méthodes numériques de simulation reproduisant l'ensemble des phénomènes et des processus en jeu sont encore peu développées. Pourtant un besoin important de ce type de simulations est nécessaire dans l'élaboration et l'optimisation de procédés laser ou plus fondamentalement dans la compréhension de l'interaction laser-matière. C'est dans ce cadre et sur cette base de connaissances que s'inscrit cette thèse qui a pour but la description de la structuration des matériaux solides diélectriques par laser femtoseconde au travers du développement d'un outil numérique multi-physique et multi-échelles tel que présenté Fig. (2). En particulier, il rend compte du comportement mécanique du solide. Les différents phénomènes et modèles seront abordés et couplés afin de décrire différents scénarios d'interaction entre un laser femtoseconde et un matériau diélectrique tel que la silice fondue (amorphe). Pour des raisons de simplicités cette dernière ne sera plus qualifiée de fondue dans la suite du manuscrit.

Ce document est divisé en trois chapitres principaux dépendant les uns des autres. Le premier chapitre donne une vue d'ensemble des phénomènes physiques en jeu et des modèles utilisés pour la simulation de l'interaction laser-matière et de la déformation

du solide. Dans un premier temps, les différents types de milieux solides sont introduits, avec notamment les définitions des milieux conducteurs, semi-conducteurs et diélectriques. Puis, la propagation de l'impulsion laser est traitée via la résolution des équations de Maxwell en 3D sans approximations dans un milieu diélectrique. Dans le cadre d'une impulsion laser ionisante, la conservation de l'énergie totale amène à considérer, en plus de la densité de courant standard, une densité de courant d'ionisation. Ces deux courants, dépendants notamment de la densité et de la vitesse des électrons, de la valeur de la bande interdite du matériau et du taux de photoionisation, une modélisation de la dynamique électronique du matériau est alors nécessaire. Ainsi sont présentés les modèles de Keldysh pour la photoionisation et de Peñano pour le phénomène d'ionisation collisionnelle, ainsi que les processus de recombinaison. Tout cela amène alors à l'établissement du dépôt d'énergie par un laser femtoseconde dans un milieu diélectrique tel que le verre. Dans un deuxième temps, les réponses hydrodynamique et mécanique du solide, suite à la densité d'énergie absorbée dans le milieu, sont abordées. Tout d'abord, les différentes ondes mécaniques s'établissant dans le solide sont introduites et définies. Puis les différentes lois de comportements employées sont exposées. Notamment, les comportements visco-élastique et élasto-plastique sont présentés. La modélisation des mouvements hydrodynamiques est ensuite présentée. Le comportement thermique du matériau avec la prise en compte des transitions de phases solide-liquide sont ensuite abordés. Enfin, un modèle de prédiction de rupture dans le matériau est proposé.

Le deuxième chapitre présente une analyse de la formation de cavités dans un volume de silice, dû au dépôt d'un laser femtoseconde fortement focalisé. La visée principale de cette première étude étant de décrire les phénomènes généraux de la génération de cavités par laser femtoseconde et de démontrer l'importance de la prise en compte du comportement solide du matériau, le dépôt d'énergie n'est pas calculé par la résolution des équations de Maxwell, par les calculs de taux d'ionisation et par le calcul d'un terme de chauffage. Celui-ci n'a pas de conséquences majeures sur les effets présentés dans le cadre de cette première application. Il a donc été simplifié et constitue une condition initiale de la simulation, puisque son étude peut-être découplée des phénomènes hydrodynamiques (échelles de temps différentes) comme expliqué précédemment. Dans un premier temps, les observations expérimentales de la formation de cavités sont présentées. Celles-ci renseignent sur les paramètres des simulations et les comportements attendus du matériau. Puis, un rappel des hypothèses du modèle est fait. Notamment, le comportement idéal élasto-plastique de la silice est justifié dans le cadre de cette application. La géométrie gaussienne du faisceau et la géométrie 2D planaire de la simulation sont également justifiées. Dans un deuxième temps, la simulation de la formation d'une unique cavité dans la silice est présentée. Tout d'abord, une simulation en 1D avec le modèle élasto-plastique est comparée à une approche plus simplifiée d'un modèle fluide standard sans prise en compte du comportement solide. Les différences observées sont alors détaillées. Le cas 2D est ensuite abordé, où les différentes étapes et comportements donnant lieu à la création d'un vide de matière sont étudiés et comparés aux observations expérimentales, afin de valider les hypothèses et le modèle présenté dans le chapitre précédent. Puis, le modèle de rupture du matériau est appliqué au cas de la formation d'une cavité unique dans la silice, avec un calcul de la probabilité de fracture du matériau via la loi de Weibull. Dans une dernière partie, les simulations de la formation de multiples cavités dans la silice sont présentées. Le cas simplifié de la formation simultanée de deux cavités est d'abord analysé avec la description des interactions entre les ondes de choc en fonction de la distance les séparant. Les conséquences sur les probabilités de fracture dans le matériau sont alors

calculées. Puis, ce cas est étendu à la formation de plusieurs cavités voisines selon deux régimes de dépôt d'énergie. Tout d'abord, le cas de la formation simultanée de plusieurs cavités est décrit. Puis, le cas de la formation successive de plusieurs cavités voisines est étudié. Des changements dans les interactions entre les ondes de choc sont observés, menant alors à des différences significatives quant aux déformations et aux fractures potentielles générées dans le matériau.

Dans le troisième et dernier chapitre sont montrées les simulations de la structuration d'un volume de silice par un faisceau de Bessel. Dans un premier temps, l'état de l'art expérimental et théorique est présenté dans le cadre de cette application. Les observations expérimentales nous renseignent là encore sur les comportements attendus et les paramètres initiaux des simulations. Dans un deuxième temps, les simulations de l'évaluation du dépôt d'énergie, généré par un faisceau de Bessel-Gauss avec différentes intensités et durées d'impulsion, sont décrites. Ces deux paramètres ont, en effet, pour une géométrie donnée du faisceau, des conséquences significatives sur les champs de températures obtenus dans le matériau et donc sur les déformations attendues par la suite. Dans une dernière partie, les simulations thermo-élasto-plastiques de la modification d'un volume de silice par des faisceaux de Bessel-Gauss sont décrites. Celles-ci sont réalisées avec les différents dépôts d'énergie évalués dans différentes conditions physiques, telles que la durée d'impulsion ou encore l'intensité initiale, pour lesquelles des changements dans la morphologie des structures obtenues sont observés. Enfin, le modèle de rupture du matériau est appliqué dans chacun des cas par le calcul des probabilités de fracture du matériau.

Le document se termine par une conclusion, résumant l'ensemble des résultats majeurs obtenus. Puis des perspectives sont proposées, donnant suite aux études menées tout au long de cette thèse ainsi qu'au code de simulation développé. Un ensemble d'annexes sont répertoriées également, permettant d'appuyer certains points évoqués tout au long du document. Enfin, une liste des références bibliographiques utilisées, ainsi qu'une liste des communications issues de ce travail de thèse sont situées à la fin du manuscrit.

Chapitre 1

Modélisation des mécanismes physiques de la structuration par laser femtoseconde

« Il n'y a pas d'ignorance, il y a la connaissance. »

Maître Odan-Urr - 2ième
principe du Code Jedi

Sommaire

1.1	Interaction laser-matériau diélectrique	20
1.1.1	Propagation d'une impulsion laser dans un milieu diélectrique .	21
1.1.2	Dynamique électronique sous flux laser	22
1.1.3	Mécanismes d'ionisation et de recombinaison électronique . . .	24
1.1.4	Chauffage du réseau	28
1.2	Rhéologie des matériaux	30
1.2.1	Ondes mécaniques	30
1.2.2	La viscoélasticité	32
1.2.3	Réponse élasto-plastique	34
1.2.4	Modélisation des mouvements hydrodynamiques	35
1.2.5	Traitement des transitions de phases	38
1.2.6	Modèle de prédiction de rupture des matériaux	40

Lorsqu'un laser se propage dans la matière, une partie de son énergie est absorbée par cette dernière au cours de sa propagation, résultant en la modification de celle-ci. L'énergie laser peut être quantifiée par un ensemble de photons, « *grains de lumières* », d'énergie $\hbar\omega_L$, où $\hbar$ est la constante de Planck réduite et $\omega_L = \frac{2\pi c}{\lambda_L}$ est la fréquence du laser liée à sa longueur d'onde λ_L . Ce sont eux qui, en étant absorbés par les électrons du milieu, vont contribuer à l'excitation du solide. Trois types différents de solide peuvent être

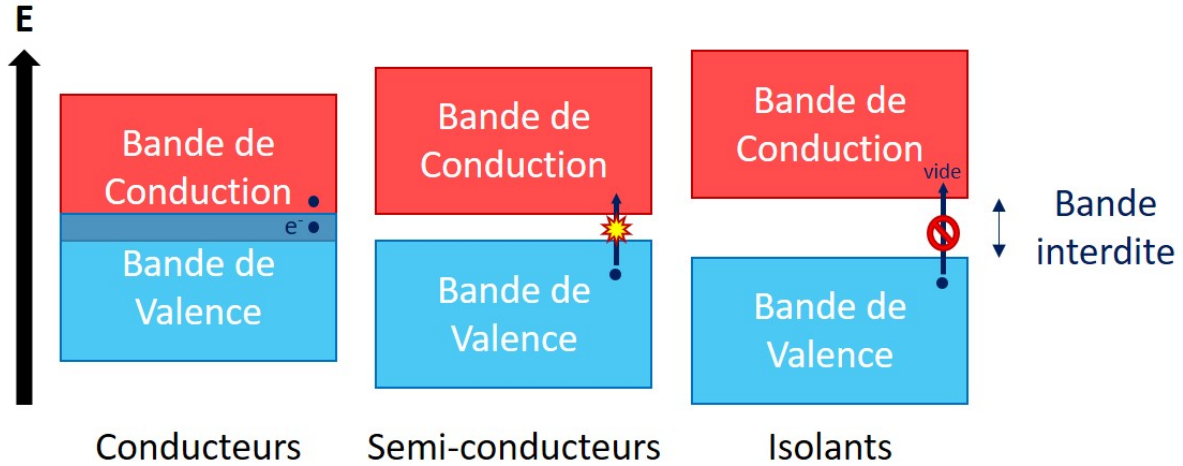


FIGURE 1.1 – Schéma illustratif de la structure de bande des matériaux en fonction du type de solide. Les conducteurs (métaux) n'exhibent pas de bande interdite, les bandes de valence et de conduction se recouvrant. Pour les deux autres types de solides la bande de valence est pleine et séparée de la bande de conduction par une bande interdite. Pour les semi-conducteurs cette bande interdite est faible, de l'ordre de quelques eV. L'absorption d'un photon suffit généralement à un électron de valence pour être porté en bande de conduction. Dans le cas des diélectriques, la bande interdite est beaucoup plus importante, de 3 à 12 eV environ. Leur bande de conduction est vide sans excitation extérieure. L'absorption simultanée de plusieurs photons est nécessaire à un électron de valence pour atteindre la bande de conduction.

définis : les conducteurs, les semi-conducteurs et les isolants. Chacun de ces matériaux possède une structure de bande, dépendante de sa nature [42]. Il existe deux bandes principales d'énergie permises distinctes : les bandes de valence et de conduction (Fig. 1.1). La bande de valence correspond à la dernière bande d'énergie remplie par les électrons. La bande d'énergie permise juste supérieure à la bande de valence correspond à la bande de conduction. Selon le type de matériau, ces deux bandes sont séparées ou non d'une bande interdite, dépourvue de niveaux d'énergie permis pour les électrons. La valeur en énergie de cette bande interdite, dépendante de la température du matériau, est définie par la différence entre l'énergie maximum de la bande de valence et l'énergie minimum de la bande de conduction et caractérise la nature même du matériau. Tandis que les matériaux diélectriques de nature isolants ont une valeur en énergie de leur bande interdite importante (entre 3 eV et 12 eV environ selon le matériau), laissant vide la bande de conduction, les métaux conducteurs ont une bande interdite inexistante, les bandes de valence et de conduction se recouvrant. La bande de conduction est donc toujours peuplée. Les matériaux semi-conducteurs ont une bande interdite intermédiaire avec des valeurs de l'ordre de quelques eV (à 0 K, la bande de conduction est vide et un semi-conducteur devient un isolant). Dans le cas d'une excitation par un laser des semi-conducteurs et

des isolants, des électrons peuvent être promus en bande de conduction. Dans ce cas, le matériau, au niveau de la zone d'éclairement du laser, tend vers un comportement métallique. Selon le type de matériau, l'ionisation de la matière va dépendre de cette structure de bande et conduire à différents processus dans l'interaction laser-matière qui consiste en un ensemble de phénomènes physiques complexes et couplés [43].

Dans le cas particulier de l'interaction d'un laser femtoseconde avec un matériau diélectrique tel que la silice, ces différents processus physiques sont tels que présentés sur la Fig. 1.2. Tout d'abord, en quelques dizaine de femtosecondes et durant toute la durée

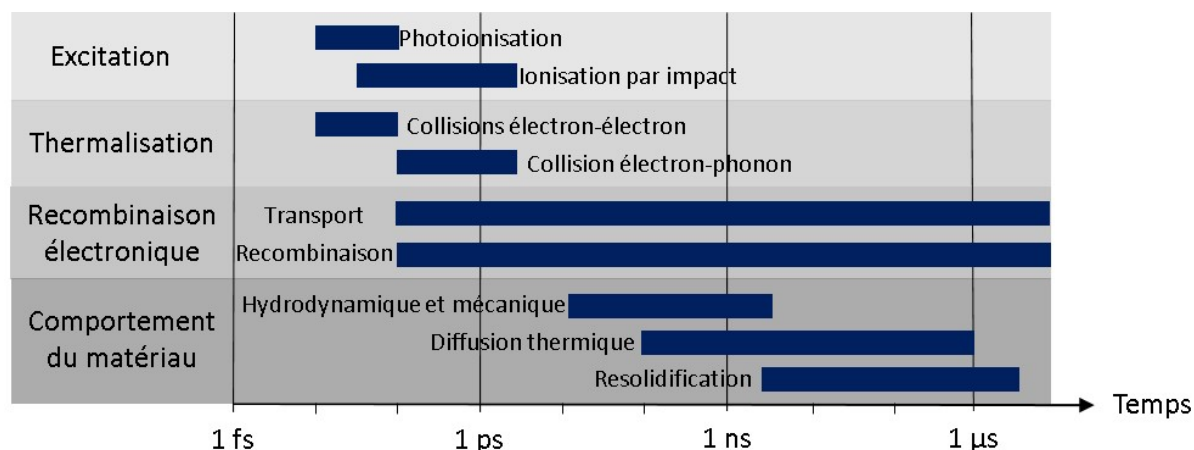


FIGURE 1.2 – Echelles de temps des différents processus physiques en jeu lors de l'interaction d'un laser femtoseconde avec un matériau diélectrique. Dans les premiers instants de l'interaction, entre 10 fs et quelques picosecondes prennent place les phénomènes d'ionisation (excitation du matériau), ainsi que les phénomènes de thermalisation via les collisions électron-électron et électron-phonon. Puis entre 10 ps et plusieurs microsecondes s'inscrivent les processus hydrodynamique et mécanique, les phénomènes de diffusion de la chaleur et de resolidification du matériau. Enfin, en fonction du matériau, les phénomènes de recombinaison et de transport électroniques recouvrent un intervalle de temps important, entre 100 fs et plusieurs microsecondes.

de l'impulsion interviennent les phénomènes de photoionisation (ionisation multiphotonique et par effet tunnel) et d'ionisation par impact qui vont porter les électrons de la bande de valence en bande de conduction. Par la suite, différents processus collisionnels vont permettre aux électrons de se thermaliser. Sur des temps allant de quelques dizaines à centaines de femtosecondes, par collisions électron-électron, ceux-ci vont répartir leurs énergies entre eux et donner lieu à une température électronique moyenne, tandis que des phénomènes de recombinaison et de transport électroniques prennent place, en fonction du matériau, entre une centaine de femtosecondes jusqu'à des échelles de temps plus longues, autour de la microseconde. Puis, sur une échelle de temps allant de quelques centaines de femtosecondes à quelques picosecondes, au travers de collisions électron-phonon, les électrons vont transférer cette énergie au réseau ionique, élevant ainsi sa température. L'élévation de la température du matériau dans la zone d'éclairement du laser va ensuite entraîner des changements de phases et des déformations de la matière par relaxation hydrodynamique et mécanique. Ces processus nécessitant un chauffage du réseau suffisant, ils ne deviennent prépondérants qu'une dizaine de picosecondes après le dépôt d'énergie par laser. La matière atteint ensuite un état d'équilibre en quelques nanosecondes. Enfin,

pour des temps variant de la centaine de picosecondes jusqu'à quelques microsecondes, la chaleur est relaxée au travers de processus de diffusion thermique. En fonction de l'énergie déposée et du seuil d'endommagement du matériau, des déformations permanentes ou encore des fractures peuvent apparaître [44, 45].

Dans le cas d'impulsions lasers dont la durée est de l'ordre de 100 fs, c'est à dire inférieures aux principaux temps de relaxation de la matière (changements de phases, déformation du matériau et diffusion de la chaleur), les phénomènes physiques donnant lieu à un dépôt d'énergie et les processus de modification de la matière peuvent être traités de manière indépendantes. Ainsi, ce chapitre se divise en deux parties principales, une première traitant de la physique et de la modélisation de l'interaction laser-diélectrique et présentant les différents phénomènes et processus conduisant aux dépôt d'énergie dans le solide ; une deuxième abordant les comportements mécaniques et hydrodynamiques des matériaux solides. C'est par la connaissance de l'ensemble de ces phénomènes physiques et de leurs modélisations que les études menées dans les chapitres suivants seront aptes à reproduire les scénarios de l'interaction laser-matière.

1.1 Interaction laser-matériau diélectrique

La détermination de l'énergie laser déposée dans le matériau est le premier point crucial pour effectuer une étude rigoureuse de la structuration d'un matériau diélectrique par une impulsion laser, tous les phénomènes suivants dans la chaîne de processus physiques (hydrodynamique, déformations mécaniques, changements de phase, diffusion de la chaleur, ...) découlant de cette donnée. Pour se faire, la connaissance de la valeur en tout point de l'espace du champ électromagnétique du faisceau laser, ainsi que la valeur de la densité d'électrons en bande de conduction qui évolue localement au cours du temps, sont nécessaires. En effet, le champ laser, se propageant dans le milieu, induit une augmentation du nombre d'électrons de conduction (ionisation) au niveau de la zone d'éclairement, pouvant mener à l'apparition ou non d'un plasma surcritique (population électronique supérieure à la densité critique du matériau). Cette modification de densité électronique conduit à l'apparition d'une polarisation dans le milieu et de son courant associé, modifiant alors à leurs tour la propagation du champ laser et impliquant donc un dépôt d'énergie fortement lié à ces deux paramètres. Un modèle Maxwell-Fluide est alors utilisé pour déterminer la propagation de l'impulsion laser dans le matériau couplée au calcul de la variation de densité d'électrons.

Dans un premier temps, les équations de Maxwell sont définies dans le cas de la propagation d'une impulsion laser dans un matériau diélectrique. Les expressions des courants d'ionisation et d'oscillation des électrons dans le champ laser sont données. De plus, les différents effets liés à la polarisation induite dans le matériau par l'impulsion laser sont discutés. Dans un deuxième temps, le modèle fluide permettant de prédire la dynamique électronique est présenté, ainsi que les différentes hypothèses faites dans le cadre de cette thèse, amenant à une simplification des équations. Dans un troisième temps, les différents mécanismes d'ionisation et de recombinaison prenant place lors de l'interaction laser-diélectrique sont décrits et les modèles utilisés dans le calcul du taux d'ionisation sont notamment introduits. Enfin, dans une dernière partie, les processus de chauffage du réseau sont détaillés et la relation fournissant la température du réseau en fonction de l'énergie laser absorbée par les électrons est exprimée au travers du modèle à deux températures.

1.1.1 Propagation d'une impulsion laser dans un milieu diélectrique

Lors de l'injection d'un champ électromagnétique dans un matériau, caractérisé par une permittivité diélectrique ε_{perm} et une perméabilité magnétique supposée égale à celle du vide μ_0 (milieu dépourvu de propriétés magnétiques), l'évolution du champ électrique $\mathbf{E}$, du champ de déplacement électrique $\mathbf{D}$ et du champ magnétique $\mathbf{B}$, *i.e.* la propagation de l'impulsion laser dans le matériau, sont décrits par les équations de Maxwell :

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = n_{charge} \quad (1.2)$$

$$\mu_0^{-1} \nabla \times \mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J} + \mathbf{J}_{ioni} \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.4)$$

où n_{charge} est une densité de charge, supposée nulle (à $t = 0$) dans cette étude. Il est à noter que seules les Eqs. (1.1) et (1.3) sont résolues de sorte à vérifier les Eqs. (1.2) et (1.4) au cours du temps. $\mathbf{J}$ et $\mathbf{J}_{ioni}$ sont, respectivement, la densité de courant due à l'oscillation des électrons libres dans le champ électrique $\mathbf{E}$ et la densité de courant effective due à la photoionisation du matériau par le laser. La densité de courant électrique a pour expression :

$$\mathbf{J} = -en_e \mathbf{v}_e \quad (1.5)$$

avec e , n_e et $\mathbf{v}_e$, respectivement la charge des électrons, la densité électronique en bande de conduction et la vitesse d'oscillation des électrons dans le champ laser. La densité de courant d'ionisation est donnée par la relation [46] satisfaisant la loi de conservation de l'énergie totale :

$$\mathbf{J}_{ioni} = -\frac{\mathbf{E}}{|\mathbf{E}|^2} E_{BG} \Omega_{PI} \quad (1.6)$$

où Ω_{PI} est le taux de photoionisation et E_{BG} est la valeur en énergie de la bande interdite, *i.e.* l'énergie d'ionisation du matériau.

Le déplacement électrique $\mathbf{D}$ est calculé avec la relation suivante :

$$\mathbf{D} = \varepsilon_{perm}^0 \mathbf{E} + \frac{n_v}{n_{v0}} \mathbf{P}_{polar} \quad (1.7)$$

avec ε_{perm}^0 la permittivité du vide, n_v la densité d'électrons de valence, n_{v0} la densité d'électrons de valence initiale et $\mathbf{P}_{polar}$ le vecteur polarisation. Il est à noter que lorsque le rapport $\frac{n_v}{n_{v0}}$ dans l'Eq. (1.7) devient nul, *i.e.* lorsque l'ensemble des électrons sont portés en bande de conduction par le laser, le matériau devient un plasma et n'exhibe plus de polarisation. Dans ce cas $\mathbf{D} = \varepsilon_{perm}^0 \mathbf{E}$. De plus, comme évoqué précédemment, lorsqu'un champ électrique interagit avec la matière, celle-ci est susceptible de le modifier et une polarisation apparaît alors. Le vecteur polarisation $\mathbf{P}_{polar}$ s'écrit de manière générale comme :

$$\mathbf{P}_{polar} = \mathbf{P}_{polar}^{(1)} + \mathbf{P}_{polar}^{(2)} + \mathbf{P}_{polar}^{(3)} + \dots \quad (1.8)$$

où $\mathbf{P}_{polar}^{(i)}$ est la polarisation d'ordre i . Celle-ci est reliée au champ électrique $\mathbf{E}$ selon l'expression suivante :

$$\mathbf{P}_{polar}^{(i)}(\omega_1 + \dots + \omega_i) = \varepsilon_{perm}^0 \chi^{(i)}(\omega_1, \dots, \omega_i) \mathbf{E}(\omega_1) \dots \mathbf{E}(\omega_i) \quad (1.9)$$

où $\chi^{(i)}$ est le tenseur de susceptibilité électrique d'ordre i du matériau, prenant en compte ses différentes réponses non-linéaires [47]. Au premier ordre, domaine de l'optique linéaire, l'expression classique de la polarisation est : $\mathbf{P}_{polar}^{(1)}(\omega) = \varepsilon_{perm}^0 \chi^{(1)}(\omega) \mathbf{E}(\omega)$. La fréquence de l'onde modifiée dans le matériau est identique à la fréquence de l'onde initiale et les effets observés sont notamment la réfraction et la biréfringence linéaire. Au deuxième ordre, $\mathbf{P}_{polar}^{(2)}(\omega_1 + \omega_2) = \varepsilon_{perm}^0 \chi^{(2)}(\omega_1, \omega_2) \mathbf{E}(\omega_1) \mathbf{E}(\omega_2)$, donnant lieu à des effets non-linéaires tels que la génération de seconde harmonique (cas où $\omega_1 = \omega_2$) ou encore l'effet Pockels, qui est un cas de biréfringence induite par le champ lui-même dans le matériau et proportionnelle à celui-ci. Enfin, au troisième ordre, $\mathbf{P}_{polar}^{(3)}(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) = \varepsilon_{perm}^0 \chi^{(3)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) \mathbf{E}(\omega_1) \mathbf{E}(\omega_2) \mathbf{E}(\omega_3)$, donnant lieu par exemple à la génération de troisième harmonique ou encore à l'effet Kerr, qui est également un cas de biréfringence induite mais cette fois-ci proportionnel au carré du champ, *i.e.* proportionnel à son intensité I_L . Cet effet est notamment à l'origine du phénomène d'auto-focalisation des faisceaux qui peut produire une filamentation du laser lors de sa propagation dans un milieu transparent. Ceci est dû à la génération d'une variation radiale de l'indice de réfraction du milieu dû à l'effet Kerr : $n(r) = n_0 + n_2 I_L(r)$ où n_0 est l'indice de réfraction linéaire et n_2 l'indice de réfraction de second ordre et proportionnel à la susceptibilité de troisième ordre $\chi^{(3)}$. L'auto-focalisation se produit lorsque le déphasage associé à l'effet Kerr est au moins égal au déphasage associé à la diffraction du faisceau, empêchant ce dernier de diverger.

Afin de résoudre le système d'équation, les courants précédemment exprimés nécessitent la connaissance de l'évolution de la densité électronique et de la vitesse d'oscillation des électrons $\mathbf{v}_e$, *i.e.* de la dynamique électronique dans le matériau.

1.1.2 Dynamique électronique sous flux laser

En considérant l'ensemble des électrons comme un gaz homogène thermalisé avec une température moyenne électronique T_e , leur densité, leur vitesse et leur énergie peuvent être déterminées via les équations de conservation d'Euler [48, 49]. Le gaz d'électrons est dans ce cas décrit par un modèle fluide qui s'écrit, sous forme Eulérienne, de la manière suivante :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot (n_e \mathbf{v}_e) = \Omega \quad (1.10)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_e}{\partial t} + \mathbf{v}_e \nabla \cdot \mathbf{v}_e = -\frac{e}{m_e} \mathbf{E} - \frac{\nabla P_e}{n_e m_e} - \nu_e \mathbf{v}_e \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial E_e}{\partial t} + \nabla \cdot (E_e \mathbf{v}_e + P_e \mathbf{v}_e) = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} - \Gamma E_{BG} \Omega_{IPI} - \frac{E_e}{\tau_{rec}} + \frac{1}{2} m_e v_e^2 \frac{\partial n_e}{\partial t} \quad (1.12)$$

avec m_e , P_e et E_e , respectivement, la masse de l'électron, la pression et la densité d'énergie électroniques. Ω , Ω_{IPI} et τ_{rec} sont, respectivement, les taux d'ionisation total (terme source) et par impact et le temps moyen de recombinaison d'un électron de conduction. Ces grandeurs et les phénomènes associés sont expliqués plus bas. Γ est, quant à elle, une constante tenant compte du fait que, dues aux autres excitations électroniques, il est en moyenne nécessaire que l'énergie d'ionisation par impact soit supérieure à E_{BG} [46]. Dans l'Eq. (1.12), le premier terme à droite de l'égalité représente le chauffage ohmique des électrons par le laser. Les deuxième et troisième termes, quant à eux, prennent en compte, respectivement, l'énergie perdue par les électrons due à l'ionisation collisionnelle définie plus bas et la relaxation de l'énergie par recombinaisons électroniques. Le quatrième terme rend compte de l'énergie cinétique gagnée par les électrons nouvellement créés supposés osciller instantanément dans le champ laser à la même vitesse que les autres électrons

de conduction, en accord avec la conservation de l'énergie. Enfin, ν_e est la fréquence de collision totale des électrons. De manière générale, cette fréquence est la somme des fréquences de collision électron-ion, électron-neutre, électron-phonon et électron-électron : $\nu_e = \nu_{e-n} + \nu_{e-i} + \nu_{e-ph} + \nu_{e-e}$. Cette fréquence de collision est, cependant, dépendante de la température électronique, ce qui entraîne, en fonction de celle-ci, des fréquences de collisions prépondérantes devant les autres. A basse température, c'est à dire en dessous de la température de Fermi T_F ($k_B T_F$ de l'ordre de quelques eV), les électrons sont partiellement dégénérés et les collisions électron-phonons dominent. Pour des températures supérieures à la température de Fermi, les électrons se comportent comme un gaz classique et les collisions électron-ion et électron-électron dominent. Dans le cas de l'interaction d'un laser avec un matériau diélectrique, à basse intensité, les collisions électron-phonons dominent, puisque la température électronique ne croît pas suffisamment. En augmentant l'intensité et par conséquent le nombre d'électrons de conduction (ionisation), les collisions électron-ion commencent à apporter leur contribution. La fréquence de collision totale est donc la somme d'une fréquence de collision électron-phonon, électron-neutre et d'une fréquence de collision électron-ion augmentant progressivement avec l'intensité. Le calcul de la fréquence de collision totale des électrons (autour de la température de Fermi) peut être approché via la relation [50] :

$$\nu_e = \nu_{e-ph}^{min} + (\nu_{e-n} + \nu_{e-i} + \nu_{e-e})^{max} \frac{n_e}{n_a} \quad (1.13)$$

avec ν_{e-ph}^{min} la valeur minimale de la fréquence de collision électron-phonon à température ambiante ($\nu_{e-ph}^{min} \simeq 4.10^{13} \text{ s}^{-1}$). La valeur maximale de la somme des fréquences de collision électron-neutre, électron-ion et électron-électron peut s'exprimer via la relation [50] : $(\nu_{e-n} + \nu_{e-i} + \nu_{e-e})^{max} = v_e/d \simeq 5.10^{15} \text{ s}^{-1}$ où d est la distance inter-atomique environ égale à 4.10^{-8} cm dans le cas de la silice et $v_e = \sqrt{2(E_{BG} + \varepsilon_b)/m_e} \simeq 2.10^8 \text{ cm/s}$ avec ε_b l'énergie de liaison de électrons.

En supposant que les électrons oscillent autour de leurs positions d'équilibre sur une longueur de Debye $\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_{perm}^0 k_B T_e}{n_e e^2}}$, de l'ordre du dixième de nanomètre, bien plus petite que les dimensions caractéristiques du dépôt d'énergie total, de l'ordre du micromètre, les gradients dans les Eqs. (1.10), (1.11) et (1.12) sont négligés, c'est à dire que le transport des électrons est supposé négligeable. Dans ce cas les équations du modèle fluide des électrons se réécrivent de la manière suivante :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = \Omega \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_e}{\partial t} = -\frac{e}{m_e} \mathbf{E} - \nu_e \mathbf{v}_e \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial E_e}{\partial t} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} - \Gamma E_{BG} \Omega_{IPI} - \frac{E_e}{\tau_{rec}} + \frac{1}{2} m_e v_e^2 \frac{\partial n_e}{\partial t} \quad (1.16)$$

Il est à noter que dans l'Eq. (1.15), en multipliant chaque membre par en_e , l'évolution temporelle des vitesses électroniques est finalement décrite par la relation (modèle de Drude [51]) :

$$en_e \frac{\partial \mathbf{v}_e}{\partial t} = \nu_e \mathbf{J} - \omega_p^2 \varepsilon_{perm}^0 \mathbf{E} \quad (1.17)$$

avec $\omega_p = \sqrt{\frac{e^2 n_e}{m_e \varepsilon_{perm}^0}}$ la fréquence plasma.

Ce modèle, dépendant notamment de l'évolution de la densité électronique en bande de conduction, la connaissance et la modélisation des phénomènes d'ionisation et de recombinaison sont nécessaires.

1.1.3 Mécanismes d'ionisation et de recombinaison électronique

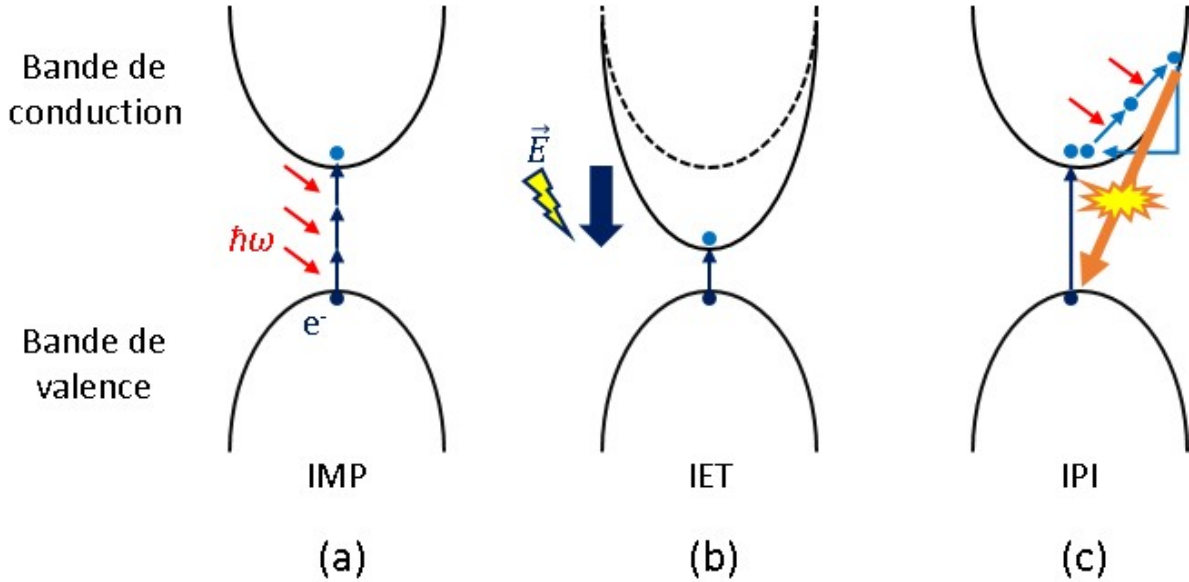


FIGURE 1.3 – Illustration des différents processus d'ionisation. (a) Ionisation multiphotonique (IMP) : absorption simultanée par un électron de valence de N photons (processus non-linéaire), le menant en bande de conduction. (b) Ionisation par effet tunnel (IET) : le champ électrique $\vec{E}$ est suffisamment fort pour abaisser le minimum de la bande de conduction, réduisant la bande interdite. (c) Ionisation par impact (IPI) : les électrons promus en bande de conduction via des processus de photoionisation peuvent continuer d'être chauffés par le laser. À partir d'une certaine énergie gagnée, des électrons de conduction peuvent ioniser par impact des électrons de valence et être promus eux-même en bande de conduction.

Lors de l'interaction du laser avec le matériau, des électrons de valence peuvent être portés en bande de conduction. Après un certains temps de relaxation de l'énergie absorbée, ces derniers vont retourner progressivement à leur état d'équilibre en bande de valence. Ainsi, la densité électronique du matériau en bande de conduction va évoluer en fonction des processus d'ionisation mis en jeu, tels que la photoionisation (PI) et l'ionisation par impact (IPI), mais également en fonction des processus de recombinaison (REC) des électrons. L'ensemble de ces phénomènes en compétition vont alors jouer un rôle plus ou moins important en fonction des différents paramètres laser et du matériau, et apporter leur contribution au terme source de l'Eq. (1.14) selon la relation :

$$\Omega = \Omega_{PI} + \Omega_{IPI} - \Omega_{REC} \quad (1.18)$$

Les processus de photoionisation

De manière générale, le terme photoionisation caractérise une excitation d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction sous l'effet d'un rayonnement.

Cependant, deux processus peuvent être distingués (Fig. 1.3 (a et b)) : l'ionisation multiphotonique (IMP) et l'ionisation par effet tunnel (IET).

Dans le visible et l'infrarouge, l'absorption de l'énergie d'un photon unique par un électron n'est pas suffisante pour l'exciter en bande de conduction, l'énergie d'ionisation d'un matériau diélectrique étant bien plus grande. Dans le cadre de cette étude par exemple, les photons ont une énergie $\hbar\omega_L$ environ égale à 1,55 eV à 800 nm, tandis que la valeur de la bande interdite de la silice est d'environ 9 eV [52–55]. L'absorption simultanée de plusieurs photons est donc nécessaire. Pour cela, le rayonnement doit être suffisamment intense pour induire un régime d'absorption non-linéaire et la somme de l'énergie des N photons absorbés doit être supérieure à la valeur de la bande interdite. On parle d'ionisation multiphotonique à l'ordre N telle que présentée Fig. 1.3 (a). La probabilité que ces N photons soient simultanément absorbés est approximativement proportionnelle à I_L^N . En particulier, dans le cas de la silice et avec les paramètres lasers choisis, une absorption à 6 photons est requise pour exciter un électron en bande de conduction et franchir la bande interdite. La valeur importante de cette dernière est notamment à l'origine de la transparence dans le visible et l'infrarouge des matériaux diélectriques. Seuls les rayonnements ultraviolets sont absorbés en régime linéaire, un photon unique étant suffisant pour exciter les électrons et les promouvoir en bande de conduction. Dans le cas de la silice, avec des lasers dont les longueurs d'onde sont inférieures à 140 nm (domaine ultraviolet extrême), un photon unique a assez d'énergie (environ 9,2 eV à 135 nm) pour exciter un électron en bande de conduction.

Lorsque l'intensité du champ laser augmente, la barrière de potentiel générée par le réseau ionique s'abaisse transitoirement, c'est à dire que la valeur en énergie de la bande interdite diminue (Fig. 1.3 (b)). En effet, plus le champ électrique du rayonnement est fort, plus le potentiel de Coulomb qui lie l'électron à son atome est abaissé. Une suppression complète de la barrière de potentiel est même possible si l'intensité est suffisante. Ainsi, un électron de la bande de valence a une probabilité (au sens quantique) non nulle de passer en bande de conduction. On parle dans ce cas d'effet tunnel. De plus, puisque dans ce cas l'ionisation nécessite moins d'énergie absorbée, un autre phénomène (moins probable mais possible) peut être envisagé, celui de l'absorption d'un photon unique qui augmente l'énergie de l'électron suffisamment pour l'amener en bande de conduction, tel que le décrit l'effet Franz-Keldysh [56, 57]. Il est à noter que la probabilité d'une transition par effet tunnel est maximale lorsque l'amplitude du champ électrique est elle aussi maximale, c'est à dire tous les demi-cycles optiques. Ce processus a donc une dynamique sub-femtoseconde [58, 59].

Ces deux processus de photoionisation sont plus ou moins probables selon le matériau, la longueur d'onde λ_L et l'amplitude du champ laser E_0 . Ce comportement est décrit par le paramètre d'adiabaticité de Keldysh [60] $\gamma = \frac{\omega_L \sqrt{m_e^* E_{BG}}}{e E_0}$. Lorsque ($\gamma \gg 1$), l'ionisation multiphotonique est plus importante que l'ionisation par effet tunnel. À l'inverse, lorsque ($\gamma \ll 1$) l'ionisation par effet tunnel est prépondérante devant l'ionisation multiphotonique. Enfin, pour les cas intermédiaires où $\gamma \simeq 1$ les deux processus d'ionisation sont en compétition.

L. V. Keldysh étudia l'ionisation par un champ laser et introduisit une expression générale du taux de photoionisation [60] (densité électronique produite par unité de temps) :

$$\Omega_{PI} = \frac{2\omega_L}{9\pi} \left(\frac{m_e^* \omega_L}{\hbar \gamma_2} \right)^{3/2} Q \left(\gamma, \frac{\tilde{E}_{BG}}{\hbar \omega_L} \right) \exp \left(-\pi \left\langle \frac{\tilde{E}_{BG}}{\hbar \omega_L} + 1 \right\rangle \frac{K_1(\gamma_2) - K_2(\gamma_2)}{K_2(\gamma_1)} \right) \quad (1.19)$$

avec $Q(\gamma, X)$ une fonction lentement variable comparée à une fonction exponentielle et

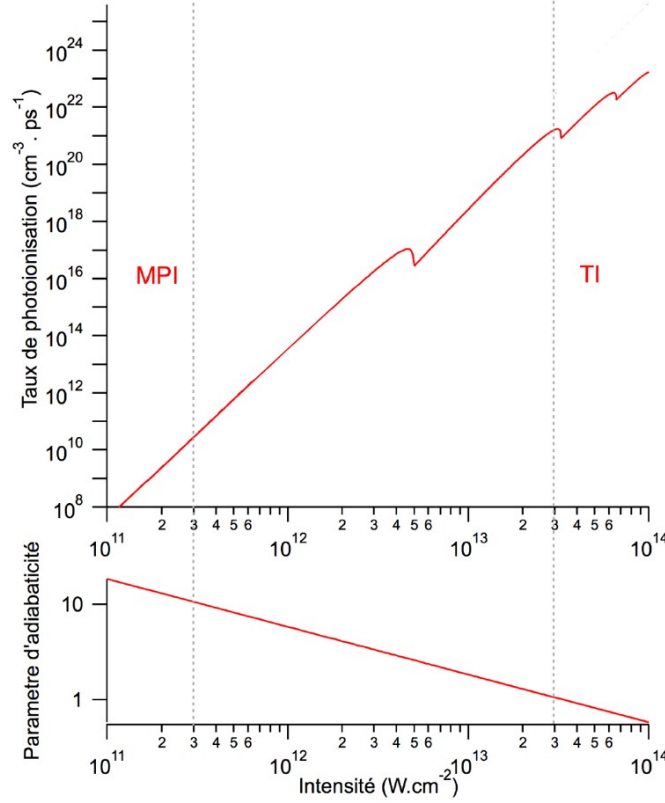


FIGURE 1.4 – Courbe du taux de photoionisation et paramètre d'adiabaticité en fonction de l'intensité du champ laser selon le modèle de Keldysh, pour une impulsion à 800 nm dans la silice [61].

de la forme :

$$Q(\gamma, X) = \sqrt{\frac{\pi}{2K_1(\gamma_1)}} \sum_{n_{ph}=0}^{\infty} \exp\left(-\pi(n_{ph} - X + 1) \frac{K_1(\gamma_2) - K_2(\gamma_2)}{K_2(\gamma_1)}\right) \Phi\left(\sqrt{\pi^2 \frac{n_{ph} - X}{2K_1(\gamma_1)K_2(\gamma_1)}}\right) \quad (1.20)$$

où $X = \frac{\tilde{E}_{BG}}{\hbar\omega_L}$, $\gamma_1 = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma^2}}$, $\gamma_2 = \frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma^2}}$. m_e^* est la masse effective de l'électron et n_{ph} l'ordre multiphotonique. $\tilde{E}_{BG} = \frac{2E_{BG}}{\pi\gamma_2} K_2(\gamma_1)$ est le potentiel effectif d'ionisation. Le symbole $\langle \rangle$ dénote la partie entière du nombre X . Les fonctions K_1 et K_2 sont les intégrales elliptiques complètes de première et seconde espèces et Φ est l'intégrale de Dawson (voir Annexe A).

La figure 1.4 présente l'évolution du taux de photoionisation en fonction de l'intensité d'un laser à 800 nm. Dans le cas de lasers de grande fréquence et d'intensité modérée, typiquement des lasers femtoseconde à 800 nm avec une intensité crête de l'ordre de $10^{11} - 10^{12}$ W/cm², l'ionisation multiphotonique est plus importante que l'ionisation par effet tunnel ($\gamma \gg 1$). Le taux de photoionisation est dans ce cas proportionnel à I_L^n et atteint des valeurs jusqu'à environ 10^{15} cm⁻³.ps⁻¹ à 1 TW/cm², soit des densités électroniques de l'ordre de 10^{14} cm⁻³ pour une impulsion de 100 fs. Dans le cas de lasers avec une grande longueur d'onde et/ou très intense (à partir de plusieurs dizaine de TW/cm² pour un laser femtoseconde à 800nm), l'ionisation par effet tunnel devient prépondérante devant l'ionisation multiphotonique ($\gamma \ll 1$). Le taux de photoionisation évolue dans ce cas selon une loi exponentielle. Dans le cas intermédiaire ($\gamma \simeq 1$), correspondant aux paramètres utilisés dans cette étude, avec des intensités de l'ordre de quelques TW/cm² à une dizaine de TW/cm² [62], le taux de photoionisation varie environ entre 10^{16} et 10^{20} cm⁻³.ps⁻¹,

soient des densités électroniques produites entre 10^{15} et 10^{19} cm^{-3} sur une durée de 100 fs.

Ionisation par impact et avalanche électronique

Le processus d'ionisation prépondérant dans les premiers instants de l'interaction laser-diélectrique est la photoionisation telle que décrite ci-dessus. Ce processus va peupler la bande de conduction en y portant des électrons de valence. Une fois en bande de conduction, ces derniers vont pouvoir continuer d'absorber des photons via des phénomènes d'absorption par Bremsstrahlung inverse et par collisions électron-phonon-photon et atteindre plusieurs fois la valeur en énergie de la bande interdite. Puis, à partir d'un niveau d'énergie de l'ordre de $3/2 E_{BG}$ [63, 64] ($\Gamma = 3/2$ ¹) ces électrons vont alors pouvoir entrer en collision avec les électrons en bande de valence en leur transférant assez d'énergie pour les faire passer en bande de conduction. Ce processus est appelé ionisation par impact (ou collisionnelle) [65] et génère deux électrons d'énergie proche du minimum de la bande de conduction comme illustré par la Fig. 1.3(c). Chacun d'eux peut ensuite être chauffé par le laser, atteindre des niveaux d'énergies importants et de nouveau ioniser par impact d'autres électrons en bande de valence. Ce processus reste efficace tant que les électrons conservent une certaine quantité d'énergie en bande de conduction, c'est à dire que le laser continue de les chauffer suffisamment. Plus précisément, ce phénomène est efficace s'il est plus rapide que les temps de collision électron-phonon et de recombinaison qui relaxent l'énergie électronique. Dans ce cas, le laser peut continuer de chauffer les porteurs libres puis, lorsqu'ils atteignent une énergie suffisante, ces derniers peuvent ioniser par impact de plus en plus d'électrons de valence. Il s'agit d'un processus exponentiel, qualifié d'avalanche électronique. Au bout d'un certains temps, ce phénomène peut ainsi devenir, en fonction des paramètres du laser et du matériau, le processus d'ionisation prépondérant lors de l'interaction laser-diélectrique.

En supposant, de la même manière que pour le modèle fluide, les électrons thermalisés, *i.e.* à l'équilibre thermique, le taux d'ionisation par impact peut s'écrire, selon le modèle de Peñano [46], tel que $\Omega_{IPI} = \int_0^\infty \nu_0(W_e) f_e(W_e) dW_e$, où $f_e(W_e)$ est la fonction de distribution de l'énergie des électrons et $\nu_0(W_e) = \alpha_0 (W_e/E_{BG} - 1)^2$ pour $W_e \geq E_{BG}$ et nul pour $W_e < E_{BG}$. α_0 est une constante intrinsèque au matériau déterminée empiriquement et homogène à une fréquence. En supposant une forme Maxwellienne pour la distribution des vitesses des électrons, la fonction de distribution de l'énergie (normalisée) s'exprime selon [46] :

$$f(W_e) = 2 \left(\frac{W_e}{\pi W_{th}^3} \right)^{1/2} \exp(-W_e/W_{th}) \quad (1.21)$$

avec $W_{th} = 3k_B T_e/2$ l'énergie thermique électronique. Finalement, le taux d'ionisation par impact est donné par [46] :

$$\Omega_{IPI} = n_e \frac{2\alpha_0}{\sqrt{\pi}} \frac{n_v}{n_{v0}} \left[\left(\frac{15}{4} \beta^{3/2} - \frac{1}{2} \beta^{1/2} \right) e^{-1/\beta} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{15}{2} \beta^2 - 3\beta + 1 \right) \text{erfc} \left(\frac{1}{\sqrt{\beta}} \right) \right] \quad (1.22)$$

où $\beta = W_{th}/E_{BG}$ et $\text{erfc}(x)$ est la fonction erreur complémentaire (voir Annexe A).

1. Il est à noter que la valeur de Γ peut légèrement varier entre des valeurs de l'ordre de 2 et 5 [46]. Ici, la valeur de $3/2$ a été choisie d'après les travaux de Kaiser *et al.* [63] et Rethfeld *et al.* [64].

Recombinaison des électrons

Le phénomène de recombinaison électronique consiste au retour progressif vers la bande de valence des électrons de conduction ayant relaxé leur énergie, diminuant ainsi les densités en bande de conduction, sans échauffer de manière significative le réseau. Durant ce processus, prenant place sur des échelles très variées en fonction du matériau, un photon et/ou des phonons sont émis.

Dans le premier cas, qualifié de processus radiatif, un ou plusieurs photons sont émis, accompagnés de l'émission d'un phonon dans le cas d'un matériau à gap indirect, afin de conserver la quantité de mouvement. L'énergie du ou des photons est égale au gap. Bien que ce mécanisme se fasse directement de bande à bande la plupart du temps, il est possible que la recombinaison se fasse au travers d'un niveau intermédiaire (centre coloré par exemple) dont le niveau d'énergie est situé dans la bande interdite. Ces niveaux intermédiaires sont généralement créés par les défauts du matériau, induisant une distortion du réseau cristallin. Dans ce cas l'énergie du ou des photons émis est égale à la différence entre le minimum de la bande de conduction et le niveau d'énergie intermédiaire.

Dans le deuxième cas, correspondant à un processus non-radiatif, la recombinaison d'un électron se fait soit par l'intermédiaire d'un centre coloré ou directement, avec émission d'un ou plusieurs phonons. Dans le cas indirect, selon l'énergie du niveau intermédiaire, l'électron peut être recombiné avec l'émission d'un ou plusieurs phonons, transmettant leur énergie au réseau. Ce mécanisme est nommé recombinaison Shockley Read Hall [66]. Dans le cas direct, l'énergie libérée est transférée à un autre porteur libre qui se retrouve alors excité dans un niveau plus haut en bande de conduction. Il va pouvoir ensuite relaxer son énergie au travers de collisions électron-phonon et chauffer le réseau. Ce mécanisme est appelé recombinaison Auger et participe à la décroissance de la densité d'électrons libres tout en conservant l'énergie totale en bande de conduction. Dans le cas de la silice le temps de recombinaison moyen d'un électron, expérimentalement mesuré, est d'environ 150 fs, correspondant approximativement au temps de formation d'excitons auto-piégés, dû à un réarrangement du réseau pendant l'interaction [67].

1.1.4 Chauffage du réseau

Comme introduit ci-dessus, lors de l'interaction d'un laser femtoseconde avec un matériau diélectrique, des électrons de conduction sont générés et se thermalisent au travers de collisions électron-électron tandis que les ions du réseau restent imperturbés et froids, en raison de leur masse plus importante. Ne pouvant pas absorber l'énergie du laser directement, l'équilibre thermique est alors rompu ($T_e \neq T_L$) (Fig. 1.5) et l'énergie laser absorbée est essentiellement contenue dans le gaz d'électrons à la fin de l'impulsion.

Le réseau ionique est chauffé au travers de collisions électron-phonon. Les phonons sont des quanta d'énergie liés aux vibrations du réseau et leur population dépend de la température du matériau. Lors de ces collisions, les électrons transfèrent leur énergie aux ions, élevant ainsi leur température. Ce mécanisme est non-radiatif et consiste essentiellement en l'émission et l'absorption de phonons avec une énergie de l'ordre de quelques dizaines à une centaine de meV, en fonction du matériau. Un grand nombre de collisions électron-phonon successives vont donc relaxer l'énergie laser absorbée, les énergies des électrons excités étant de l'ordre de 1 à 10 eV. Un certains temps t_{e-ph} (Fig. 1.5) de l'ordre de quelques picosecondes est alors nécessaires pour transférer l'énergie absorbée par les électrons de conduction aux ions et ainsi amener progressivement le système vers un état d'équilibre thermique ($T_e = T_L$).

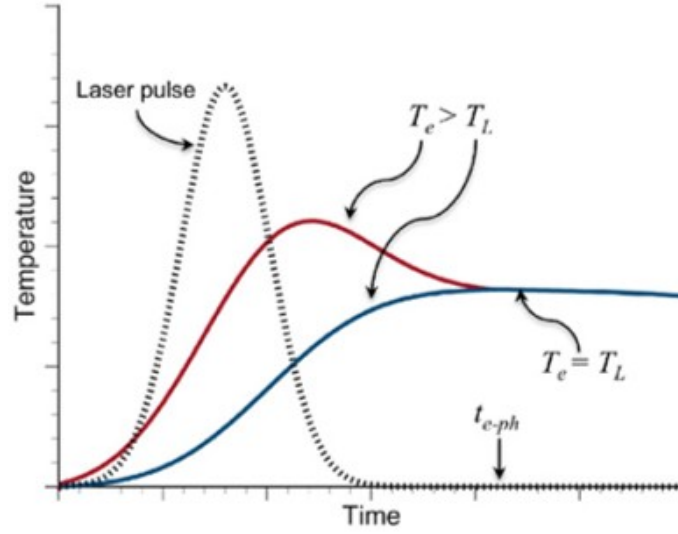


FIGURE 1.5 – Evolutions temporelles caractéristiques des températures électronique et ionique lors de l'interaction d'un laser femtoseconde avec un matériau diélectrique. Sur la figure, T_L et t_{e-ph} font référence, respectivement, à la température du réseau et au temps d'équilibre thermique [43].

En supposant que la totalité de l'énergie absorbée par les électrons soit transférée aux ions, *i.e.* en supposant les pertes d'énergie négligeables, la température maximale (température d'équilibre) atteinte par le réseau, peut-être estimée via la conservation de l'énergie [43] :

$$C_{ve}T + C_{vi}T = E_{abs} \quad (1.23)$$

où C_{ve} , C_{vi} et E_{abs} sont, respectivement, les capacités calorifiques électronique et ionique et la densité d'énergie laser absorbée. Il est à noter que la dynamique des collisions électron-phonon n'est pas prise en compte dans cette étude. Cependant, l'équilibre thermique $T = T_e = T_L$ est supposé être atteint au bout de quelques picosecondes, bien après le passage de l'impulsion laser, lorsque les transferts d'énergie entre les électrons et les ions sont achevés. Dans ce cas la relation liant la température du matériau à l'énergie laser absorbée par les électrons s'écrit :

$$T_L = \frac{E_{abs}}{C_{vi} + C_{ve}} \quad (1.24)$$

Cette approche est vraie pour des impulsions courtes, jusqu'à des durées de l'ordre de quelques centaines de femtosecondes. Dans le cas d'impulsions plus longues, au delà de la dizaine de picosecondes, les ions et les électrons sont supposés à l'équilibre thermique durant la quasi-totalité de l'interaction ($T_e \simeq T_L$) et l'énergie laser absorbée n'est pas contenue exclusivement dans les électrons.

Ce modèle simple servira à estimer, en fonction du dépôt d'énergie prédit, le champ de température induit par le laser dans le matériau et à l'origine des déformations observées. Ces déformations, dépendantes de la réponse rhéologique de la matière, une connaissance et une modélisation des différents comportements hydrodynamiques et mécaniques du matériau sont nécessaires.

1.2 Rhéologie des matériaux

Une dizaine de picosecondes après le passage de l'impulsion laser dans le matériau, le dépôt d'énergie précédemment défini a chauffé les ions de façon isochore et augmenté localement la pression. Cependant, le temps de diffusion de la chaleur étant beaucoup plus important (de l'ordre de la microseconde), la matière environnante est toujours froide et dans l'état solide. Une importante différence de pressions entre la zone chauffée (de l'ordre du GPa au TPa) et le solide froid (de l'ordre de la pression atmosphérique) est donc créée, induisant une force de surpression et conduisant à une discontinuité des vitesses de déplacement dans le matériau. Cet effet est qualifié de choc et initie des ondes mécaniques qui vont se propager dans le solide, induisant des transitions de phase et déformant de manière réversible ou permanente le matériau, en fonction de leur amplitude. Ces ondes mécaniques, qui sont des oscillations de la matière, transportent, restituent et dissipent l'énergie laser initialement absorbée. La considération de la réponse des différents états de la matière aux pressions et contraintes appliquées est donc indispensable pour décrire les processus hydrodynamiques et mécaniques en jeu lors de la structuration par laser du matériau diélectrique. En effet, tandis qu'au niveau de la zone chauffée, le matériau aura un comportement fluide, son comportement autour de celle-ci sera, de manière générale, de type visco-élasto-plastique, *i.e.* présentant des caractéristiques à la fois visqueuses (comportement d'un fluide idéal) et élasto-plastiques (comportement d'un solide idéal).

Dans un premier temps, les différentes ondes mécaniques sont présentées. La réponse de la matière à ces sollicitations mécaniques est ensuite détaillée au travers des phénomènes viscoélastiques et élasto-plastiques. Dans un deuxième temps, le modèle thermo-élasto-plastique utilisé pour les simulations de la déformation d'un diélectrique par un laser femtoseconde est présenté. Enfin, un modèle de prédiction de rupture du matériau est proposé afin d'évaluer, en fonction des contraintes calculées, les zones de fractures potentielles au cours de l'interaction laser-solide.

1.2.1 Ondes mécaniques

Trois types d'ondes peuvent être différenciées : les ondes longitudinales ou de compression/détente, les ondes transverses ou de cisaillement et les ondes de surface.

Ondes de compression et de raréfaction

L'onde de compression est une onde longitudinale, c'est-à-dire que les déplacements de matière induits s'effectuent dans le sens de propagation de l'onde (Fig. 1.6(a)). En se propageant, cette onde va comprimer localement de proche en proche le matériau en augmentant sa pression et sa densité. Or d'après le principe de conservation de la matière, puisque une partie du matériau est comprimée et que sa densité augmente localement, immédiatement derrière l'onde de compression, la densité diminue ainsi que la pression. Une onde de raréfaction (similaire à une onde de détente) est ainsi formée et reste dans le sillage de l'onde de compression.

Onde de cisaillement

L'onde de cisaillement est une onde transverse, c'est à dire que les déplacements de matière induits s'effectuent perpendiculairement au sens de propagation de l'onde (Fig. 1.6(b)). Elle accompagne très souvent les ondes de compression/détente et constitue le

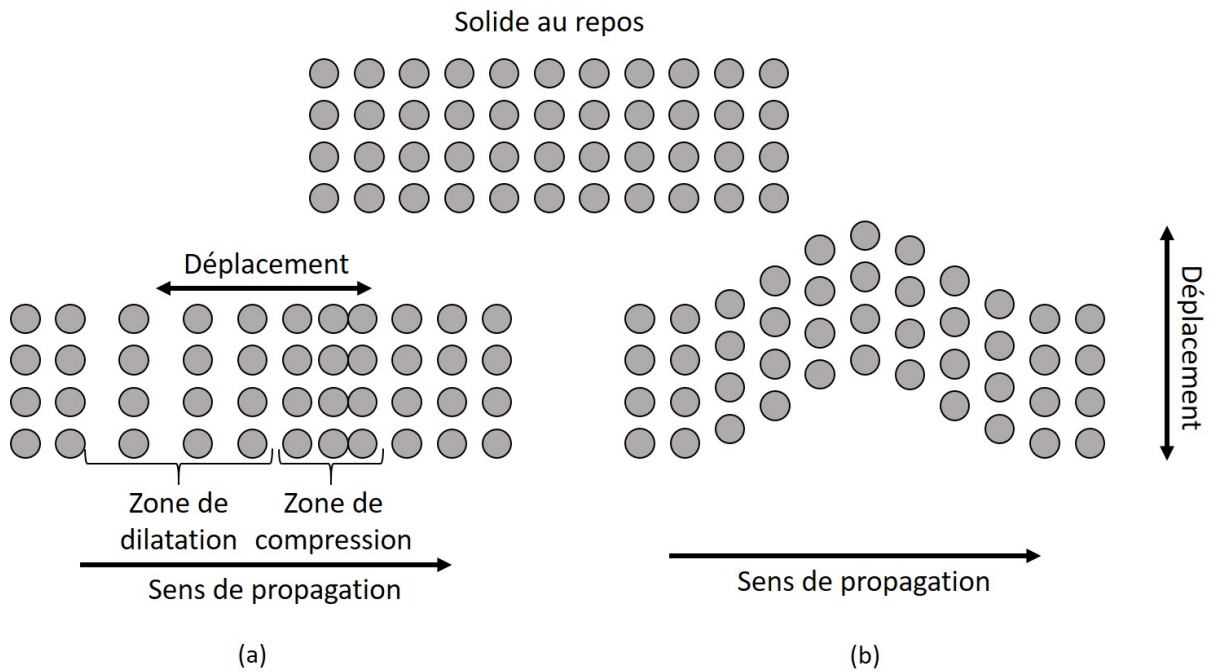


FIGURE 1.6 – (a) Onde longitudinale ou de compression-détente (b) Onde transverse ou onde de cisaillement

deuxième mode de propagation de l'énergie dans les solides qui contribue fortement à sa dissipation. Ce type d'onde s'observe généralement dans les solides et intervient rarement dans les liquides et jamais dans les gaz. En effet, bien que certains liquides visqueux, comme le miel, résistent à un écoulement en cisaillement, dans la majorité des cas, les viscosités étant plutôt faibles, on suppose qu'une onde de cisaillement ne se propage pas dans les fluides.

Onde de surface

Une onde de surface est, de manière générale, une onde se propageant à la surface d'un matériau élastique avec une amplitude qui décroît exponentiellement avec la profondeur du solide. Différents types d'ondes de surface existent. L'onde de Rayleigh [68], premièrement observée, est une onde semblable à une vague, composée à la fois d'un mouvement longitudinal (onde de compression/détente) et d'un mouvement transverse vertical (onde de cisaillement dans le plan perpendiculaire à la surface). L'onde de Love est un autre type d'onde de surface [69]. Il s'agit d'une onde transverse horizontale, *i.e.* d'une onde de cisaillement dans le plan de la surface, notamment, à l'origine de nombreux dégâts matériels durant les séismes. De nombreuses autres ondes de surface existent, plus complexes, combinant ondes longitudinales et transverses (verticale et horizontale). Cependant, dans le cadre de cette thèse, les applications présentées étant en volume, aucune onde de surface ne sera traitée.

Ainsi, l'ensemble de ces ondes mécaniques vont soumettre les matériaux à différents types de sollicitations : traction, compression et cisaillement. Selon le matériau et sa réponse à de telles sollicitations, les déformations induites ne sont pas les mêmes et peuvent présenter des comportements particuliers.

1.2.2 La viscoélasticité

Un matériau viscoélastique (plasticité à part) soumis à une sollicitation en contrainte va à la fois présenter un comportement élastique instantané (déformation très rapide du matériau et réversible), élastique différé ou anélastique (déformation retardée et réversible) et visqueux (déformation irréversible dépendant de la vitesse ou de la fréquence de sollicitation). Ce type de matériau a donc un comportement intermédiaire entre un solide et un liquide visqueux. Les phénomènes de fluages et de relaxation de contrainte, ci-dessous présentés, sont caractéristiques des matériaux viscoélastiques et permettent de mettre en évidence l'ensemble de leurs comportements. Dans ce qui suit, la sollicitation considérée est une traction pure entraînant un étirement du matériau. Un autre type de sollicitation, telle qu'une contrainte en cisaillement pure, entraînant un glissement du matériau, aurait également pu convenir. En effet, le choix du type de sollicitation n'enlève rien au caractère général des phénomènes et modèles présentés ci-dessous [70].

Fluage et relaxation de contrainte

Lorsqu'une contrainte en traction constante σ_0 est appliquée à un matériau viscoélastique, celui-ci va subir une déformation (un étirement) $\varepsilon(t)$ variable dans le temps. Ceci est le phénomène de fluage et peut être caractérisé par une fonction, appelée souplesse de fluage ou fonction de fluage, définie par :

$$F(t) = \frac{\varepsilon(t)}{\sigma_0} \quad (1.25)$$

De la même manière, lorsqu'une déformation constante ε_0 est appliquée à un matériau viscoélastique, la contrainte induite $\sigma(t)$ va diminuer au cours du temps. Il s'agit du phénomène de relaxation de contrainte qui peut être également caractérisé par une fonction, appelée rigidité de fluage ou fonction de relaxation, définie par :

$$R(t) = \frac{\sigma(t)}{\varepsilon_0} \quad (1.26)$$

Afin de simplifier les modèles, les lois de comportement présentées ci-après sont linéaires et la sollicitation considérée reste une traction pure.

Modélisation de la viscoélasticité linéaire

Tout d'abord, le comportement élastique linéaire d'un solide peut être modélisé par un ressort de raideur E_{Young} (module d'élasticité longitudinal ou module de Young) (Fig.1.7).

De cette manière, la contrainte appliquée est proportionnelle à la déformation et la loi de comportement du matériau est linéaire (loi de Hooke) :

$$\sigma(t) = E_{Young}\varepsilon(t) \quad (1.27)$$

Dans ce cas les fonctions souplesse et rigidité de fluage sont constantes au cours du temps et $R(t) = 1/F(t) = E_{Young}$. A température ambiante (300 K), la silice est supposée élastique linéaire avec $E_{Young} = 70$ GPa. De la même manière, le comportement visqueux d'un fluide dit newtonien (loi de comportement linéaire) peut être symbolisé par un amortisseur de viscosité η (Fig.1.8). La contrainte appliquée est proportionnelle à la vitesse de

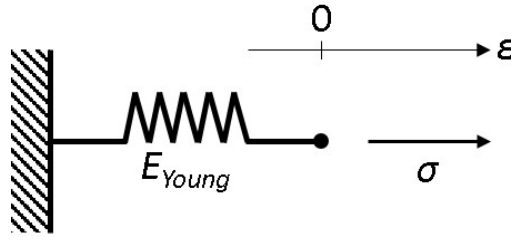


FIGURE 1.7 – Schéma du modèle d'élasticité linéaire

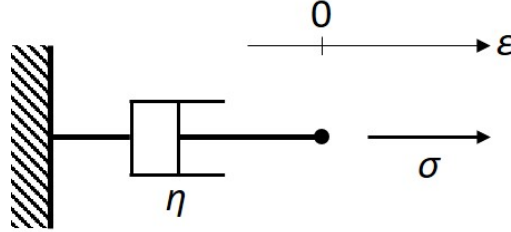


FIGURE 1.8 – Schéma du modèle de viscosité newtonienne

déformation (taux de déformation) :

$$\sigma(t) = \eta \dot{\epsilon}(t) \quad (1.28)$$

Dans ce cas, la fonction souplesse de fluage est proportionnelle au temps $F(t) = E_{Young}t/\eta$ et la fonction rigidité de fluage est nulle.

Ces deux représentations, modélisant l'élasticité linéaire et la viscosité newtonienne, sont très importantes. Leur association en série ou en parallèle permet en effet de modéliser le comportement viscoélastique. Notamment, en associant en série un ressort et un amortisseur, le comportement linéaire simple d'un fluide viscoélastique peut être approché. Il s'agit du modèle de Maxwell traité en Annexe B. En les associant en parallèle, le comportement linéaire simple d'un solide viscoélastique est obtenu. Il s'agit du modèle de Kelvin-Voigt traité également en Annexe B. Cependant, ces deux modèles ne permettent pas de modéliser totalement la viscoélasticité. Le modèle de Burger permet de décrire l'intégralité des comportements viscoélastiques, à savoir, l'élasticité instantanée, l'élasticité différée et la viscosité, en associant en série une cellule de Maxwell et une cellule de Kelvin-Voigt (Fig.1.9). Dans ce modèle, la souplesse et la rigidité de fluage s'expriment

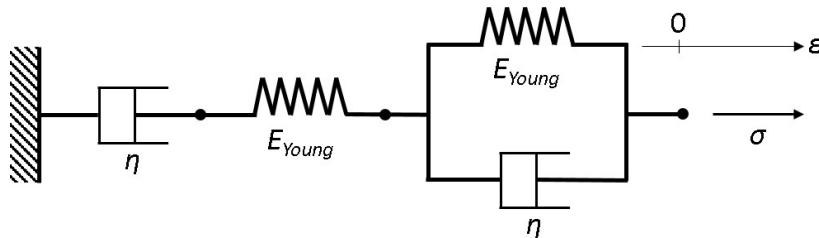


FIGURE 1.9 – Schéma du modèle de Burger

de la manière suivante (Annexe B) :

$$F(t) = \frac{1}{E_{Young}} + \frac{t}{\eta} + \frac{1 - e^{-E_{Young}t/\eta}}{E_{Young}} \quad (1.29)$$

et

$$R(t) = \frac{E_{Young}}{a-b} \left[\left(a - \frac{E_{Young}}{\eta} \right) e^{bt} - \left(b - \frac{E_{Young}}{\eta} \right) e^{at} \right] \quad (1.30)$$

où a et b sont les racines de l'équation :

$$x^2 + 3 \frac{E_{Young}}{\eta} x + \frac{E_{Young}^2}{\eta^2} = 0 \quad (1.31)$$

Il est important de remarquer que lorsque la viscosité du matériau est très grande devant le module de Young ($\eta \gg E_{Young}$) et le temps t , d'une part $F(t) \rightarrow 1/E_{Young}$ et d'autre part, puisque a et b tendent vers 0 (voir Annexe B), $R(t) \rightarrow E_{Young}$. Les lois de comportement de l'élasticité linéaire sont retrouvées, où le comportement visqueux peut être négligé. C'est le cas de la silice à température ambiante jusqu'à une température de l'ordre de 850 K où sa viscosité η varie de 10^7 à 10^3 GPa.s tandis que son module de Young est d'environ 70 GPa [71]. Pour des températures supérieures et jusqu'à sa température de fusion d'environ 1900 K (viscosité similaire à celle du miel autour de 10 Pa.s), la silice arbore un comportement viscoélastique. Au-delà, sa viscosité devient très faible, comme l'eau, puis nulle à partir du point d'ébullition. Dans ce cas, on ne suppose plus de comportement viscoélastique.

1.2.3 Réponse élasto-plastique

Dans le cas d'un solide idéal où la viscosité est négligée, l'amortissement de l'onde de choc dans le matériau, c'est à dire la restitution et la dissipation de l'énergie qu'elle transporte, va se produire selon trois processus principaux. Lors du passage des ondes de compression et de raréfaction, les contraintes mécaniques dans le matériau vont augmenter (charge) puis diminuer (décharge). Dans un premier temps cette déformation est élastique. Il s'agit du premier processus d'amortissement de l'onde de choc et constitue une propriété particulière du solide selon laquelle après une sollicitation en contrainte le déformant, celui-ci retrouve sa forme initiale. Cet effet amortit les ondes mécaniques en diminuant l'accélération de la matière, c'est à dire en annulant les discontinuités en vitesse à l'origine du choc et ainsi restitue mécaniquement une partie de l'énergie. Cependant, les pressions en jeu, induites par l'onde de compression, étant importantes, les déformations élastiques ne suffisant pas à elles seules à amortir l'onde de choc, des déformations dites plastiques font leur apparition. Il s'agit du deuxième processus et il intervient lorsque les contraintes appliquées à la matière dépassent la limite élastique, propre à chaque matériau. Lors de ces déformations, la matière va atomiquement se réarranger au travers d'une série de glissements élémentaires le long des plans atomiques, c'est à dire au travers d'ondes de cisaillements, entraînant l'apparition de dislocations. Ces mouvements au sein de la matière s'accompagnant de frottements, la déformation plastique va ainsi dissiper l'énergie en produisant de la chaleur. Enfin, le troisième processus de relaxation de l'énergie transportée par l'onde de choc est le mécanisme de rupture du matériau. Au travers de ce phénomène, les contraintes appliquées, excédant les limites de résistance du matériau, sont relaxées. Il s'agit du dernier processus de relaxation de la matière lors d'une déformation mécanique, capable de restituer et dissiper d'importantes quantités d'énergie.

1.2.4 Modélisation des mouvements hydrodynamiques

De la même manière que dans le modèle fluide, décrivant la dynamique des électrons (Sec. 1.1.2), les mouvements hydrodynamiques lors de la relaxation de la matière chauffée confinée dans le matériau froid peuvent être décrits par les équations de conservation d'Euler. Cependant, étant nécessaire ici de tenir compte du comportement solide du matériau, une forme plus générale de ces équations est utilisée où la pression thermodynamique P est remplacée par le tenseur des contraintes de Cauchy $\bar{\bar{\sigma}}$ [72–74]. Il est à noter que les contraintes sont une généralisation de la pression. En outre, le formalisme Eulérien utilisé précédemment (Eqs. (1.14), (1.15) et (1.16)), permettant de suivre l'évolution des électrons depuis des positions fixes (éléments du maillage fixes), est substitué par le formalisme Lagrangien, permettant de suivre les macro-particules du matériau au cours du temps le long de leurs trajectoires (éléments du maillage mobiles et déformables). Les dérivées partielles dans les Eqs. (1.14), (1.15) et (1.16), sont alors remplacées par des dérivées *particulaires* liées par la relation $\frac{dG(\mathbf{r},t)}{dt} = \frac{\partial G(\mathbf{r},t)}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla)G(\mathbf{r},t)$, où $G(\mathbf{r},t)$ et $\mathbf{U}$ sont, respectivement, une grandeur associée à une macro-particule du matériau (densité, vitesse, énergie,...) et la vitesse de l'écoulement. Dans ce cas, le système d'équations de conservation s'écrit :

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) - \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (1.32)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{U}}{dt} - \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}} = \mathbf{0} \quad (1.33)$$

$$\rho \frac{de_{tot}}{dt} - \nabla \cdot (\bar{\bar{\sigma}} \cdot \mathbf{U}) = 0 \quad (1.34)$$

$$e_{tot} = e_{int} + \frac{1}{2} \mathbf{U}^2 \quad (1.35)$$

où ρ , e_{tot} et e_{int} sont, respectivement, la densité et les énergies totale et interne spécifiques.

De manière générale, le tenseur des contraintes de Cauchy peut être décomposé en deux termes tensoriels :

$$\bar{\bar{\sigma}} = -P I_d + \bar{\bar{S}} \quad (1.36)$$

Le premier terme correspond à la partie sphérique du tenseur des contraintes. C'est un tenseur diagonal contenant la pression thermodynamique et représentant le comportement fluide de la matière. Le deuxième terme, $\bar{\bar{S}}$, est le tenseur déviateur des contraintes tenant compte du comportement solide du matériau, incluant notamment le cisaillement (termes extra-diagonaux).

Ce système de trois équations (Eqs. (1.32), (1.33), (1.34)) à cinq inconnues nécessite deux équations supplémentaires, c'est à dire des relations de fermeture, pour être totalement résolu. Deux équations constitutives, c'est à dire deux lois de comportement de la matière sont utilisées. Tout d'abord la pression thermodynamique est calculée à l'aide d'une équation d'état (EOS), fonction des valeurs locales de densité et d'énergie interne. Puis, dans le cas d'un solide idéal élasto-plastique où la viscosité est négligée (hypothèse justifiée plus bas par les applications considérées), le tenseur déviateur des contraintes est évalué par la résolution de l'équation différentielle suivante [74] :

$$\frac{d\bar{\bar{S}}}{dt} = 2G(\bar{\bar{D}}_0 - \bar{\bar{D}}^p) - (\bar{\bar{S}}\bar{\bar{W}} - \bar{\bar{W}}\bar{\bar{S}}) \quad (1.37)$$

où G est le module de cisaillement et $\bar{\bar{D}}_0$ est la partie déviatorique du tenseur taux de déformation $\bar{\bar{D}}$ défini comme la partie symétrique du gradient des vitesses. Ces deux tenseurs s'expriment de la manière suivante :

$$\bar{\bar{D}}_0 = \bar{\bar{D}} - \frac{1}{3}Tr(\bar{\bar{D}})I_d \quad (1.38)$$

et

$$\bar{\bar{D}} = \frac{1}{2}[\nabla \cdot \mathbf{U} + (\nabla \cdot \mathbf{U})^t] \quad (1.39)$$

$\bar{\bar{W}}$ correspond à la partie antisymétrique du gradient des vitesses et s'écrit :

$$\bar{\bar{W}} = \frac{1}{2}[\nabla \cdot \mathbf{U} - (\nabla \cdot \mathbf{U})^t] \quad (1.40)$$

Le tenseur taux de déformation plastique $\bar{\bar{D}}^p$ dans l'Eq. (1.37) est déterminé par la relation :

$$\bar{\bar{D}}^p = \chi(\bar{\bar{N}}^p : \bar{\bar{D}}^p)\bar{\bar{N}}^p \quad (1.41)$$

où le symbole $:$ définit le produit scalaire tensoriel tel que $\bar{\bar{A}} : \bar{\bar{B}} = Tr(\bar{\bar{A}}^t \bar{\bar{B}})$, $\bar{\bar{N}}^p$ désigne la direction (dans l'espace des contraintes) de l'écoulement plastique :

$$\bar{\bar{N}}^p = \frac{\bar{\bar{S}}}{|\bar{\bar{S}}|} \quad (1.42)$$

et χ représente le paramètre de commutation défini par :

$$\chi = \begin{cases} 0 & \text{si } (f < 0) \text{ ou si } (f = 0 \text{ et } (\bar{\bar{N}}^p : \bar{\bar{D}}^p) \leq 0) \\ 1 & \text{si } (f = 0 \text{ et } (\bar{\bar{N}}^p : \bar{\bar{D}}^p) > 0) \end{cases} \quad (1.43)$$

où f est la fonction d'écoulement plastique². Le premier cas correspond à différents régimes de déformation à l'exception de la déformation plastique : le régime élastique ($f < 0$), le déchargement élastique ($f = 0$ et $(\bar{\bar{N}}^p : \bar{\bar{D}}^p) < 0$) et le chargement neutre ($f = 0$ et $(\bar{\bar{N}}^p : \bar{\bar{D}}^p) = 0$), *i.e.* dans un état hors régime élastique et avec une déformation constante. Il s'agit de l'état précédent le déchargement élastique (Fig. 1.10). Il est à noter que lors du régime de déformation élastique, les vitesses du son dans les matériaux solides peuvent se décomposer en une composante longitudinale et une transverse, respectivement, c_l et c_t , telles que [74] :

$$c_l^2 = c_h^2 + \frac{4}{3} \frac{G}{\rho} \quad (1.44)$$

et

$$c_t^2 = \frac{G}{\rho} \quad (1.45)$$

où c_h est la vitesse du son thermodynamique standard relative aux milieux fluides.

2. La fonction d'écoulement plastique est définie dans l'espace des contraintes. Celui-ci peut-être à neuf dimensions dans une géométrie 3D ou à quatre dimensions dans une géométrie 2D. Dans ces espaces, les domaines d'élasticité et de plasticité sont séparés par une hypersurface appelée surface de charge. Cette hypersurface a une équation du type $f(\sigma_{ij}) = 0$ où f est appelée fonction d'écoulement plastique.

Le deuxième cas correspond au régime plastique. Dans ce cas, seules des ondes de compression/détente peuvent se propager, et les vitesses du son dans ce cas sont $c_l = c_h$ et $c_t = 0$. En effet, comme présenté précédemment, lors de la déformation plastique, des dislocations apparaissent par cisaillement. Celles-ci, similaires à des ruptures microscopiques, empêchent alors les plans atomiques de transmettre des mouvements transverses à leurs proches voisins. De plus, il est à noter que lors d'une déformation plastique, le phénomène de durcissement³ peut augmenter la limite élastique du matériau [75]. Cependant, ce phénomène, aussi appelé écrouissage, concerne exclusivement les métaux (matériaux ductiles) et plus spécifiquement, les métaux non-fragile et plastifiable (avec un domaine de plasticité important) et sans comportement viscoélastique dans la gamme de température des opérations de transformation. Ceci limite donc le nombre de matériaux concernés par ce type de phénomène. Dans cette étude, les matériaux considérés, tels que les verres, étant de type fragiles et présentant une zone de plasticité peu importante avant rupture [73], l'hypothèse d'un comportement plastique parfait est considéré et la limite d'élasticité est supposée constante. L'évolution temporelle du déviateur des contraintes est ainsi assu-

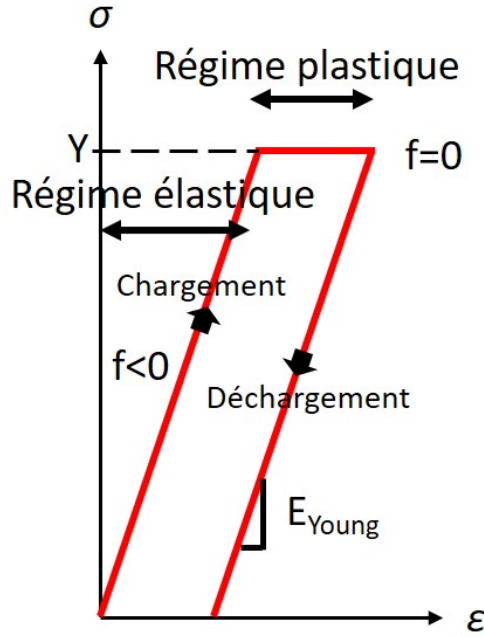


FIGURE 1.10 – Courbe contrainte-déformation typique d'un matériau solide avec un comportement plastique parfait. Illustration de la valeur de la fonction de plasticité f en fonction du régime de chargement et de déchargement de contrainte.

jettie à la fonction d'écoulement plastique qui détermine à quel régime de déformation est soumis le matériau. La fonction d'écoulement plastique peut s'écrire de manière générale de la façon suivante :

$$f = \sigma_{eq} - Y \quad (1.46)$$

3. Lorsqu'une sollicitation en contrainte est appliquée à un métal et est supérieure à sa limite d'élasticité, celui-ci va subir des déformations plastiques (irréversibles). Par la suite, si une nouvelle sollicitation en contrainte lui est appliquée, celle-ci devra être au moins égale à la contrainte maximale de la précédente sollicitation pour de nouveau induire des déformations plastiques. La limite d'élasticité du solide a donc été augmentée, ainsi que sa dureté. On dit que le métal a été durci.

où Y représente la limite d'élasticité du matériau et σ_{eq} est une contrainte locale effective, appelée contrainte équivalente. Dans cette étude la fonction d'écoulement plastique est définie par le critère de von Mises [76]. Ce critère, très largement utilisé, a été choisi afin de simplifier les modèles dans un premier temps. D'autres critères, plus complexes, permettant par exemple de décrire précisément la densification des verres [77] pourraient être également utilisés. Cependant on suppose que les comportements généraux obtenus et d'intérêt restent les mêmes. Différents critères existants, celui de von Mises inclus, sont présentés en Annexe C. Dans le cas du critère de von Mises, cette contrainte équivalente, dite également de comparaison, peut s'écrire :

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} Tr(\bar{\bar{S}} \cdot \bar{\bar{S}})} \quad (1.47)$$

1.2.5 Traitement des transitions de phases

L'énergie absorbée dans le matériau peut engendrer localement des transitions de phases isochores pouvant conduire le solide jusqu'à l'état de plasma dense (densité du solide). L'onde de choc induite par le dépôt d'énergie, peut également induire des changements de phase solide-liquide en modifiant la densité du matériau et en l'échauffant. En effet, l'énergie qu'elle transporte et qu'elle restitue au matériau sous forme de déplacement de matière (modification de densité) et notamment de frottements (échange de chaleur), au travers de la déformation plastique et du cisaillement, peut localement conduire le matériau dans des conditions thermodynamiques au-delà de son point de fusion, amenant à des comportements hydrodynamiques particuliers présentés plus loin dans ce manuscrit.

De plus, les hautes pressions atteintes dans le solide, lors du passage des ondes de compression, peuvent induire des transitions de phases de type solide-solide. En effet, pour des contraintes supérieures à 35 GPa, un changement de pente dans l'Hugoniot de la silice fondue est visible, indiquant une cristallisation vers une phase dense de SiO_2 , appelée stishovite [78]. Cependant, le temps requis à la matière pour réaliser une telle transition de phase est de l'ordre de 1 à 10 ns en fonction de la force du choc [79]. Dans le cadre de cette étude et des scénarios présentés, ces échelles de temps sont beaucoup plus longues que le temps pendant lequel la matière est dans les conditions requises lorsque le choc passe. De plus, aucune observation expérimentale, à notre connaissance, n'a révélé la présence d'une phase stishovite dans la silice fondue après une interaction avec un laser femtoseconde. Les transitions de phase solide-solide sont donc négligées dans cette étude.

Lors d'une transition de phase solide-liquide, des discontinuités dans les profils des grandeurs thermodynamiques sont observées. Numériquement, ce genre de comportement peut entraîner des problèmes de convergence. De plus, les propriétés élasto-plastiques du solide disparaissent. La transition de phase solide-liquide est donc traitée par un modèle de ramollissement, de la même manière que dans le code hydrodynamique 1D ESTHER [80–84] développé au CEA. Cette transition se modélise par un polynôme $g(e_{int})$ pondérant la limite d'élasticité Y et le module de cisaillement G (Fig. 1.11), en fonction de la valeur locale d'énergie interne e_{int} .

$$g(e_{int}) = \begin{cases} 1 & \text{si } e_{int} < e_{int}^{solid} \text{ (Phase solide)} \\ 1 - 3 \left(\frac{e_{int} - e_{int}^{solid}}{e_{int}^{melting} - e_{int}^{solid}} \right)^2 + 2 \left(\frac{e_{int} - e_{int}^{solid}}{e_{int}^{melting} - e_{int}^{solid}} \right)^3 & \text{si } e_{int}^{solid} < e_{int} < e_{int}^{melting} \\ 0 & \text{si } e_{int} > e_{int}^{melting} \text{ (Phase liquide)} \end{cases} \quad (1.48)$$

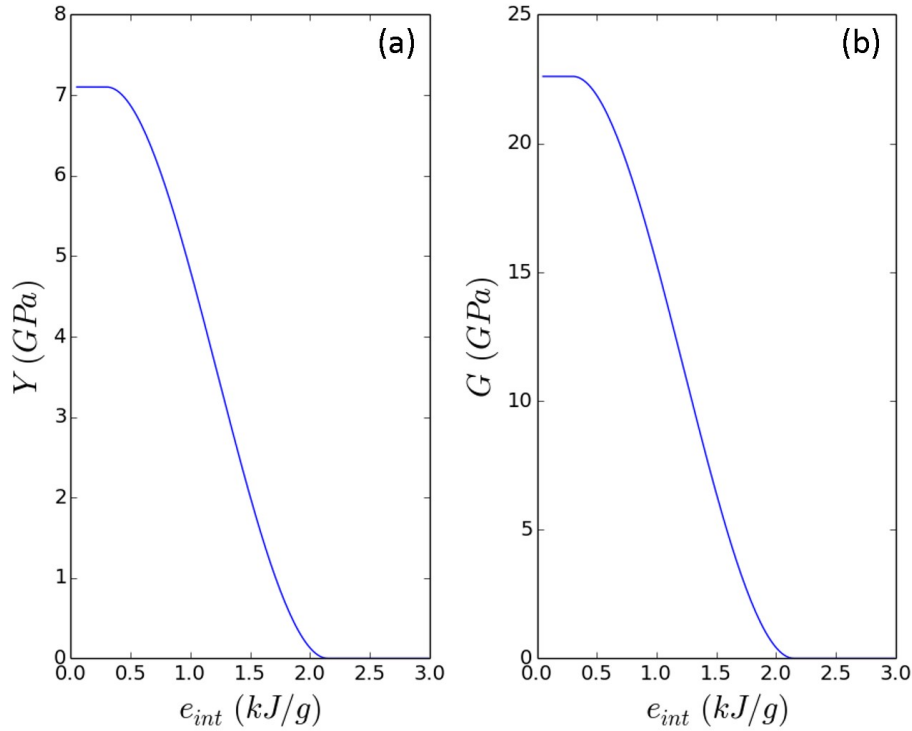


FIGURE 1.11 – Évolution de (a) la limite d'élasticité et (b) du module de cisaillement en fonction de l'énergie interne locale du matériau.

où e_{int}^{solid} est l'énergie interne du solide à 300 K ($e_{int}^{solid} = 0.3$ kJ/g pour la silice) et $e_{int}^{melting}$ est l'énergie interne de fusion. Ceci modélise une transition de phase du second ordre, qui reste correcte pour des matériaux tels que les verres. De cette manière, les propriétés élasto-plastiques du solide sont annulées pour la phase liquide. Le tenseur des contraintes se réduit au tenseur diagonal contenant seulement la pression thermodynamique déterminée par l'EOS et les équations de conservation d'Euler du modèle fluide sont retrouvées. Il est à noter que les transitions liquide-gaz sont traitées par l'EOS.

À l'aide de l'équation d'état analytique de Murnaghan pour le cristal de silice⁴ [86], la dépendance de l'énergie interne de fusion vis-à-vis de la pression peut être tracée (Fig. 1.12) à la densité du solide (2.2 g/cm³). Dans le cas de la silice, $e_{int}^{melting} = 2.15$ kJ/g correspondant à une température de l'ordre de 2000 K [87]. L'énergie interne de fusion augmente avec la pression, variant de 2,15 kJ/g à pression ambiante jusqu'à environ 2,4 kJ/g pour des pressions de l'ordre de 40 GPa. Dans la plupart des cas étudiés, la pression hydrodynamique atteint rarement des pressions de l'ordre de 30 à 40 GPa dans les phases solides. De plus, des tests avec une énergie interne dépendante de la pression ont été menés et aucun changement significatif sur les résultats n'a été observé. Ainsi, dans le cas de la silice, l'énergie interne de fusion est supposée constante en fonction de la pression hydrodynamique.

4. La phase amorphe (fondue) est située dans le diagramme de phase du cristal de silice dans un domaine de basse pression et de basse température (en dessous d'une température de cristallisation) [85]. Ainsi, avant de se liquéfier, la silice amorphe passe par un état cristallin (α -quartz, β -quartz, stishovite, etc) en fonction de la pression. Puisque les transitions solide-solide sont négligées (pas de cristallisation) dû à la rapidité trop importante des phénomènes, la transition solide-liquide de la silice fondue est supposée se faire sans cristallisation préalable. Les énergies de transitions solide-liquide de la silice amorphe sont donc supposées être identiques à celles de sa phase cristalline.

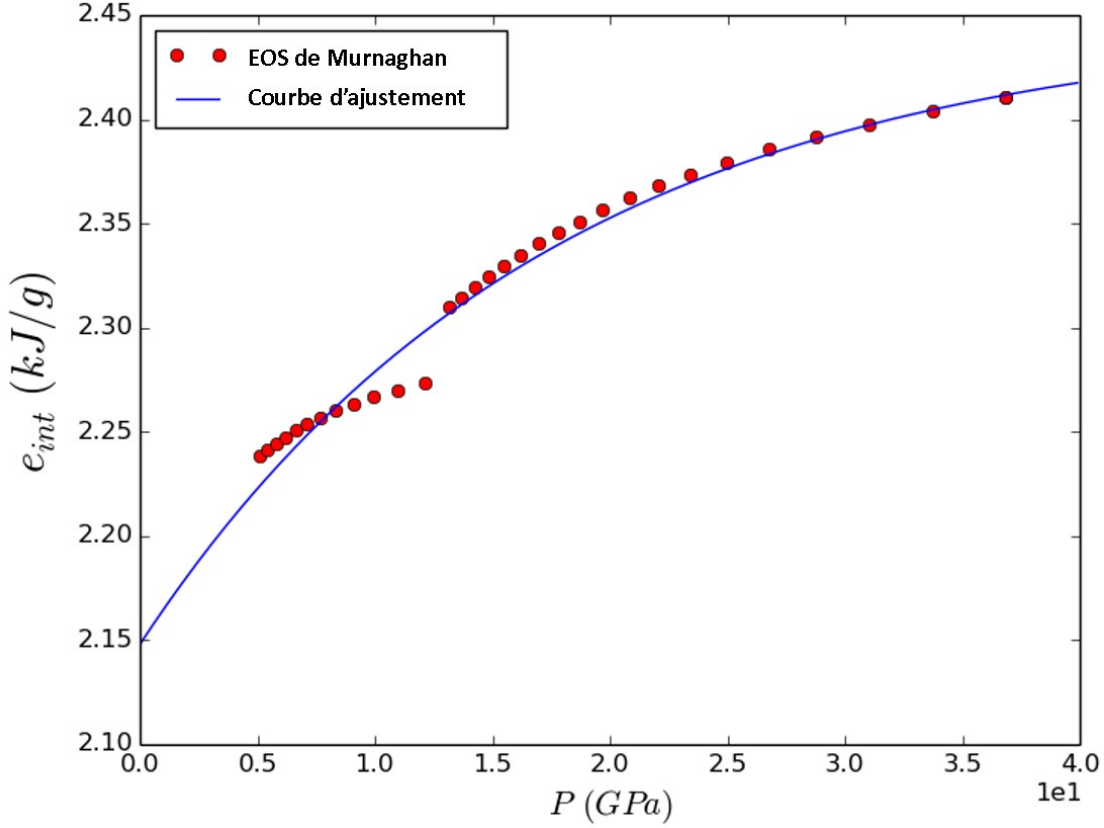


FIGURE 1.12 – Évolution de l'énergie interne de fusion de la silice en fonction de la pression à la densité du solide (2.2 g/cm^3).

1.2.6 Modèle de prédiction de rupture des matériaux

Chaque matériau a une résistance limite face à une contrainte appliquée, au-delà de laquelle une rupture se produit. Dans le cas d'un matériau idéal et homogène, *i.e.* sans défauts et amorphe, la résistance du matériau à une traction, par exemple, correspond à la contrainte exercée capable de séparer les atomes du solide [88]. Dans la réalité, la résistance d'un matériau est diminuée de manière significative par la présence de défauts, d'inhomogénéités, qui initient la formation de fractures et leur propagation dans le solide. Les valeurs limites de résistance d'un matériau mesurées expérimentalement sont alors des limites moyennes effectives. Il existe deux limites principales de résistance : la limite en traction L_t et la limite en compression L_c . En particulier dans les matériaux fragiles, tels que la silice, ces deux limites sont différentes, tandis que dans d'autres matériaux, tels que les métaux, ces deux limites sont identiques. Lors du calcul des contraintes dans le matériau, c'est à dire lors de la résolution du système d'équations (Eqs. (1.32), (1.33) et (1.34)), les éléments du tenseur des contraintes obtenus sont définis dans un repère cartésien orienté. Or, ceci ne garantit pas que l'élément de matière soit dans un état de traction/compression pur sans cisaillement, ou inversement avec un cisaillement maximal, et donc la comparaison d'une des contraintes avec une des limites de résistance du matériau n'a pas de sens. Pour cela, il est nécessaire de se placer dans un repère où l'élément de matière est en pure compression/traction. Ainsi, les contraintes dans ce repère peuvent être comparées à L_t et L_c .

Contraintes principales et cisaillement maximal

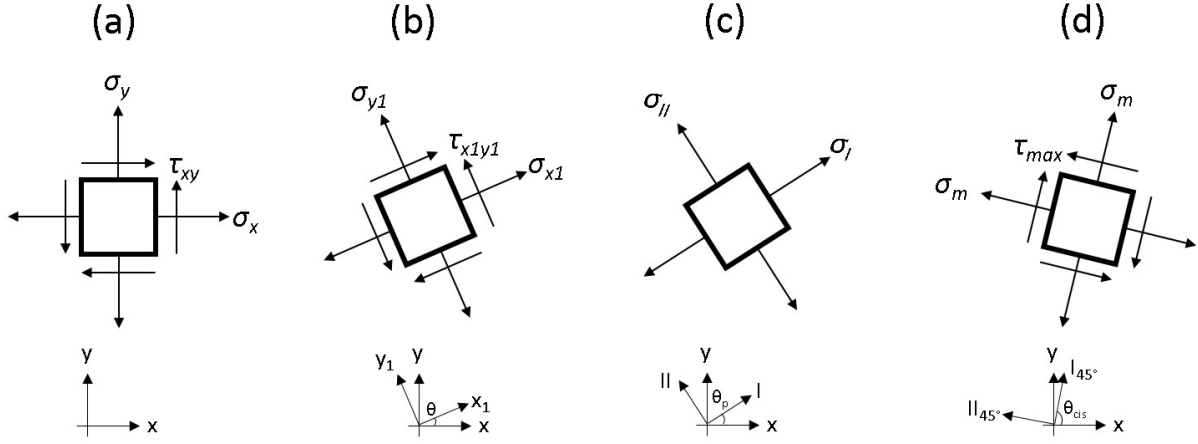


FIGURE 1.13 – Illustration des états de contraintes d'un élément de matière en fonction du repère d'espace choisi : (a) repère cartésien ; (b) repère quelconque tourné d'un angle θ par rapport à l'axe Ox ; (c) repère des contraintes principales tourné d'un angle $\theta = \theta_p$ par rapport à l'axe Ox ; (d) repère du cisaillement maximal tourné d'un angle $\theta = \theta_p \pm 45^\circ$ par rapport à l'axe Ox.

Les éléments du tenseur des contraintes $\bar{\sigma}$ dans le repère cartésien 2D sont définies par σ_x , σ_y et τ_{xy} localement dans chaque élément du maillage comme étant, respectivement, les contraintes longitudinales suivant Ox et Oy et le cisaillement (Fig. 1.13(a)). Ce sont les projections sur les deux axes cartésiens des contraintes appliquées à l'élément de matière. En connaissant les valeurs locales de ces contraintes dans cette direction particulière, il est possible de déterminer d'autres projections σ_{x1} , σ_{y1} et τ_{x1y1} dans n'importe quelle autre direction faisant un angle θ avec l'axe des abscisses [75] (Fig. 1.13(b)) :

$$\sigma_{x1} = \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2} + \frac{\sigma_x - \sigma_y}{2} \cos 2\theta + \tau_{xy} \sin 2\theta \quad (1.49)$$

$$\tau_{x1y1} = -\frac{\sigma_x - \sigma_y}{2} \sin 2\theta + \tau_{xy} \cos 2\theta \quad (1.50)$$

$$\sigma_{y1} = \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2} - \frac{\sigma_x - \sigma_y}{2} \cos 2\theta - \tau_{xy} \sin 2\theta \quad (1.51)$$

Il existe un angle particulier θ_p pour lequel σ_{x1} est maximisée alors que σ_{y1} est simultanément minimisée et le cisaillement τ_{x1y1} est annulé. Cet angle peut être déterminé à l'aide de la relation :

$$\tan 2\theta_p = \frac{2\tau_{xy}}{\sigma_x - \sigma_y} \quad (1.52)$$

Ceci revient à une diagonalisation du tenseur des contraintes. Il s'agit d'un repère particulier appelé repère principal où l'élément de matière est en pure traction/compression (Fig. 1.13(c)). Ainsi, dans ce repère, une comparaison entre contraintes principales et limites de résistance du matériau est possible. On définit σ_I comme étant la contrainte maximale (minimale) et σ_{II} comme étant la contrainte principale minimale (maximale) en traction (compression) :

$$\sigma_I = \sigma_m + R \quad (1.53)$$

$$\sigma_{II} = \sigma_m - R \quad (1.54)$$

avec

$$\sigma_m = \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2} \quad (1.55)$$

et

$$R = \sqrt{\left(\frac{\sigma_x - \sigma_y}{2}\right)^2 + \tau_{xy}^2} \quad (1.56)$$

Par convention $\sigma_I > \sigma_{II}$ ⁵.

Effectuer une rotation du repère principal d'un angle de $\pm 45^\circ$ (cercle de Mohr [89]) conduit à un repère où la contrainte en cisaillement est maximale et les contraintes normales sont égales à la contrainte moyenne σ_m (Fig. 1.13(d)). Ce repère est utile pour connaître les régions où le cisaillement est maximal et peut créer des dislocations ou des clivages. Dans ce repère les relations sont les suivantes :

$$\tau_{max} = R \quad (1.57)$$

et

$$\theta_{cis} = \theta_p \pm 45^\circ \quad (1.58)$$

Critère de Mohr

Pour déterminer les régions critiques en compression et en traction, où les contraintes principales dépassent les limites de résistance L_c et L_t intrinsèques au matériau, le critère de Mohr est utilisé [75]. Si σ_I et σ_{II} ont le même signe, la contrainte la plus élevée ne

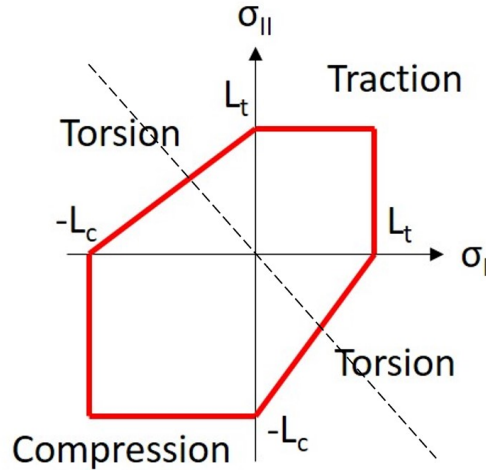


FIGURE 1.14 – Zone dans l'espace des contraintes principales où aucune fracture n'est initiée, selon le critère de Mohr.

doit pas excéder L_c ou L_t , en fonction de l'état de contrainte. Dans le cas d'un état de traction, où les contraintes sont positives, σ_I représente la contrainte maximale et σ_{II} la

5. Que ce soit en traction ou en compression, cette convention est respectée. En traction, les contraintes sont positives donc σ_I (la contrainte principale maximale) est bien supérieure à σ_{II} . En compression, les contraintes sont négatives. σ_{II} , qui est dans ce cas la contrainte maximale, est en valeur absolue plus grande que σ_I , cependant elle reste bien inférieure à cette dernière.

contrainte minimale. Dans ces conditions, un élément de matière est dans un état critique si :

$$\frac{\sigma_I}{L_t} \geq 1 \quad (1.59)$$

Dans le cas opposé d'un état de compression, un élément de matière est dans un état critique si :

$$\frac{|\sigma_{II}|}{L_c} \geq 1 \quad (1.60)$$

Enfin si σ_I et σ_{II} sont de signes opposés, un élément de matière est dans un état critique si :

$$\frac{|\sigma_I - \sigma_{II}|}{L_t} \geq 1 \quad (1.61)$$

ou

$$\frac{|\sigma_I - \sigma_{II}|}{L_c} \geq 1 \quad (1.62)$$

Ces différentes conditions sont résumées par un graphique dans l'espace des contraintes principales (Fig. 1.14) où la région délimitée en traits rouges représente la zone à l'intérieur de laquelle les contraintes ne sont pas suffisantes pour induire une rupture (fracture). Dans le cas de la contrainte de cisaillement maximal, celle-ci induit une zone critique lorsqu'elle dépasse une certaine limite, déterminée expérimentalement, égale à $L_t/2$ [90]. Cette limite est deux fois plus faible que la résistance limite en traction car le cisaillement est le processus le plus efficace quant à l'initiation de rupture dans les matériaux.

Comme dit plus haut, les défauts de la matière initient la formation et propagent les ruptures dans le solide. La probabilité de rencontre et d'activation d'un défaut, *i.e.* d'initier une fracture, dépend de la taille de la zone critique, où les contraintes dépassent les limites de résistance du matériau et de la densité de défauts. Cette probabilité peut être définie par une fonction, une loi de Weibull par exemple, dépendante de la distribution spatiale des défauts, de la contrainte et du volume dans laquelle elle est appliquée au matériau [91].

Critère de rupture probabiliste : Loi de Weibull

La loi de Weibull est à l'origine, en théorie de la probabilité, une loi continue applicable dans de nombreux domaines où apparaissent des processus aléatoires [92]. Elle est notamment applicable dans le cas présent d'un matériau fragile, comme la silice, dont la rupture n'est pas un phénomène déterministe mais aléatoire. De plus, son expression s'inscrivant dans le formalisme de la mécanique des milieux continus par la modélisation d'un matériau en une infinité de volumes infinitésimaux dV , cette loi est bien adaptée. Elle permet, en outre, de prendre en compte l'influence du volume de matériau auquel est appliqué la contrainte. En effet, pour les matériaux fragiles, plus le volume soumis à une contrainte est grand, plus la probabilité de rencontre d'un *gros* défaut pouvant initier une fracture dite *fragile* sous faible contrainte (inférieure aux limites de résistance du matériau) est importante. Inversement, plus le volume soumis à une contrainte est petit plus le matériau fragile résiste.

Différentes hypothèses entrent en jeu dans la loi de Weibull [91]. Tout d'abord, la résistance à la rupture de chaque élément de volume est modélisée par des variables aléatoires indépendantes. Le comportement aléatoire de ces variables permet de prendre en compte la dispersion observée des ruptures fragiles. Leur indépendance implique en revanche qu'une

rupture est un phénomène ponctuel pouvant intervenir dans un volume, indépendamment des autres, tant que celui-ci contient des défauts pouvant mener à une fracture en fonction de son état de contrainte. Dans la réalité, cela n'est pas toujours le cas. Une deuxième hypothèse suggère qu'un défaut activé dans un volume dV entraîne la ruine de l'ensemble de la structure, *i.e.* que si la rupture intervient dans un élément de volume, les propriétés mécaniques de l'ensemble de la structure sont supposées perdues. Dans cette étude, cette dernière hypothèse n'est pas prise en compte, étant surtout couramment utilisée comme un critère dans le dimensionnement usuel des pièces mécaniques à usage industriel ou des composants de structures dans différents domaines (aéronautique, bâtiment,...).

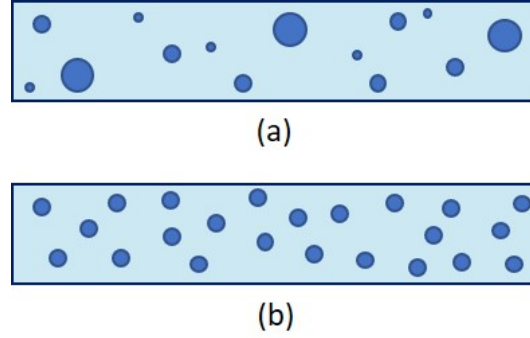


FIGURE 1.15 – Répartitions typiques des défauts dans un matériau avec un module de Weibull m (a) faible et (b) élevé.

La probabilité d'activation des défauts suit une loi de Poisson, classiquement utilisée pour dénombrer l'occurrence d'évènements ponctuels. Ici les évènements ponctuels sont les activations des défauts dans le matériau. On définit par V , le volume de matériau considéré (où des contraintes non nulles sont appliquées) et par λ_d la densité de défauts activés dans ce volume. Dans le cas d'une compression uniaxiale (ou traction uniaxiale), la probabilité qu'un tel volume n'ai aucun défaut activé (probabilité de survie) est donnée par [91, 93] :

$$P_s = e^{-\lambda_d V} \quad (1.63)$$

Le paramètre λ_d peut être défini par une loi de puissance, telle que déterminée par Weibull d'après ses observations expérimentales, de la manière suivante :

$$\lambda_d = \frac{1}{V_0} \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^m \quad (1.64)$$

avec σ la contrainte appliquée, σ_0 la contrainte moyenne d'activation (*i.e.* ici la limite de résistance moyenne du matériau), V_0 le volume caractéristique d'étude (échelle d'espace). Il est à noter que σ_0 et V_0 ne sont pas indépendants et sont reliés par le facteur d'échelle, traduisant la contrainte moyenne d'activation d'un défaut dans le volume d'étude caractéristique, qui vaut $\sigma_0 V_0^{1/m}$. m est le paramètre de dispersion de λ_d , nommé module de Weibull. Il s'agit d'un paramètre intrinsèque à chaque matériau, caractérisant la dispersion et la densité des défauts. Plus ce paramètre est petit, plus la répartition et la taille des défauts dans le matériau sont hétérogènes (Fig. 1.15(a)), plus il est grand, plus la répartition et la taille sont homogènes (Fig. 1.15(b)). La probabilité d'initiation d'une fracture, *i.e.* la probabilité d'activation d'un défaut, peut alors s'écrire [91, 93] :

$$P_f = 1 - P_s = 1 - \exp \left[-\frac{V}{V_0} \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^m \right] \quad (1.65)$$

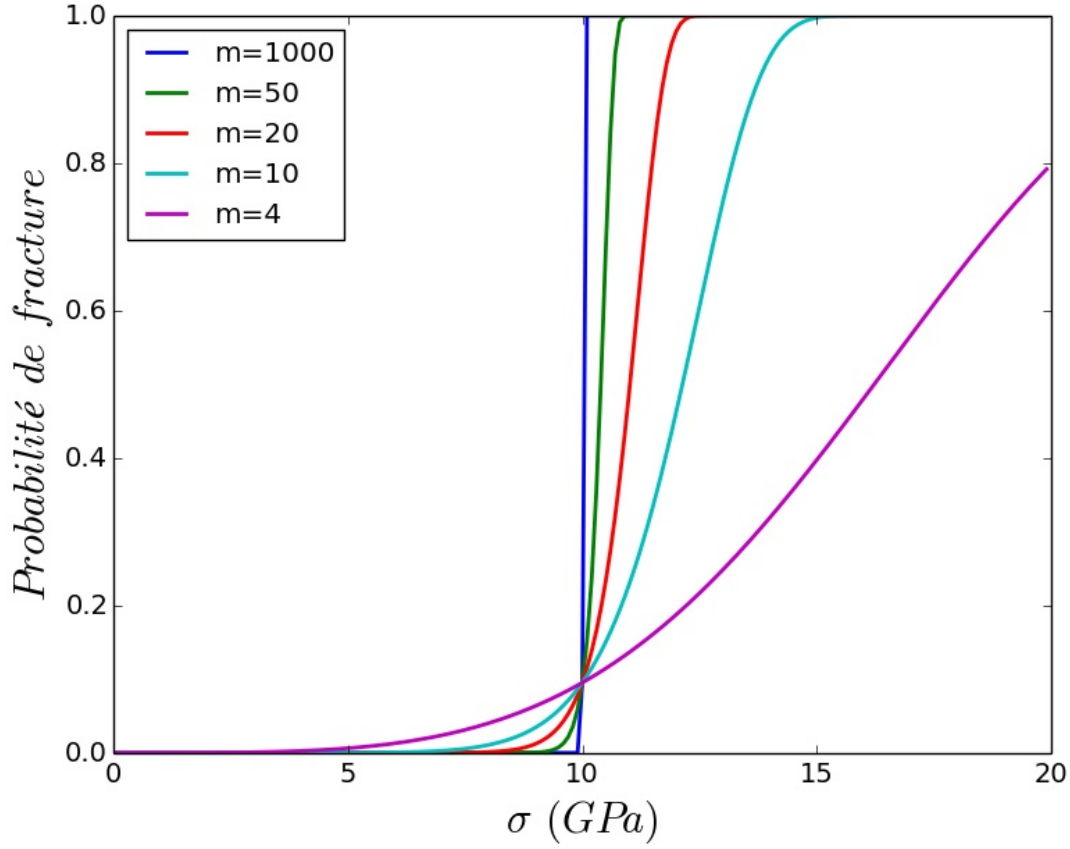


FIGURE 1.16 – Distribution de la probabilité d’initiation d’une fracture en fonction de la contrainte appliquée pour différentes valeurs du module de Weibull : $m = 4$; 10 ; 20 ; 50 ; 1000.

Les distributions de probabilité d’initiation d’une fracture en fonction de la contrainte appliquée pour différents modules de Weibull m sont présentées sur la Fig. 1.16. Dans un premier temps dans cette section, des ordres de grandeurs typiques ont été choisis et seront justifiés plus amplement dans le chapitre suivant 2. Ainsi, le rapport V/V_0 est pris égal à 0.1, ce qui correspond de manière approximative aux rapports observés dans les applications présentées dans ce manuscrit entre la taille des régions où les contraintes sont non nulles et les échelles caractéristiques d’étude. Quant au module de Weibull m , bien que celui-ci varie entre 4 et 10 sur une échelle microscopique [94, 95], la distribution de probabilité a été tracée pour différentes valeurs de m , de 4 à 1000, pour rendre compte de l’effet de la dispersion et de la densité de défaut dans le matériau. De plus, $\sigma_0 = L_c = 10$ GPa, pour cet exemple. De manière générale la probabilité de fracture croît de zéro, pour des contraintes inférieures à 5 GPa, jusqu’à 1, pour des contraintes supérieures à 20 GPa. Pour un module de Weibull de 5, la distribution de probabilité est plus large, augmentant les probabilités de fractures pour des contraintes faibles ($\leq L_c = 10$ GPa) et diminuant les probabilités de fractures pour les contraintes plus fortes ($\geq L_c$). Le matériau semble donc plus susceptible de rompre de manière fragile à cause de la répartition plus hétérogène des défauts, correspondant à des échelles proches de la centaine de μm [95]. En augmentant le module de Weibull, la répartition des défauts devenant de plus en plus homogène due à la réduction de l’échelle d’espace (probabilité de rencontre de défaut

plus faible), la distribution de probabilité devient de moins en moins large. L'exemple $m = 1000$ correspond au cas où les défauts dans le matériau sont répartis de manière très homogène et le matériau a une probabilité de fracture maximale dès que la contrainte dépasse la limite de résistance. Cela correspond à un matériau non fragile, comme les métaux.

La Figure 1.17 présente les distributions de probabilité d'initiation d'une fracture en fonction de la contrainte appliquée pour différents rapport des volumes V/V_0 . Le module de Weibull et la contrainte d'activation sont, respectivement, fixés à $m = 7$ et $\sigma_0 = L_c = 10$. Là encore, de manière générale, la probabilité de fracture croît de zéro,

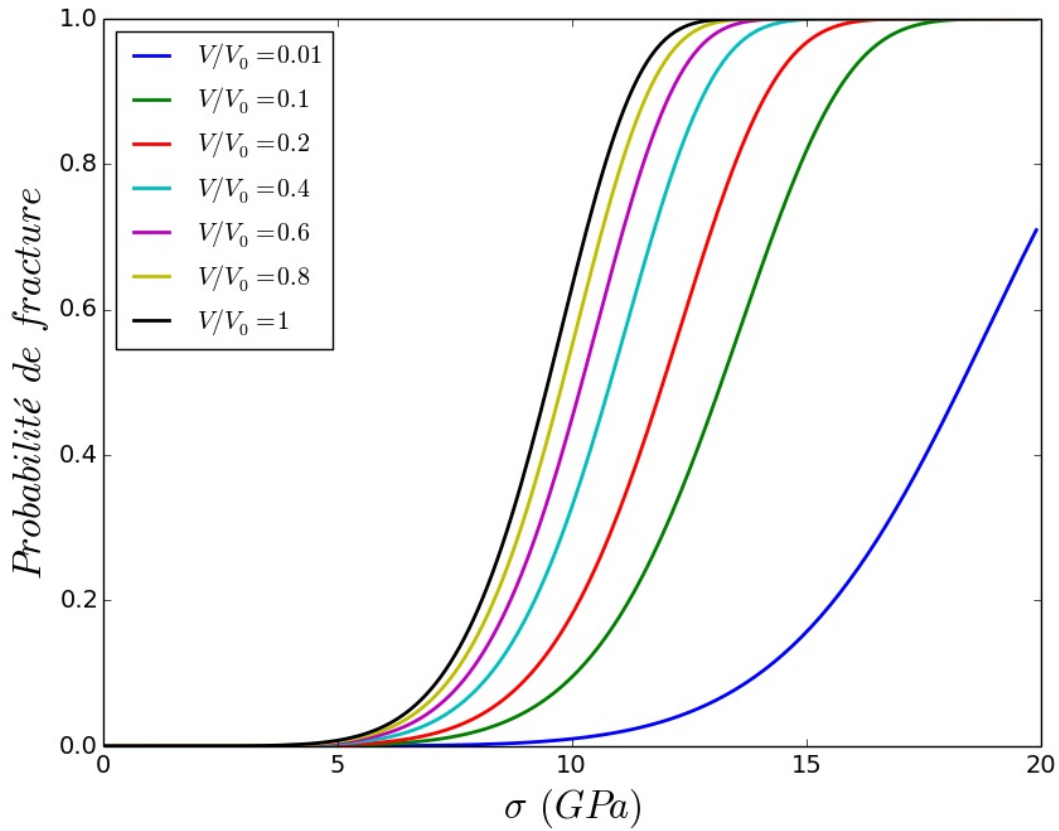


FIGURE 1.17 – Distribution de la probabilité d'initiation d'une fracture en fonction de la contrainte appliquée pour différents volumes de matériau considéré où la contrainte est non nulle : $V = 1 ; 10 ; 20 ; 40 ; 60 ; 80 ; 100$

pour des contraintes inférieures à 5 GPa, jusqu'à 1, pour des contraintes supérieures à 20 GPa. Pour des volumes V cent fois inférieurs à la taille caractéristique d'étude V_0 , la distribution de probabilité de fracture se décale vers des contraintes plus haute. La probabilité est dans ces cas nulle tant que la contrainte ne dépasse pas 10 GPa environ et devient maximale au-delà de 20 GPa. Cela signifie que le matériau résiste à de fortes contraintes (supérieures à sa résistance limite) tant que celles-ci sont appliquées dans un volume très inférieur à sa taille caractéristique ($V \ll V_0$). Cela se comprend par le fait que la probabilité de présence d'un défaut dans le volume d'application de la forte contrainte est faible. En augmentant le volume V , les distributions de probabilité se situent autour de la contrainte d'activation moyenne σ_0 . Dans ces cas, les probabilités de présence de

défaut dans ces volumes plus importants augmentent. De ce fait, les probabilités d'activation de ces défauts augmentent également. L'effet des ruptures fragiles est visible dans ces cas. Pour des volumes comparables à V_0 , les probabilités de l'initiation de fracture par des contraintes inférieures à la limite de résistance du matériau (ici 10 GPa), augmentent et sont de l'ordre de 20 à 90 % entre 8 et 10 GPa.

Ces deux figures montrent donc bien le caractère aléatoire probabiliste de la fracture de tels matériaux en fonction de la densité de défauts qu'ils contiennent et des tailles des régions soumises à des contraintes non nulles.

Chapitre 2

Simulations Thermo-Élasto-Plastique de la formation de cavités dans la silice fondue

*« Non, n'essaie pas ! Fais le ou
ne le fais pas ! Il n'y a pas
d'essai. »*

Maître Yoda

Sommaire

2.1	Etat de l'art expérimental et théorique	51
2.2	Evolution du code hydrodynamique CHIC et hypothèses de la simulation thermo-élasto-plastique	54
2.3	Simulations d'une cavité unique	58
2.3.1	Comparaison du modèle fluide et élasto-plastique dans le cas 1D	58
2.3.2	Simulation 2D	63
2.3.3	Prédiction des zones de fractures potentielles	70
2.4	Simulation de la formation de multiple cavités	73
2.4.1	Cas 2D de la formation d'une double cavité	74
2.4.2	Cas 2D de la formation de multiple cavités	79

La génération de cavités dans un volume de silice est étudiée dans ce chapitre. Ces structures peuvent être induites en focalisant fortement un laser femtoseconde à l'intérieur du matériau. Se faisant, au cours de l'interaction laser-solide, telle que présentée dans le chapitre précédent (Sec. 1.1), des processus d'ionisation non-linéaires amènent à une absorption significative de l'énergie de l'impulsion, confinée dans le volume du matériau [15–17, 20]. Des énergies absorbées de l'ordre de la dizaine de nJ engendrent alors des températures et des pressions suffisamment élevées (supérieures au module d'élasticité isostatique du solide¹) pour déformer le matériau et créer un vide de matière.

Ce chapitre a pour but principal de comprendre et d'expliquer la relaxation d'un volume de matière chauffée, confiné dans le matériau solide froid, c'est à dire de décrire la structuration en volume d'un diélectrique par un laser femtoseconde fortement focalisé induisant des cavités.

Dans un premier temps, un regard est porté sur les observations expérimentales de la formation de cavité dans les diélectriques et notamment dans la silice [15–17, 20]. Également, un certain nombre de travaux théoriques sur lesquels se base cette étude sont mentionnés afin d'établir un état de l'art expérimental et théorique de la structuration d'un solide par laser femtoseconde. Le code de simulation utilisé et son évolution, avec notamment l'ajout du modèle élasto-plastique, est ensuite présenté. Un rappel et une justification de chaque hypothèse de la modélisation des cas considérés sont également faits.

Dans un deuxième temps, la simulation thermo-élasto-plastique de la génération d'une cavité unique dans la silice est traitée et comparée aux observations expérimentales. Tout d'abord, les résultats obtenus avec le modèle thermo-élasto-plastique, dans une géométrie 1D, sont comparés à un modèle fluide où le comportement élasto-plastique du solide n'est pas pris en compte. Puis, les résultats de la simulation 2D sont présentés et les processus mécaniques en jeu sont décrits afin de comprendre les différentes étapes de la génération d'une telle structure et le lien étroit de sa dynamique de formation avec la réponse élasto-plastique du matériau. Enfin, une prédiction des zones critiques de probabilité de fractures est proposée.

Dans un troisième temps, la formation d'une cavité unique est d'abord étendue à l'étude de la génération d'une double cavité. Les interactions entre les deux sous-structures voisines, distantes de quelques dixième de micromètres et formées de manière simultanées, sont détaillées. L'influence de la distance séparant les deux cavités formées est notamment investiguée. En effet, en fonction de ce paramètre, des variations significatives de la contrainte en cisaillement autour des deux cavités sont observées, jouant un rôle important dans l'apparition ou non des fractures.

Enfin, dans une dernière partie, le cas plus général de la formation de multiple cavités est présenté dans deux configurations différentes. La première traite du cas où les différentes cavités se forment de manière simultanée. Il s'agit du cas étendu de la formation simultanée de deux cavités. Puis, la deuxième configuration correspond au cas où les différentes cavités sont formées de manière successives. Des différences importantes sont observées quant aux interactions entre les différentes sous-structures, jouant alors un rôle important sur la localisation des zones critiques de fractures potentielles.

Ces différents cas sont notamment étudiés pour comprendre et décrire les observations

1. Le module d'élasticité isostatique d'un solide K (en anglais : *bulk modulus*) est le coefficient de proportionnalité reliant le premier invariant du tenseur des contraintes et le premier invariant du tenseur des déformations. Il peut être exprimé en fonction du module de Young E et du module de cisaillement μ à l'aide de la relation : $K = \frac{E\mu}{3(3\mu - E)}$.

expérimentales de la génération de nano-cavités [15–17, 20] mais également pour mettre en avant les différents mécanismes à l’origine de la formation de nano et micro-structures utiles dans différentes applications [14, 33, 96].

2.1 Etat de l’art expérimental et théorique

Bien que les premières expériences sur les micro-explosions et les dommages induits par laser dans le volume de matériaux transparents soient entreprises au début des années 1970 [97], il faut attendre la fin des années 90 pour que les premières études spécifiques à la formation de cavités apparaissent. Les travaux de E. N. Glezer *et al.* [96] peuvent être mentionnés, avec notamment la mise au point d’une nouvelle méthode de stockage de données optiques tridimensionnelles. Dans la plupart des expériences menées sur les micro-explosions et les formations de cavités [15–17, 20] (Fig. 2.1), les lasers de type Ti : saphir sont employés. Ce dernier confère une longueur d’onde λ_L de 800 nm et des énergies variant de quelques dizaines de nJ à quelques μ J avec des durées d’impulsion paramétrées de l’ordre de 100 fs. Quant aux matériaux utilisés, le saphir, le quartz, la silice ou encore le BK7 sont favorisés. Bien que ces derniers puissent être très différents de par leur nature (cristalline/amorphe) ou encore de par leurs propriétés mécaniques, les tendances et les comportements observés sont très similaires.

Pour focaliser très fortement le laser à l’intérieur du volume des matériaux diélectriques, des objectifs de microscope sont utilisés avec des ouvertures numériques (NA) d’environ 0,4 à 1,4. Ces conditions de focalisation extrêmes amènent à des volumes focaux et des surfaces focales² de l’ordre de quelques dixièmes de μm^3 , dont les largeurs sont comparables à la longueur d’onde. De cette manière, pour des impulsions de 100 fs avec des énergies de plusieurs dizaines de nJ à 100 nJ, les intensités obtenues sont de l’ordre de 10^{14} W/cm² au point de focalisation, excédant le seuil de claquage optique du matériau, *i.e.* son seuil d’endommagement. Le volume focal est situé, en fonction de la distance de focalisation choisie, entre 5 et 50 μm sous la surface du matériau. L’impulsion laser est supposée ne pas induire de dommage entre la surface et le point de focalisation, où les intensités plus modérées (faisceau pas assez focalisé), *i.e.* inférieure au seuil de claquage optique du matériau. De plus, afin d’éviter les phénomènes d’auto-focalisation et donc dans l’optique de déposer l’énergie laser à une position bien particulière à l’intérieur du matériau transparent, la puissance laser requise doit être inférieure à la valeur critique P_c d’auto-focalisation. Dans le cas de la silice $P_c = 2$ MW [17].

Les intensités atteintes dans ces conditions excitent la matière solide via l’ionisation multiphotonique et l’ionisation par impact. Ces deux phénomènes qui sont, par ailleurs, à l’origine du claquage optique du matériau, vont transformer la zone irradiée par le spot laser en un plasma (Fig. 2.2(a)) de densité solide (densités d’électrons de l’ordre de 10^{23} cm⁻³ à densité standard du matériau solide et à 800 nm). Cette densité d’électrons de l’ordre de la densité critique du plasma (dépendante de la fréquence du laser), la longueur d’absorption et le volume d’absorption diminuent [16]. Ce dernier est alors de l’ordre de 10^{-2} μm^3 [16], *i.e.* avec une taille caractéristique inférieure à la longueur d’onde, tandis que la densité d’énergie déposée par le laser augmente fortement, de l’ordre du

2. Le volume focal est défini comme un cylindre de rayon $r_{1/2} = \sqrt{\frac{\ln 2}{2}} r_0$ avec $r_0 = \frac{0,61\lambda_L}{NA}$ et de hauteur deux fois la longueur de Rayleigh $2z_0 = 2\pi r_0^2 \frac{n}{\lambda_L}$ avec n l’indice de réfraction du milieu. Ainsi, $V_{1/2} = \pi r_{1/2}^2 2z_0 = 0,947 \frac{\lambda_L^3 n}{NA^4}$ et $S_{1/2} = \pi r_{1/2}^2 = 0,405 \frac{\lambda_L^2}{NA^2}$ (surface focale). Ces valeurs sont calculées à mi-hauteur du profil gaussien de l’impulsion.

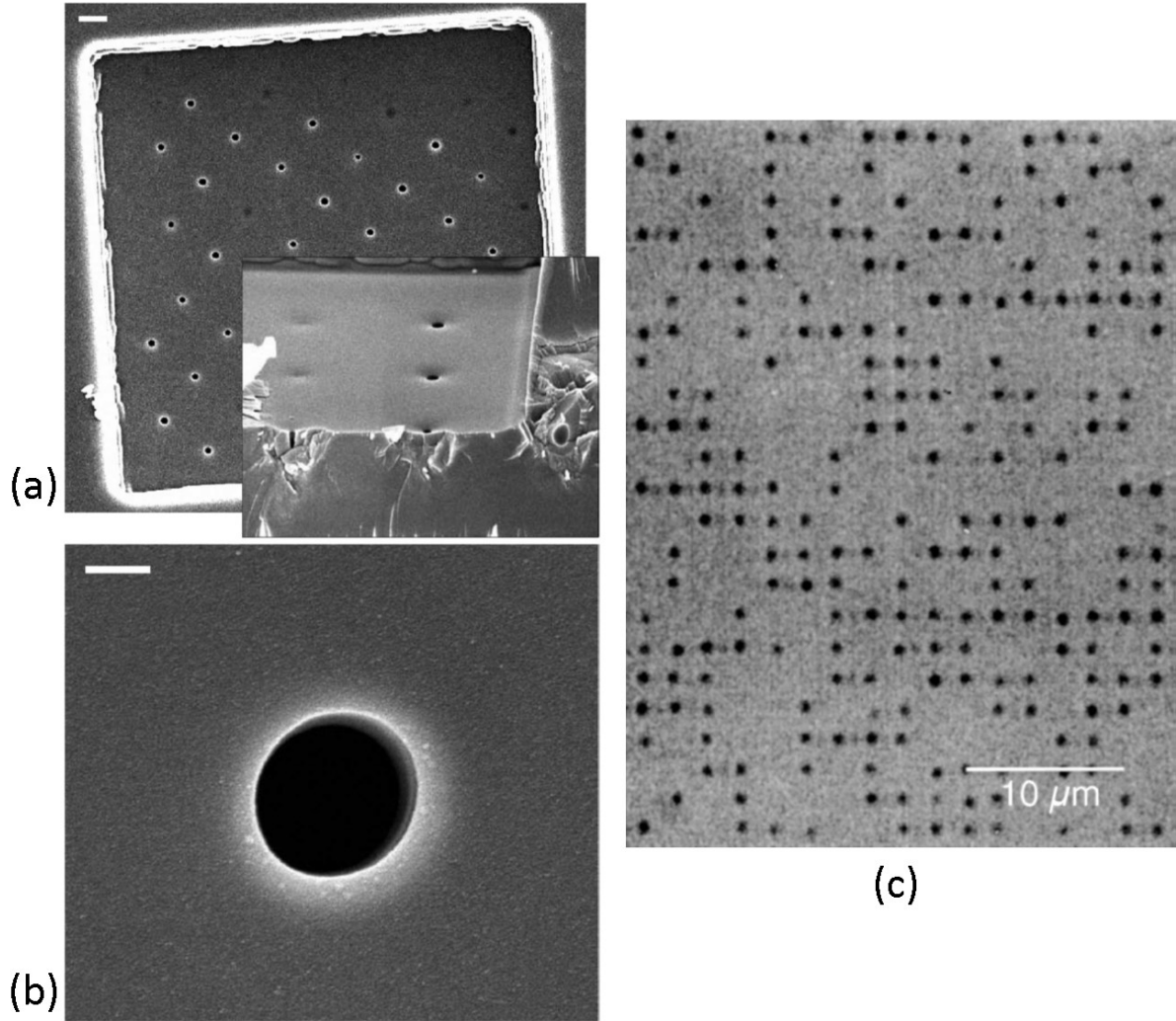


FIGURE 2.1 – (a et b) Image SEM de nano-cavités dans le saphir [17]. (a) Les vides de matière ont été générés par une seule impulsion de 100 nJ, 200 fs à 800 nm, focalisé par une lentille d’objectif de microscope avec une ouverture numérique $NA = 1.35$. (b) Image d’une cavité unique de diamètre 220 nm. Les barres d’échelle sont de 1 μm (a) et de 100 nm (b) ; (c) Photographie d’un motif de données binaires stocké dans la silice fondue avec un espacement entre chaque bit de donnée de 2 μm [96].

MJ/cm^3 [17, 20]. Des températures de l’ordre de 10^4 - 10^5 K sont alors atteintes, à densité constante, induisant ainsi des hautes pressions, de l’ordre de 100 GPa à quelques TPa en fonction du solide. Le matériau chauffé va alors se détendre et des ondes de chocs et de raréfaction sont initiées, compressant la matière environnante (Fig. 2.2(b)).

Dans ces conditions expérimentales, pour des énergies d’impulsions entre 20 et 25 nJ, des régions dont les tailles sont de l’ordre de 250 nm de diamètre exhibent des densités plus faibles que la densité normale du matériau et une modification significative de l’indice de réfraction [16, 17]. Pour des énergies d’impulsion supérieure à 25 nJ, correspondant à des énergies absorbées de l’ordre de la dizaine de nJ (estimées à partir d’un coefficient d’absorption entre 0,6 et 0,8, une longueur d’absorption entre 50 et 80 nm et des fluences de quelques dizaine de J/cm^2), les observations montrent la formation d’un vide de matière dans le volume du solide transparent [16, 17]. Les tailles des cavités formées varient d’environ 300 à 600 nm de diamètre pour des énergies d’impulsion entre 50 et 100 nJ. La

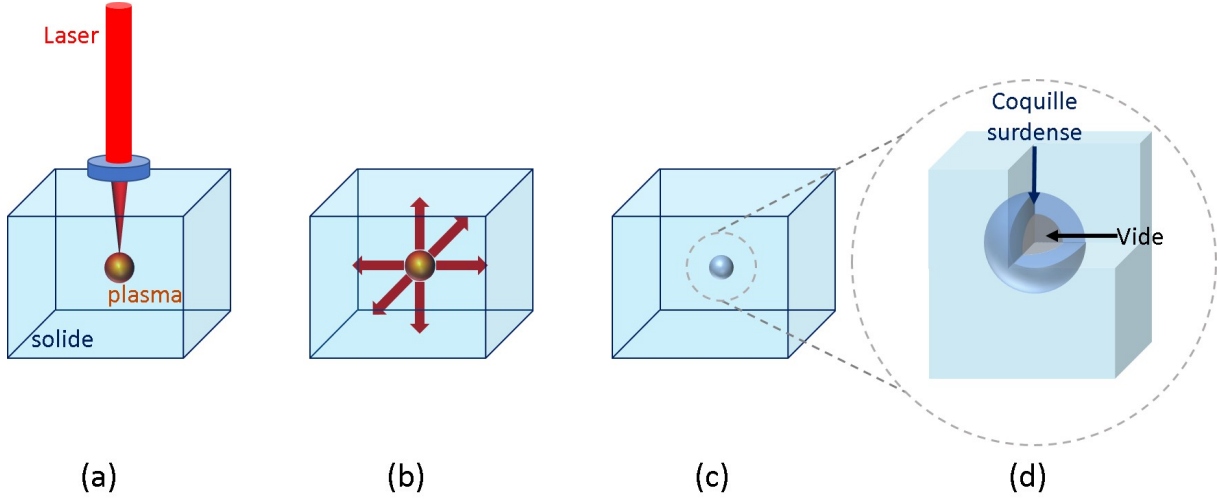


FIGURE 2.2 – Schéma de la génération de cavité par laser femtoseconde

cavité est entourée d'une coquille de matériau compressé de densité plus élevée, estimée à environ $1,14\rho_0$ avec ρ_0 la densité initiale du matériau³ (Fig. 2.2(c et d)). Les analyses expérimentales révèlent un diamètre quasiment deux fois plus important que la taille de la cavité, variant ainsi entre environ 600 nm et plus d'un μm de diamètre [16, 17].

Pour des énergies d'impulsion inférieures à 120-150 nJ (en fonction des conditions de focalisation et du matériau), aucune fracture n'est observée. Pour des énergies plus importantes des fractures apparaissent dans le cas du saphir lorsque les régions compressées (amorphes) atteignent des tailles supérieures à 500-600 nm [16, 17]. Dans le cas de la silice fondue, des fractures autour des cavités uniques générées par un laser femtoseconde, ne sont pas observées.

De nombreux travaux théoriques et numériques, au sujet de la formation de micro-explosions dans les matériaux générées par des lasers ultracourts, peuvent être mentionnés. Tout d'abord, E. G. Gamaly *et al.* ont mené des études théoriques sur l'interaction d'une impulsion laser femtoseconde focalisée dans le volume d'un matériau transparent [17, 43] appuyées par des travaux numériques [18, 19]. Ils estimèrent analytiquement le volume d'absorption de l'énergie laser ainsi que la quantité d'énergie absorbée. Puis, via une approche basée sur l'hydrodynamique des plasmas (modèle fluide), ils ont prédit théoriquement les tailles caractéristiques des cavités générées suivant la définition d'un rayon d'arrêt de la zone affectée par le choc. Ce rayon correspond à la distance parcourue par le choc, depuis le centre de la zone chauffée par le laser (lieu de formation de la cavité), à partir de laquelle l'onde de compression devient une onde acoustique (une onde élastique n'induisant plus de déformations permanentes). À cet instant, la pression de l'onde $P_{choc} = Y_{LEH}$, où Y_{LEH} est la limite élastique d'hugoniot définie comme le seuil (en contrainte longitudinale) de la transition entre un comportement purement élastique et un comportement élasto-plastique [98]. Le rayon d'arrêt est lié à l'énergie laser absorbée E_{abs} et au module de Young E_{Young} selon la relation [17] :

$$r_{stop} = \sqrt[3]{\frac{E_{abs}}{\frac{4}{3}\pi E_{Young}}} \quad (2.1)$$

3. Lors de la phase de refroidissement du matériau, celui-ci ne semble pas subir de recuit, figeant ainsi la région dense expérimentalement observée.

Le modèle fluide étant dépourvu de comportement solide, un tel critère est nécessaire dans ce cas pour estimer le rayon des cavités. Sans cela, le modèle hydrodynamique ne prévoit pas de stabilisation de la cavité et au temps long celle-ci se referme entièrement.

Au même moment, des travaux théoriques et expérimentaux ont également été menés sur l'étude des dynamiques de déformation (petites déformations) à l'intérieur du verre après l'irradiation (plus modérée) d'un laser femtoseconde [36, 37]. Le comportement du solide a été considéré dans ces études au travers des équations thermo-élastiques. Celles-ci rendent compte des contraintes générées par l'élévation de température du matériau après l'absorption de l'énergie du laser. Il s'agit dans ce cas d'une réponse élastique d'un solide idéal dont les déformations sont induites par des ondes acoustiques (de l'ordre de la centaine de MPa) qui se propagent dans le matériau. Seules de faibles variations de densité et de l'indice de réfraction sont calculées.

Les travaux de D. Hébert *et al.* [38] sur l'élaboration d'une équation d'état (EOS) des cristaux de KDP (convertisseurs de fréquence) au sujet des problématiques des dommages induits par les laser de grande puissance peuvent également être mentionnés. En effet, pour établir une telle EOS, un faisceau d'électron pulsé a été utilisé pour générer des ondes de contraintes de 0,7 GPa et des mesures vélocimétriques ont déterminées la réponse du matériau en calculant notamment les composantes du déviateur des contraintes (comportement solide). Puis, l'EOS a servi aux simulations d'endommagement en volume de cristaux de KDP en régime nanoseconde, menant à la formation de cavités, entourées d'une zone compressée par le choc, dont la dynamique dépend fortement de la force de ce dernier.

Enfin, plus récemment, N. M Bulgakova *et al.* [39] ainsi que S. Najafi *et al.* [40, 41] ont menés des travaux théoriques et numériques en utilisant les équations thermo-élasto-plastique couplées aux équations de Maxwell [39] ou encore à l'équation non-linéaire de Schrödinger afin d'étudier les modifications induites par l'interaction d'un laser femtoseconde avec la silice. Plus précisément, par l'estimation des dépôts d'énergie et des températures induites dans le matériau, des prédictions de variations d'indice du matériau ont été déterminés, mais là encore pour des petites déformations et des contraintes de l'ordre de la dizaine à la centaine de MPa.

Dans les applications présentées ci-dessous, les simulations Thermo-Elasto-Plastique rendent compte de modifications bien plus importantes, telles que la formation de nanocavités, générées par des chocs de l'ordre du TPa et des contraintes de l'ordre de la dizaine de GPa. De plus, à l'aide des modèles de rupture présentés dans la Sec. 1.2.6, une évaluation des régions critiques, où des fractures peuvent apparaître, est proposée.

2.2 Evolution du code hydrodynamique CHIC et hypothèses de la simulation thermo-élasto-plastique

CHIC est un code hydrodynamique 2D axisymétrique développé au laboratoire CELIA [99]. Ce code de simulation numérique est utilisé notamment pour l'étude de la fusion par confinement inertiel, en physique des plasmas et pour l'étude de l'interaction laser-matière. Différents modèles physiques sont intégrés dans le code et couplés au modèle hydrodynamique (Fig. 2.3) de sorte à traiter un grand nombre de phénomènes. Ainsi, le code prend en compte la diffusion de la chaleur avec un modèle à deux températures, le transport radiatif et la propagation du laser via un algorithme de ray tracing (optique géométrique). Un modèle de magnétohydrodynamique (MHD) est également implémenté.

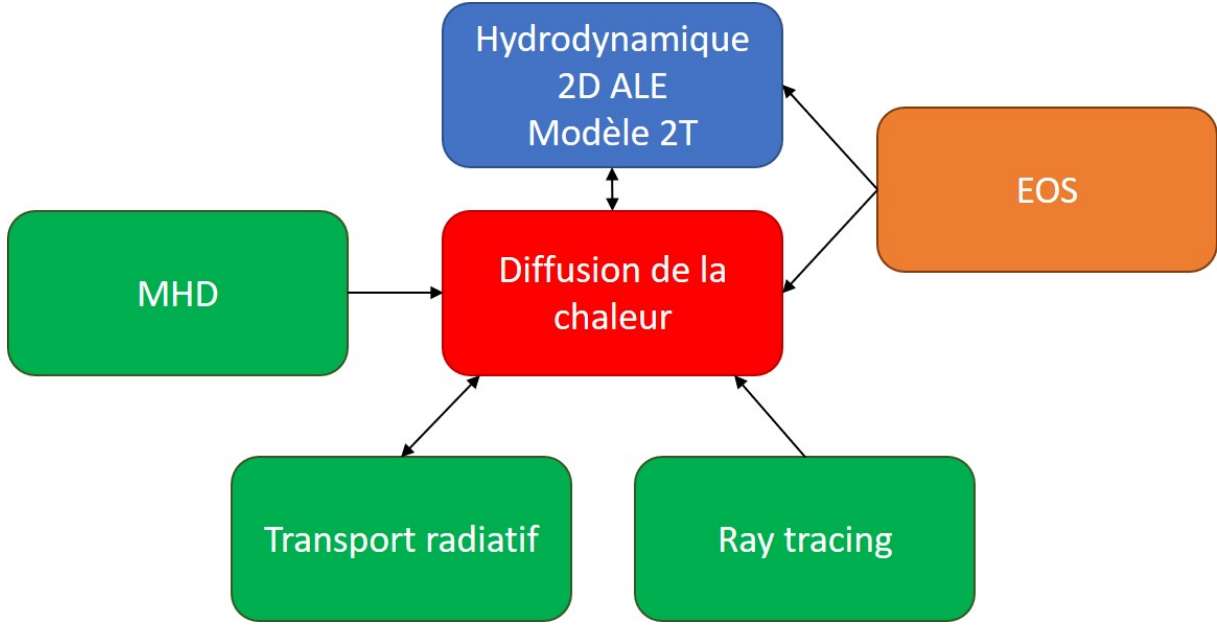


FIGURE 2.3 – Le code CHIC est un code hydrodynamique 2D axisymétrique, constitué de différents modèles physiques couplés, permettant l'étude de nombreux problèmes complexes. Le code comprend notamment un modèle à deux températures, un modèle de transport radiatif et de ray tracing. Également, un modèle de magnétohydrodynamique (MHD) est inclus. Le code a aussi accès à de nombreuses données d'équations d'état (EOS) permettant des études sur une grande variété de matériaux [99].

Dans ce travail de thèse, le modèle thermo-élasto-plastique, présenté dans le premier chapitre (Sec. 1.2) a été inclus au code CHIC. Plus exactement, le modèle d'élasto-plasticité (Sec. 1.2.4) développé dans une géométrie 2D plan et validé par P. H. Maire *et al.* [74] a été ajouté au modèle hydrodynamique tandis qu'un modèle de diffusion de la chaleur monotempérature a été développé. En effet, l'hypothèse de l'équilibre thermique ($T_e = T_L$) étant vérifiée après le passage de l'impulsion laser dans le matériau et l'établissement du dépôt d'énergie (voir Sec. 1.1.4), un modèle de diffusion de la chaleur tenant compte seulement de la température du matériau peut-être considéré. Enfin, le modèle de ramollissement (Sec. 1.2.5) a également été implémenté afin de tenir compte des changements de phases solide-liquide et ainsi assurer le passage sans discontinuité d'un comportement solide à fluide du matériau considéré.

Le modèle de diffusion de la chaleur monotempérature a été validé dans le cas où aucun processus hydrodynamique n'était en jeu (voir Annexe D) et les résultats ont été comparés à des solutions analytiques [100]. L'ensemble de la simulation thermo-élasto-plastique a ensuite été validée au travers de différents tests, notamment par l'utilisation du code ESTHER 1D [80–84] qui a fourni des résultats identiques pour des cas de validation similaires (non montrés).

La géométrie 2D planaire considérée dans cette étude suppose une invariance du dépôt d'énergie le long de l'axe de propagation du laser. Dans les expériences [15–17], les cavités générées sont en forme de *larve* dans cette direction avec des longueurs caractéristiques deux fois plus grande que leurs diamètres, comme en atteste la Fig. 2.4. Ici, seule l'évolution du diamètre de la cavité est considérée dans le plan perpendiculaire à la direction de propagation du laser. Le modèle 2D permet dans un premier temps de décrire

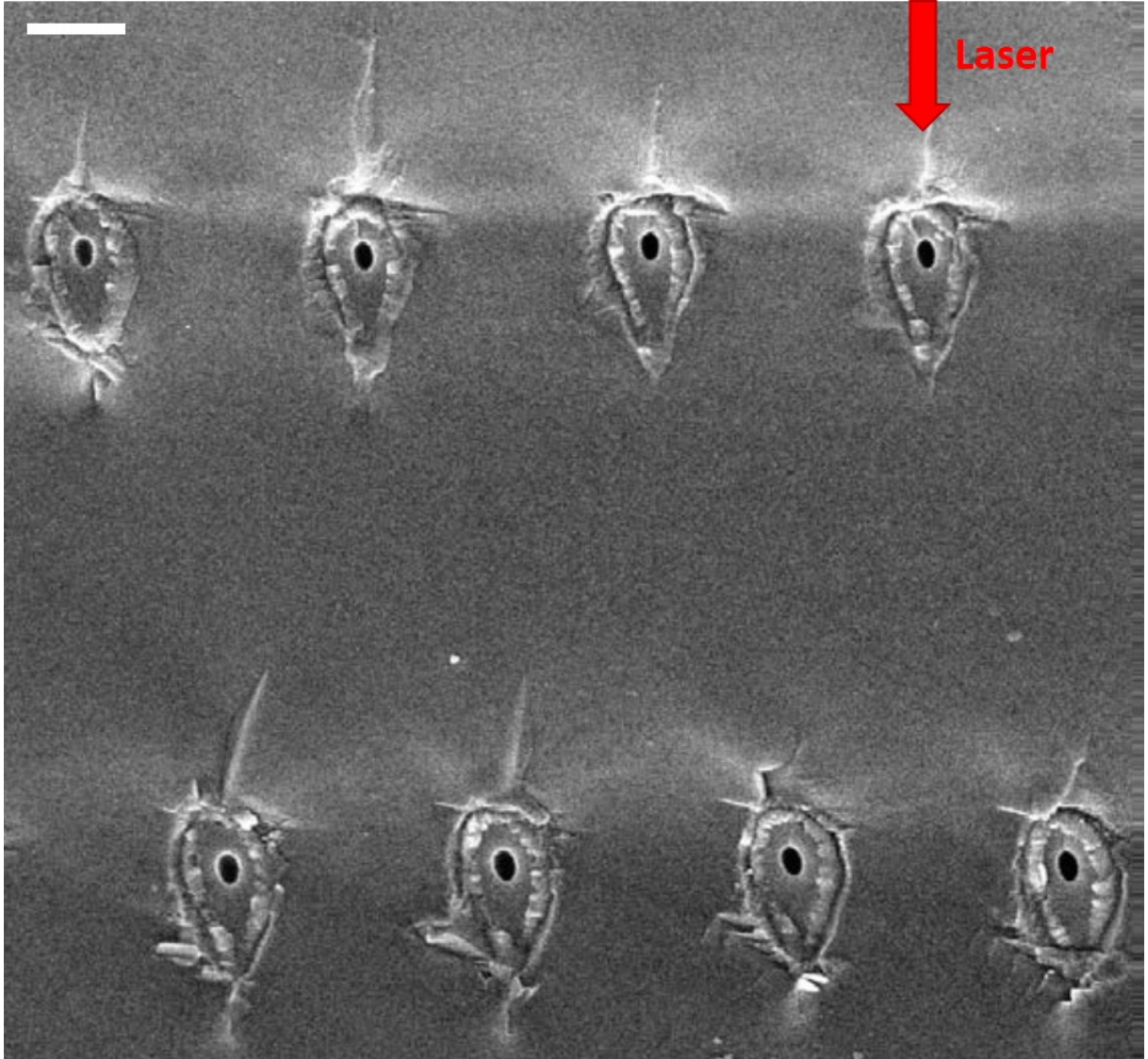


FIGURE 2.4 – Image SEM d’un ensemble de cavités générées dans le saphir par une seule impulsion laser à 800 nm, 150 fs et 120 nJ, dans le plan de propagation du laser. La barre d’échelle est de 1 μm [16].

les comportements généraux de l’évolution des rayons de cavités. L’ajout d’une troisième dimension devrait seulement réduire légèrement les tailles des structures et modifier faiblement les dynamiques, dû à l’ajout de contraintes dans la direction de propagation du laser (une contrainte longitudinale σ_z et deux contraintes de cisaillement τ_{xz} et τ_{yz}). De plus, il est à noter que la simulation prend en compte implicitement une longueur d’un cm (unités CGS) dans la troisième dimension et non pas infinie. Ainsi les valeurs d’énergie sont exprimées en J/cm de manière implicite dans la suite du document. Enfin, il est à noter que la géométrie 2D n’a pas de conséquences dans l’utilisation de la loi de Weibull à propos des volumes considérés. En effet, ceux-ci ayant une longueur $l_0 = 1$ cm dans la troisième dimension, $V_0 = S_0 l_0$ et $V = S l_0$, ne modifiant donc pas les rapports des volumes puisque $S/S_0 = V/V_0$, où S et S_0 correspondent, respectivement, à la surface (coupe) de matériau soumis à des contraintes non nulles et à l’échelle caractéristique d’espace dans la géométrie 2D.

Les temps d’interaction d’une impulsion laser femtoseconde dans un volume de silice

étant bien plus courts (de l'ordre de la centaine de femtoseconde jusqu'à quelques picosecondes) que les temps hydrodynamique de modification du matériau (supérieurs à une dizaine de picosecondes jusqu'à la nanoseconde), la physique de l'interaction laser-diélectrique (donnant lieu à un dépôt d'énergie) et la dynamique de formation d'une cavité peuvent être étudiées de manière séparée. Le dépôt d'énergie devient dans ce cas un paramètre initial de la simulation thermo-élasto-plastique. Dans un premier temps, afin de comprendre et de décrire les mécanismes de déformation d'un matériau irradié par un laser femtoseconde fortement focalisé en volume, un dépôt d'énergie gaussien, homogène, est considéré afin de simplifier les études dans ce chapitre. Celui-ci, n'étant pas calculé à l'aide de la résolution des équations de Maxwell couplées à l'ionisation du matériau, ne rend donc pas compte des effets de propagation du laser, des potentiels défauts d'éclairement ou encore des défauts du matériau tels que des légères variations des propriétés optiques ou de la densité du solide, qui peuvent conduire à des dépôts moins homogènes mais plus réalistes. Cependant, dans le cas de la formation de nano-cavités, la forme du dépôt d'énergie n'étant pas un paramètre prépondérant, contrairement à la densité d'énergie absorbée ou encore à la taille caractéristique du dépôt, l'hypothèse d'un dépôt homogène est une bonne approximation. En effet, la forme du dépôt d'énergie est en grande partie perdue lors de la déformation du matériau dans le cas de la génération de micro-explosion et des conditions physiques considérées ici (argument vérifié dans l'étude de la formation d'une double cavités Sec. 2.4.1).

Les tailles caractéristiques (rayons) de chaque dépôt d'énergie dans les cas présentés ci-dessous, sont tous supposés inférieurs à la longueur d'onde du laser à cause des processus non-linéaires (ionisation multiphotonique et par impact) mis en jeu lors de l'interaction laser-diélectrique. L'énergie laser est alors absorbée dans un volume, inférieur au volume focale défini plus haut, dont le rayon est égal à $0,13 \mu\text{m}$ à mi-hauteur [16, 17]. Pour des énergies absorbées considérées de l'ordre de 10 nJ [16, 17] les densités d'énergie obtenues sont alors de l'ordre de quelques centaines de kJ/cm^3 , suffisante pour induire des températures et des pressions menant à la formation de cavités [16, 17]. Les densités d'énergie de chaque dépôt seront choisies en particulier pour obtenir des cavités dont les tailles sont d'environ $0,4 \mu\text{m}$, les dynamiques menant à de telles tailles étant régies par plusieurs mécanismes physiques intéressants tels que l'apparition de transitions de phases due à la force du choc ou encore d'un régime plastique en phase de compression et de détente (onde de raréfaction derrière le choc). Pour des dépôts trop faibles, le choc ne transporte pas assez d'énergie pour localement fondre le matériau et induire un régime plastique en phase de détente et inversement pour des dépôts trop importants la matière solide autour de celui-ci est en grande partie fondue et perd son caractère élasto-plastique.

Enfin, il est à rappeler que la réponse solide du matériau prise en compte dans le modèle présenté Sec. 1.2.4 est celle d'un solide idéal. Dans le cadre de cette thèse, les gradients de températures induits par les dépôts d'énergie dans les différentes applications présentées sont très grands. Les tailles des rayons des dépôts d'énergie sont de quelques dixième de μm et les tailles transverses des structures finales observées expérimentalement sont de l'ordre du μm . Les températures observées du plasma dense créé, au centre des dépôts, avoisinent 10^4 à 10^5 K tandis qu'à l'extérieur de la zone de dépôt le matériau est froid et est supposé à température ambiante. Les gradients de températures sont donc de l'ordre de 10^4 - $10^5 \text{ K}/\mu\text{m}$. Puisque la déformation de la matière prend place sur une échelle de temps de l'ordre de la centaine de picoseconde jusqu'à la nanoseconde et que la diffusion de la chaleur commence juste à entrer en jeu à cet instant⁴, les gradients de

4. La longueur de diffusion thermique $l = \sqrt{\lambda_{th}t/\rho c_V}$ pour un temps d'une nanoseconde est environ de

températures sont supposés rester du même ordre de grandeur durant la structuration du matériau. Ainsi, la zone où les températures du matériau sont comprises entre 900 K et 2000 K (voir Sec. 1.2.2) est très petites (estimée autour du nm) devant la zone totale de déformation. C'est pourquoi, dans les conditions physiques considérées ici, les effets de viscosité lors de la déformation du matériau par une contrainte sont négligés et le comportement élasto-plastique d'un solide idéal est seulement pris en compte.

2.3 Simulations d'une cavité unique

La simulation de la formation d'une cavité unique dans la silice, générée par un laser femtoseconde fortement focalisé, est présentée dans cette section. La densité initiale de la silice est égale à 2.2 g/cm^3 , sa limite d'élasticité et son module de cisaillement dans les conditions standards sont respectivement $Y_0 = 7.1 \text{ GPa}$, $G_0 = 22.6 \text{ GPa}$. L'EOS utilisé est la table SESAME 7386.

2.3.1 Comparaison du modèle fluide et élasto-plastique dans le cas 1D

Paramètres de la simulation	Valeurs
Domaine de maillage 1D (longueur)	$20 \text{ } \mu\text{m}$
Taille des mailles	$20 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$
Densité initiale ρ_0	2.2 g/cm^3
Limite d'élasticité Y_0	7.1 GPa
Module de cisaillement G_0	22.6 GPa
Densité d'énergie laser absorbée	90 kJ/cm^3
Rayon dépôt d'énergie	$0.13 \text{ } \mu\text{m}$

TABLEAU 2.1 – Tableau des paramètres de la simulation 1D dans le cas de la formation d'une cavité unique.

Afin de comparer le modèle développé et implémenté dans CHIC au modèle fluide sans comportement solide, le cas simplifié à une dimension de la formation d'une cavité est examiné. Le tableau 2.1 résumé l'ensemble des paramètres de la simulation. La densité d'énergie absorbée initiale est ici de 90 kJ/cm^3 soit environ 0.9 nJ d'énergie absorbée et placée au centre du domaine. Cette énergie est plus faible que celles annoncées au début de ce chapitre dû à l'absence des deux autres dimensions en espace. En effet, dans ce cas, l'énergie dans le domaine ne pouvant être relaxée que dans deux directions (au lieu de six), il est nécessaire d'injecter une quantité d'énergie plus faible pour obtenir une structure de taille identique (d'environ $0,4 \text{ } \mu\text{m}$) à celle obtenue dans un espace à plusieurs dimensions

$0.025 \text{ } \mu\text{m}$ avec $\lambda_{th} = 1.381 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ la conductivité thermique, $\rho = 2.2 \text{ g/cm}^3$ la densité du matériau et $c_V = 1000 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ la capacité thermique massique à volume constant du matériau (supposé égale à la capacité thermique massique à pression constante c_V dans le cas d'un matériau solide). Cette longueur de diffusion thermique est donc très petite devant les longueurs caractéristiques de déformation, rendant négligeable les effets de diffusion de la chaleur et les variations de conductivité thermique. λ_{th} est supposée constante.

avec une énergie plus élevée. Dans le cas 1D, le maillage cartésien est constitué d'un millier de mailles le long de l'axe x et d'une seule maille le long de l'axe y . La taille du maillage est donc de $20\text{ }\mu\text{m}$ de long et 20 nm de large pour des mailles carrées de 20 nm de côté. Il est important de noter que le domaine est donc mille fois plus long que large, approchant ainsi une géométrie purement 1D. Dans ce cas la contrainte σ_x est la seule composante du tenseur des contraintes (qui se réduit donc à un scalaire), les contraintes le long de l'axe y étant négligeables ($\sigma_y = \tau_{xy} \simeq 0$).

L'énergie absorbée induit une pression initiale d'environ 100 GPa et une température initiale d'environ 2.10^4 K au centre du domaine. La relaxation de la zone chauffée et entourée de solide, à température et à pression ambiantes ($T = 300\text{ K}$ et $P = 1\text{ bar}$), amène à la formation d'un choc qui se propage dans le matériau. La Fig. 2.5 présente

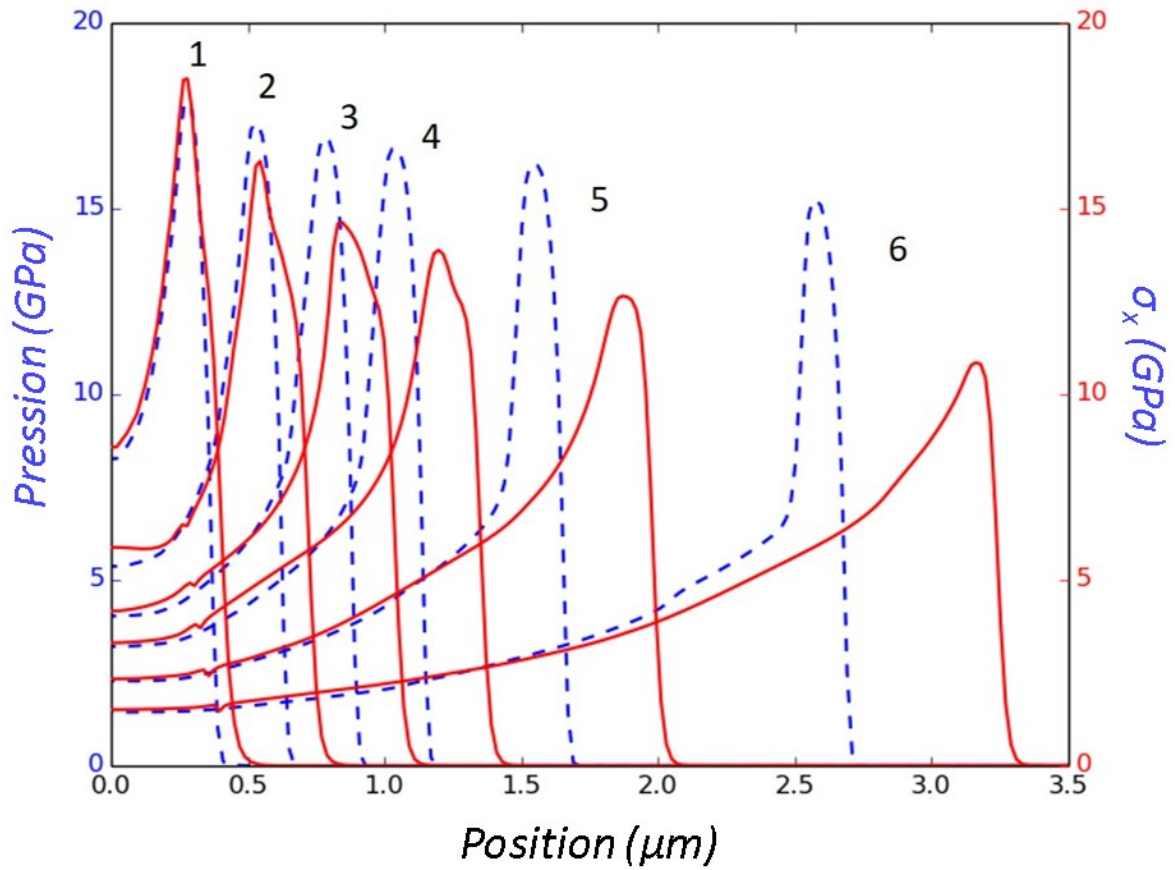


FIGURE 2.5 – Profils spatiaux de la pression et de la contrainte longitudinale σ_x tels que prédits respectivement par le modèle fluide (traits en pointillés) et le modèle élasto-plastique (traits pleins) à 50, 100, 150, 200, 300, 500 ps (respectivement, courbes 1-6) dans une géométrie 1D. Des différences de formes et de vitesses notables entre les deux ondes de choc prédites par les deux modèles sont observées. Notamment, un précurseur élastique et une vitesse plus importante de l'onde de choc sont visibles avec le modèle élasto-plastique.

l'évolution spatiale de la pression (modèle fluide) et de la contrainte longitudinale σ_x (modèle élasto-plastique) pour différents temps. Il est à noter que la contrainte est définie positive en compression dans un souci de clarté et de compréhension.

La propagation du choc, induit par la relaxation de la matière chaude, est observée dans les deux cas. Cependant, la forme et la vitesse du choc diffèrent en fonction du modèle utilisé. Tout d'abord, la vitesse du choc est plus rapide dans le modèle élasto-plastique que dans le modèle fluide, puisque celui-ci se propage dans de la matière solide où les vitesses du son sont plus grandes (voir Eqs. (1.44) et (1.45)). Au bout de 500 ps, le front de l'onde se situe à environ $3.3 \mu\text{m}$ du centre du domaine avec le modèle élasto-plastique, soit une vitesse moyenne d'environ 6,6 km/s, tandis qu'il se situe à environ $2,7 \mu\text{m}$ du centre du domaine avec le modèle fluide, soit une vitesse moyenne d'environ 5,4 km/s. Ensuite, dans le cas du modèle fluide, le choc se propage avec un front d'onde raide sans changement significatif de forme. Il est à noter que le front d'onde est défini par la hauteur de l'onde depuis son pied jusqu'à la valeur maximale de son amplitude (dans le sens opposé à sa propagation). Seule l'amplitude du choc diminue au cours du temps en raison de la restitution et de la dissipation de l'énergie qu'il transporte. Dans le cas du modèle élasto-plastique, le choc se propage de manière identique au modèle fluide jusqu'à un temps d'environ 50 ps. À partir de cet instant et jusqu'à 300 ps environ, un changement de forme est observée et le choc ne présente plus de front d'onde raide. Ce comportement est dû au passage du choc de la phase liquide (chauffée) du matériau à la matière environnante froide qui est dans l'état solide. Comme expliqué dans la Sec. 1.2.3, le solide étant soumis à de fortes contraintes (supérieures à la limite d'élasticité Y), celui-ci va subir des déformations élasto-plastiques, *i.e.* des déformations réversibles et permanentes menant à la formation des structures observées expérimentalement (Sec. 2.1). Puisque les vitesses d'écoulements (de déplacements) dans les régimes élastiques et plastiques sont différentes, dû à des vitesses du son différentes dans ces régimes (voir Sec. 1.2.4), le choc se sépare en deux ondes distinctes : une onde plastique et un précurseur élastique. Tandis que la première, induisant des déformation permanentes dans le matériau, se propage à la vitesse du son hydrodynamique c_h (dépendante de la densité locale du matériau), la seconde, induisant des déformations réversibles, se propage avec une vitesse longitudinale c_l plus grande. Ainsi, le précurseur élastique étant plus rapide que l'onde plastique, le choc se sépare en deux. De plus, il est à noter que le précurseur élastique a une amplitude égale à Y_{LEH} qui est d'environ 12 GPa pour SiO_2 telle que prédite par l'EOS et les propriétés mécaniques du matériau⁵. Finalement, après 300 ps, seule une onde acoustique (élastique) se propage car $\sigma_x < Y_{LEH}$ (équivalent à $\sigma_{eq} < Y$) et plus aucune déformation permanente n'est induite.

Le front d'onde du choc, qui présente une structure particulière à deux ondes, compresse le solide qui se déforme d'abord de manière élastique puis de manière plastique. Le matériau précédemment compressé va ensuite subir, à l'arrière de l'onde de choc, une détente (onde de raréfaction) et ainsi subir une traction, telle que montré Sec. 1.2.1. Si cette dernière est suffisamment intense, elle peut alors déformer (étirer) de manière plastique le solide une deuxième fois. Ce scénario est illustré Fig. 2.6 avec le profil spatial de la contrainte longitudinale σ_x au temps $t = 400$ ps après le dépôt d'énergie. Cette deuxième plastification du matériau est visible dans la zone de traction où la courbe spatiale du critère de von Mises fournissant les valeurs de σ_{eq}/Y est égale à 1, indiquant un régime plastique.

Ces différences présentées ci-dessus entre le comportement fluide et élasto-plastique ont des conséquences sur l'évolution de la densité telle que montrée en Fig. 2.7 où les profils spatiaux de densité sont présentés pour différents temps. Tout d'abord, dans les deux cas,

5. La relation suivante donne accès à la valeur de cette limite [101] : $Y_{LEH} = \frac{1-\nu}{1-2\nu}Y_0$ avec ν le coefficient de Poisson, autour de 0.2-0.3 pour le verre.

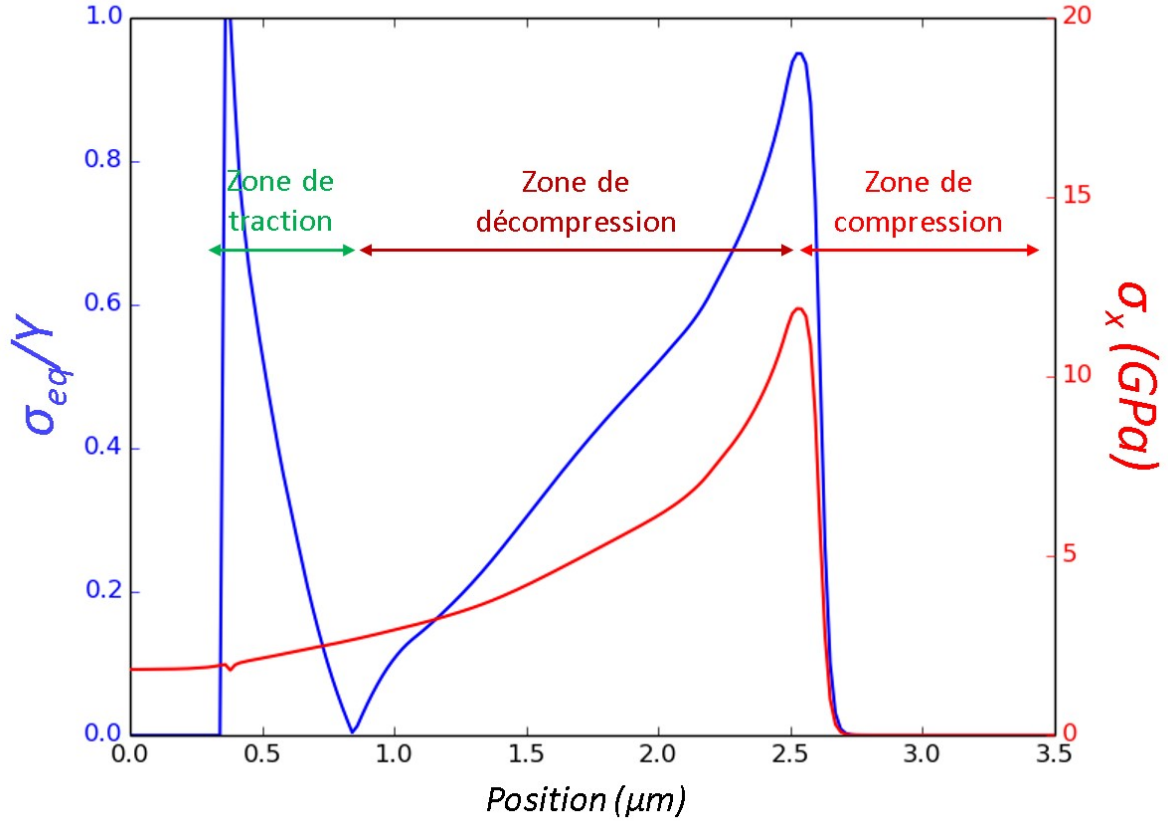


FIGURE 2.6 – Structure de l'onde de choc et courbe du critère de von Mises à 400 ps dans le cas 1D. Une deuxième plastification (première plastification par compression) est observée dans la zone de traction derrière l'onde de compression (onde de raréfaction) où $\sigma_{eq}/Y = 1$ selon le critère de von Mises.

la formation d'une cavité est observée⁶. Celle-ci survient lorsque le matériau comprimé par l'onde de choc subit ensuite une forte décompression due à l'apparition d'une onde de raréfaction qui creuse le matériau. La différence majeure apparaît au niveau de la matière environnante où une région surdense est formée dans le cas du modèle élasto-plastique, telle qu'observée expérimentalement [16, 17, 20] (Sec. 2.1). Avec un front d'onde de choc assez fort, il est possible d'augmenter l'énergie interne de la matière, au dessus de l'énergie de fusion du matériau, pour la liquéfier localement. Ce phénomène est observé entre 100 ps et 200 ps dans le cas du modèle élasto-plastique. Ainsi, tandis que le front du choc rencontre de la matière solide et augmente assez son énergie interne pour la liquéfier, l'arrière du choc rencontre alors une phase liquide. Puisque la vitesse du son dans un liquide est plus faible que dans un solide et que celle-ci diminue lorsque la densité augmente (matière comprimée et plus dense), la matière à l'arrière du choc est décélérée tandis que le front à deux ondes continue de se propager dans le solide. Le phénomène de traction et de seconde plastification apparaît alors à ce moment, la matière étant étirée entre la zone décélérée et le front d'onde qui continue à compresser le solide. Ces deux phénomènes amènent alors à une zone surdense et permanente.

L'évolution du rayon de la cavité en fonction du temps est tracée sur la Fig. 2.8. Ce

6. Une cavité est supposée se former à partir d'une densité au moins diminuée de moitié ($\rho < \rho_0/2$).

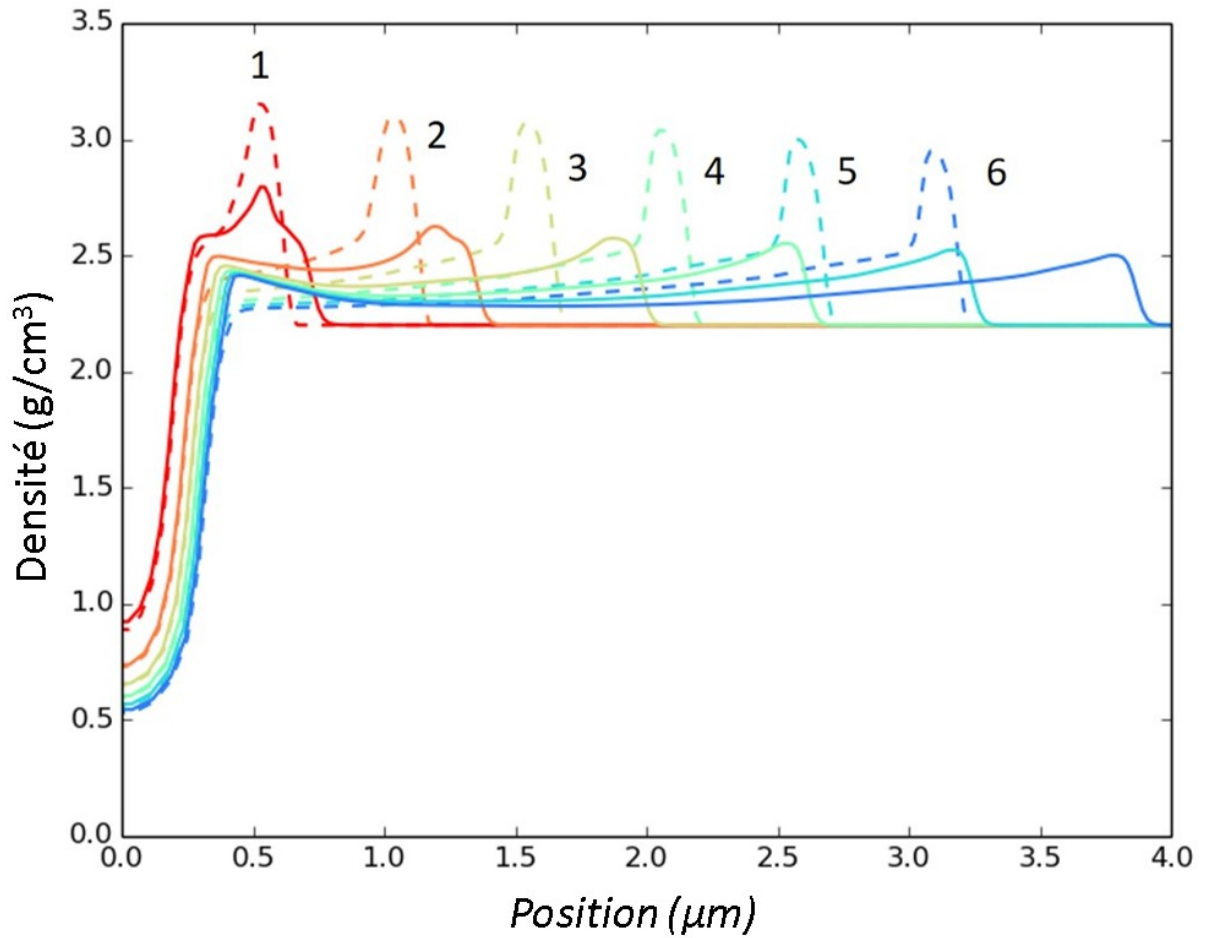


FIGURE 2.7 – Profils spatiaux de densité prédits respectivement par le modèle fluide (traits en pointillés) et le modèle élasto-plastique (traits pleins) à 100, 200, 300, 400, 500, 600 ps (respectivement, courbes 1-6) dans le cas 1D. Tandis que chacun des deux modèles prédit la formation d’une cavité au centre du domaine, une surdensité apparaît dans le cas du modèle élasto-plastique.

rayon est définie comme la distance entre le centre de la cavité (où la densité est la plus basse) et la position où la densité est égale à la moitié de la densité initiale⁷. Dans les deux cas, le rayon de cavité croît avec le temps. Jusqu’à environ 200 ps, l’expansion de la cavité est supportée par la présence du choc. La vitesse d’expansion de la cavité est alors relativement constante. Cependant, à partir du moment où le choc est assez loin de la cavité, la vitesse de l’écoulement diminue dans la région centrale, expliquant ainsi l’expansion plus lente de la cavité. Dans le cas du modèle élasto-plastique, la cavité croît légèrement plus lentement que dans le cas du modèle fluide dû à une force additionnelle provenant de la partie déviatorique du tenseur des contraintes et opposée aux déplacements de la matière dans le solide. Cependant, sur l’échelle de temps étudiée ici, le rayon ne présente aucune saturation, signe d’une stabilisation, alors qu’une taille finie est attendue d’après les observations expérimentales présentées en Sec. 2.1. Pour des temps plus longs la cavité devrait se stabiliser dans le cas du modèle élasto-plastique et se refermer dans le cas du modèle fluide. En ajoutant une dimension spatiale dans la simulation de

7. Le choix d’un critère légèrement différent n’altère en rien l’analyse qui suit.

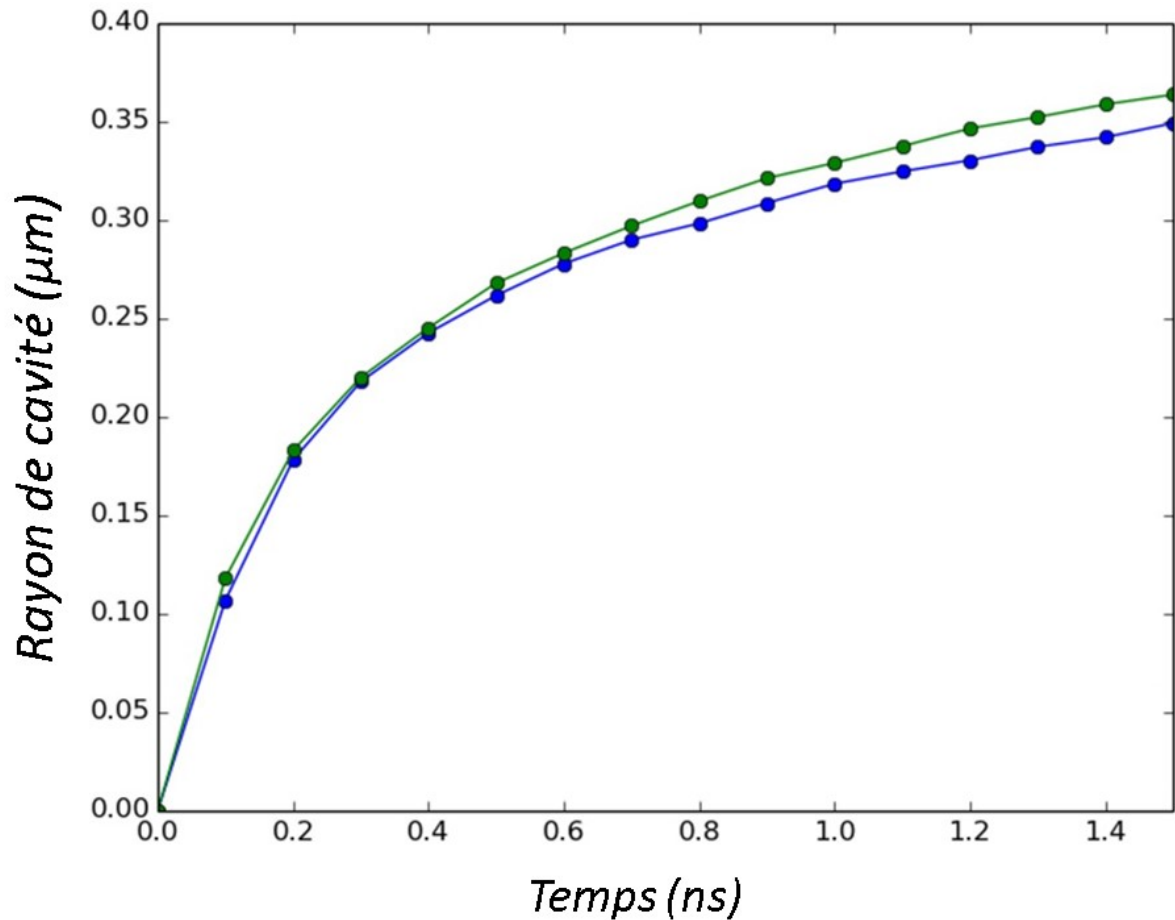


FIGURE 2.8 – Évolution temporelle du rayon de cavité prédite par les modèles fluides (courbe verte) et élasto-plastique (courbe bleue) dans le cas 1D. Dans cette géométrie, l'évolution des rayons de cavité dans les deux modèles ont des dynamiques comparables.

la formation d'une cavité et en introduisant de ce fait les contraintes en cisaillement, une modification de la dynamique d'expansion de la cavité est attendue.

Cette étude à une dimension a premièrement montré que l'onde de choc est divisée en deux ondes, l'onde plastique et le précurseur élastique, à cause de la réponse élasto-plastique du solide. De plus, l'onde de choc se propage plus rapidement que dans le modèle fluide. Deuxièmement, l'onde de raréfaction, associée au choc, forme une cavité entourée d'une région surdense dont la dynamique de formation est légèrement freinée par la contrainte longitudinale dans le modèle élasto-plastique.

2.3.2 Simulation 2D

Le cas de la formation d'une cavité en deux dimensions est à présent considéré. Le tableau 2.2 résume l'ensemble des paramètres de la simulation. La taille totale du domaine de maillage cartésien est de $18\ \mu\text{m} \times 18\ \mu\text{m}$ avec des tailles initiales de mailles de $50\ \text{nm} \times 50\ \text{nm}$ ⁸. Tous les paramètres de la simulation sont identiques à la section précédente

8. Des simulations avec des tailles de mailles plus petites ont été menées afin de vérifier la convergence numérique du calcul.

Paramètres de la simulation	Valeurs
Domaine de maillage 2D	18 $\mu\text{m} \times 18 \mu\text{m}$
Taille des mailles	50 nm $\times$ 50 nm
Densité initiale ρ_0	2.2 g/cm ³
Limite d'élasticité Y_0	7.1 GPa
Module de cisaillement G_0	22.6 GPa
Densité d'énergie laser absorbée	0.6 MJ/cm ³
Rayon dépôt d'énergie	0.13 μm

TABLEAU 2.2 – Tableau des paramètres de la simulation 2D dans le cas de la formation d'une cavité unique.

à l'exception de la densité d'énergie qui est égale à 0.6 MJ/cm³ soit une énergie absorbée d'environ 6 nJ au centre du domaine pour obtenir une cavité dont la taille est d'environ 0.4 μm . Cette énergie est du même ordre de grandeur que les énergies présentées dans la Sec. 2.1. Dans ces conditions, l'EOS prédit dans la région du dépôt d'énergie une pression initiale $P = 0.3 \text{ TPa}$ et une température initiale $T = 10^5 \text{ K}$.

Les profils spatiaux le long de l'axe x de (a) σ_x et (b) τ_{xy} sont présentés sur la Fig. 2.9. Comme dans le cas précédent, durant les cent premières picosecondes, le choc se propage d'abord avec un front d'onde raide dans la phase liquide (Fig. 2.9(a)). Après 100 ps (la température au centre du domaine est de l'ordre de $5 \cdot 10^4 \text{ K}$), le choc rencontre de la matière solide. À cause de sa large amplitude, celui-ci va liquéfier localement le matériau et la matière à l'arrière du choc va être décélérée puisque la vitesse du son dans le liquide est plus faible. Ceci conduit alors à un changement dans la forme du choc tel qu'expliqué Sec. 2.3.1 avec une séparation entre l'arrière et le front de l'onde. Pour cette densité d'énergie absorbée, l'apparition d'un précurseur élastique n'est pas nette mais sa signature autour de $\sigma_x = Y_{LEH} = 12 \text{ GPa}$ entre 100 et 200 ps est visible (la forme du front d'onde varie légèrement). La Fig. 2.9(b) montre une accumulation de la contrainte en cisaillement τ_{xy} durant 200 ps autour de la cavité en formation puis suivant le front de l'onde de compression. Une diminution du cisaillement est visible derrière l'onde due à la décompression. La valeur du cisaillement devient même négative durant 150 ps dans la zone d'étirement du matériau (onde de raréfaction). Après 200 ps, la contrainte en cisaillement croît autour de la cavité tandis qu'elle décroît au niveau du front d'onde lorsque le choc se transforme en onde acoustique. Entre ces deux régions, des contraintes résiduelles en cisaillement sont créées et forment un plateau, signature des déformations permanentes induites précédemment.

La Fig. 2.10 présente la carte spatiale de densité en 2D (Fig. 2.10(a)) et son profil radial de densité associé (Fig. 2.10(b)) prédits par la simulation à $t = 1 \text{ ns}$ (la température au centre de la cavité à cet instant est encore importante, de l'ordre de 10^4 K). Dans ces conditions, une cavité, avec un rayon d'environ 0.4 μm , se forme due à la forte détente derrière l'onde de compression, *i.e.* avec l'apparition d'une onde de raréfaction. Comme dans le cas 1D et pour les mêmes raisons, une région surdense est induite autour de la cavité. Tandis que le vide de matière a une densité inférieure à 0.25 g/cm³, la région surdense a une densité entre 2.25 et 2.5 g/cm³. La taille finale de cette zone surdense, dépendant des déformations plastiques, est d'environ 0.3-0.4 μm , *i.e.* elle est visible sur un rayon de l'ordre de 0.7-0.8 μm autour du centre du dépôt d'énergie. Ceci est donc en bon accord avec l'expérience [16, 17, 20] dont les observations relatent un rayon deux fois

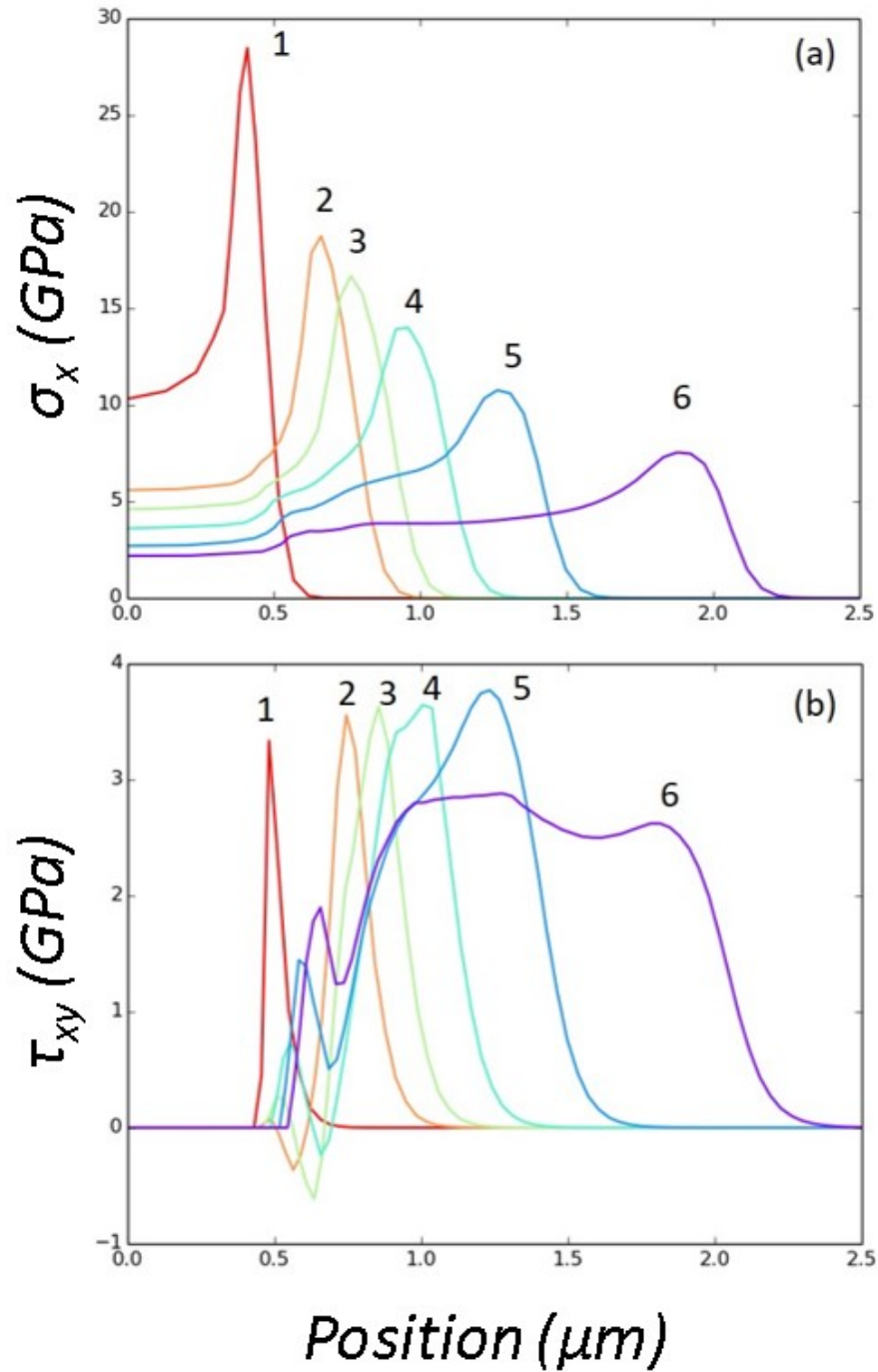


FIGURE 2.9 – Évolution spatiales de (a) la contrainte longitudinale σ_x et (b) le cisaillement τ_{xy} à 50, 100, 120, 150, 200, 300 ps (respectivement les courbes 1-6) dans le cas 2D. La contrainte longitudinale évolue de la même manière que dans le cas 1D. La contrainte en cisaillement augmente dans un premier temps sur le trajet de l'onde de choc puis s'accumule autour de la cavité et forme un plateau de contraintes résiduelles en cisaillement dans les régions environnantes ayant subies des déformations permanentes.

supérieur au rayon de cavité et une surdensité environ égale à $1.14\rho_0$ (voir Sec. 2.1).

L'évolution du rayon de cavité au cours du temps et prédit par le modèle élasto-

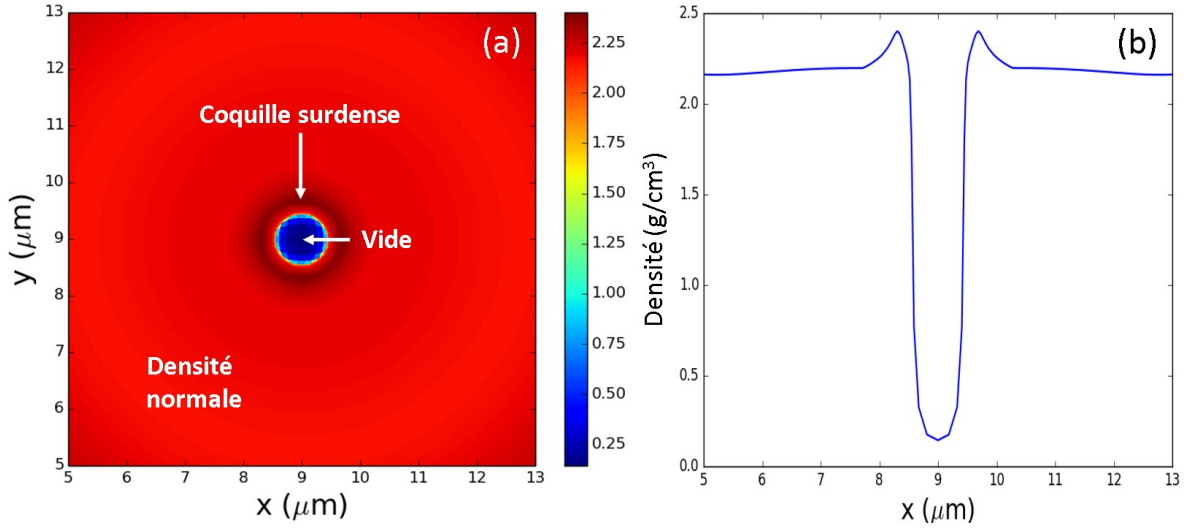


FIGURE 2.10 – (a) Carte de densité 2D et (b) profil radial de densité associé, 1 ns après le dépôt d'énergie. La simulation thermo-élasto-plastique prédit, dans ces conditions physiques, la formation d'une cavité au centre du domaine entourée par une région surdense telle qu'observée expérimentalement [16, 17, 20].

plastique en 2D est tracée sur la Fig. 2.11. Cette évolution est constituée principalement de trois étapes : une expansion, une contraction (fermeture) et une stabilisation. La première étape est due à la formation du choc, comme dans le cas 1D, qui va compresser la matière et induire une onde de raréfaction qui va former la cavité. Durant cette expansion, des déformations élastiques et plastiques sont induites (onde élasto-plastique) dans le solide environnant tandis que les contraintes en cisaillement s'accumulent (Fig. 2.9(b)), induisant des forces additionnelles s'opposant au déplacement de la matière. Quand le choc se transforme en une pure onde acoustique (onde élastique) n'induisant plus de déformations permanentes, l'expansion s'arrête et la cavité atteint alors une taille maximale. Il est important de noter que ce comportement prend place sur une échelle de temps plus courte que dans le cas 1D car l'influence des contraintes en cisaillement est plus importante en 2D. Puis, pendant la deuxième étape, la relaxation (décompression) des déformations élastiques réversibles induites dans le solide précédemment compressé par le choc, referme partiellement la cavité dont le rayon décroît. Finalement, la cavité se stabilise au cours de la troisième étape à cause des déformations permanentes (déformations plastiques) induites précédemment par le choc. Ce rayon final de cavité correspond alors aux tailles de cavités mesurées expérimentalement par analyse post-mortem.

Les évolutions temporelles des rayons de cavité pour différentes densités d'énergie, prédites par le modèle élasto-plastique, sont tracées sur la Fig. 2.12. L'évolution du rayon de cavité pour la plus haute densité d'énergie dans le cas du modèle fluide est également présentée. Il est à noter que dans chaque cas, le rayon du dépôt reste le même, soit 0.13 μm, bien qu'en réalité dans les expériences, le volume d'absorption puisse être plus grand pour des densités d'énergie plus importantes. Cependant, dans un premier temps, le but de cette étude étant de comprendre les mécanismes en jeu lors de la déformation du matériau d'un point de vue hydrodynamique, les variations de forme du dépôt d'énergie, comme mentionné plus tôt, ne sont pas prises en compte. Avec un dépôt d'énergie plus réaliste, prenant notamment en compte un volume d'absorption plus grand, correspondant à une énergie du faisceau laser plus importante, un changement dans l'évolution temporelle

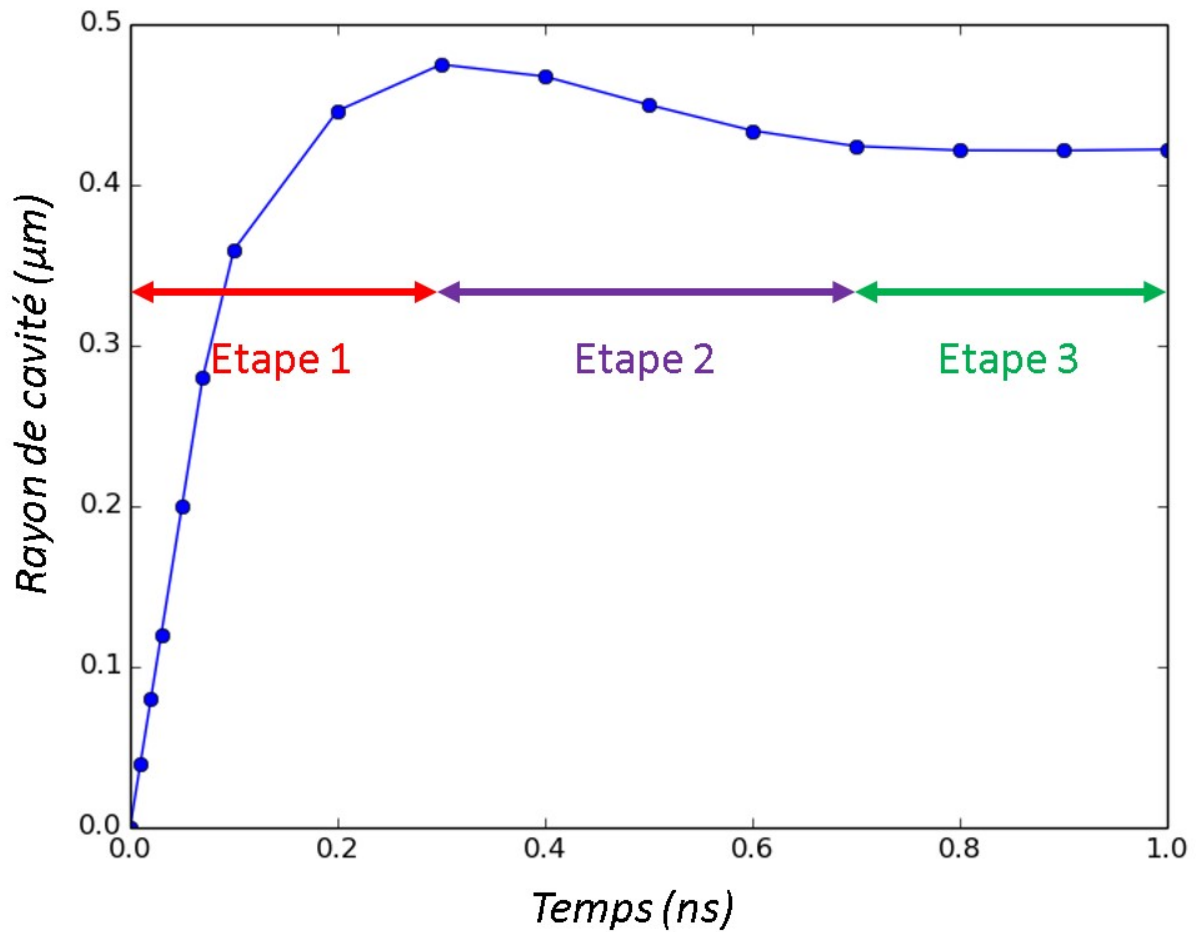


FIGURE 2.11 – Évolution temporelle du rayon de cavité, décomposé en trois étapes successives telles que montrées par les flèches horizontales. La première étape correspond à la formation de la cavité supportée par l’onde de choc induisant des déformations élasto-plastiques jusqu’à atteindre une taille maximale lorsque l’onde de choc devient une onde élastique et n’induisant plus de déformations permanentes. La deuxième étape correspond à la contraction (fermeture) de la cavité due à la relaxation des déformations réversibles. La troisième étape correspond à la stabilisation de la cavité dues aux déformations plastiques permanentes.

est attendue, mais pas nécessairement pour la taille finale du rayon de cavité. En effet, la densité d’énergie devrait être dans ce cas plus faible due à l’augmentation du volume d’absorption menant à des pressions et des températures moins importantes. Ainsi, l’onde de choc devrait être plus faible et devrait induire une croissance plus modérée de la cavité, accompagnée d’une déformation plastique elle aussi moins importante. Ceci devrait conduire à une taille finale de cavité plus petite. Cependant, dans le même temps, la zone d’absorption plus large devrait conduire à une taille finale de cavité plus grande. Ainsi, ces deux facteurs d’influence étant en compétition, des tailles finales de cavité comparables devraient être retrouvées. Le facteur de forme du dépôt d’énergie est donc bien perdue dans ce cas, lors de la déformation du matériau.

Durant la phase d’expansion, plus la densité d’énergie absorbée est grande, plus le choc est fort et plus rapide est la croissance de la cavité. Ceci mène alors à un rayon de cavité maximal de plus en plus important et dont la valeur est atteinte avec des temps

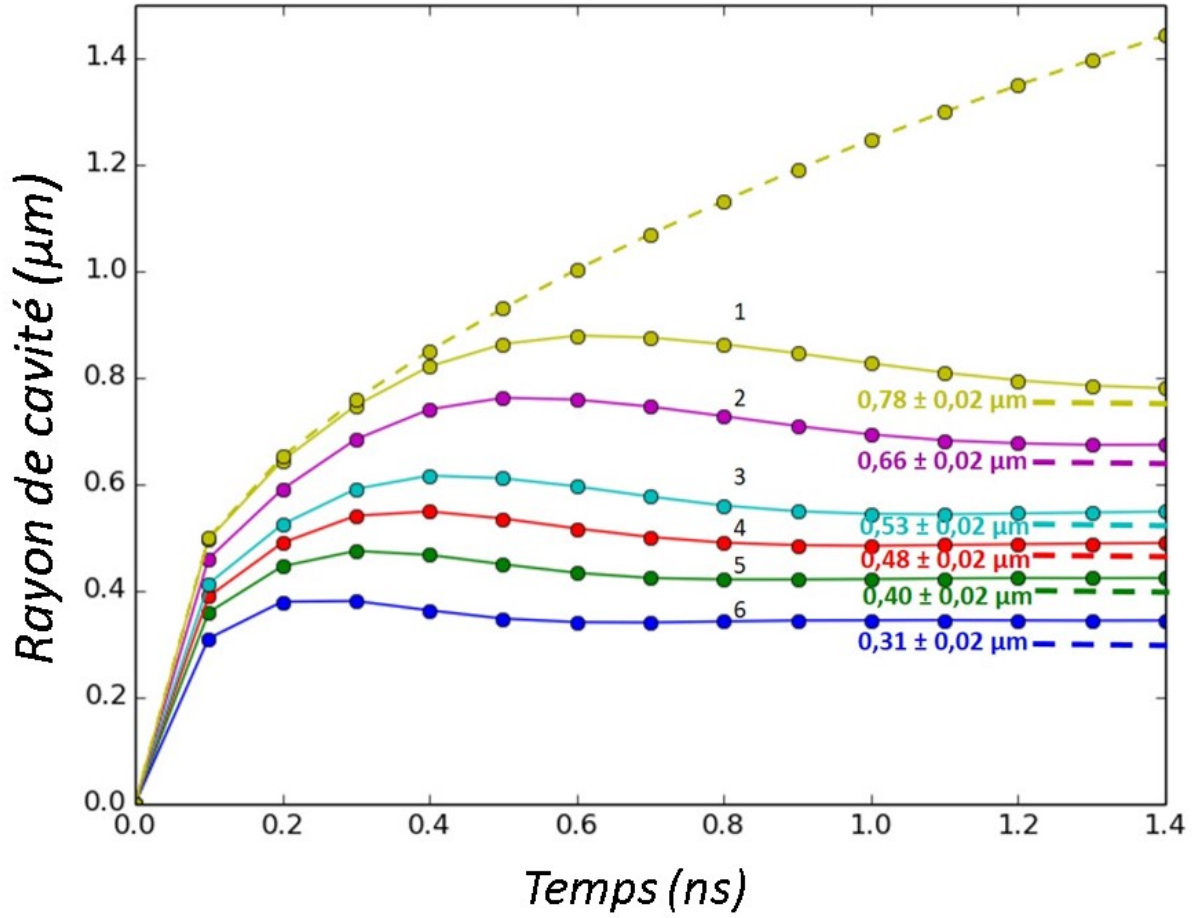


FIGURE 2.12 – Évolution temporelle du rayon de cavité pour différentes densité d'énergie : 2, 1.5, 1, 0.8, 0.6, 0.4 MJ/cm³ (respectivement les courbes pleines 1-6) et comparaison avec le modèle fluide pour 2 MJ/cm³ (trait en pointillés jaune). Les prédictions (voir texte) des rayons finaux de cavité (traits en pointillés horizontaux) sont données dans le cas du modèle élasto-plastique. Des variations significatives des temps de la dynamique de formation d'une cavité sont observées ainsi qu'une augmentation des tailles de cavités avec l'énergie laser absorbée. L'incapacité du modèle fluide à la reproduction de ces dynamiques est également observée.

de plus en plus longs. Durant la phase de contraction, plus l'absorption d'énergie est grande, plus la quantité de déformations plastiques est importante et donc plus le temps de relaxation des déformations élastiques est long jusqu'à ce que la cavité atteigne la stabilisation. Il est à noter que la quantité de déformations élastiques reste identique quelque soit la densité d'énergie absorbée, du moment que des déformations plastiques sont induites. Cette quantité est exactement égale à $\varepsilon_{\text{élastique}} = Y/E_{\text{Young}}$ (voir Fig. 1.10). Le rayon de cavité final augmente avec la densité d'énergie absorbée (son évolution est discutée plus en détails ci-après). Celui-ci peut être estimé à partir de la valeur du rayon maximal obtenu à laquelle la déformation élastique totale calculée par la simulation lui est soustrayée (voir Annexe E). Cette estimation prend également en compte les changements de phase qui annulent les déformations solides. Comme montré sur la Fig. 2.12 (traits en pointillés horizontaux), les résultats de cette estimation sont en assez bon accords avec les rayons finaux des cavités prédits par la simulation thermo-élasto-plastique. Ceci supporte

donc l'analyse présentée dans le paragraphe précédent sur la dynamique de formation de la cavité en trois étapes reliée au comportement élasto-plastique du solide. En outre, cette estimation permet de stopper les simulations avant le début de la phase de contraction de la cavité et gagner ainsi du temps de calcul.

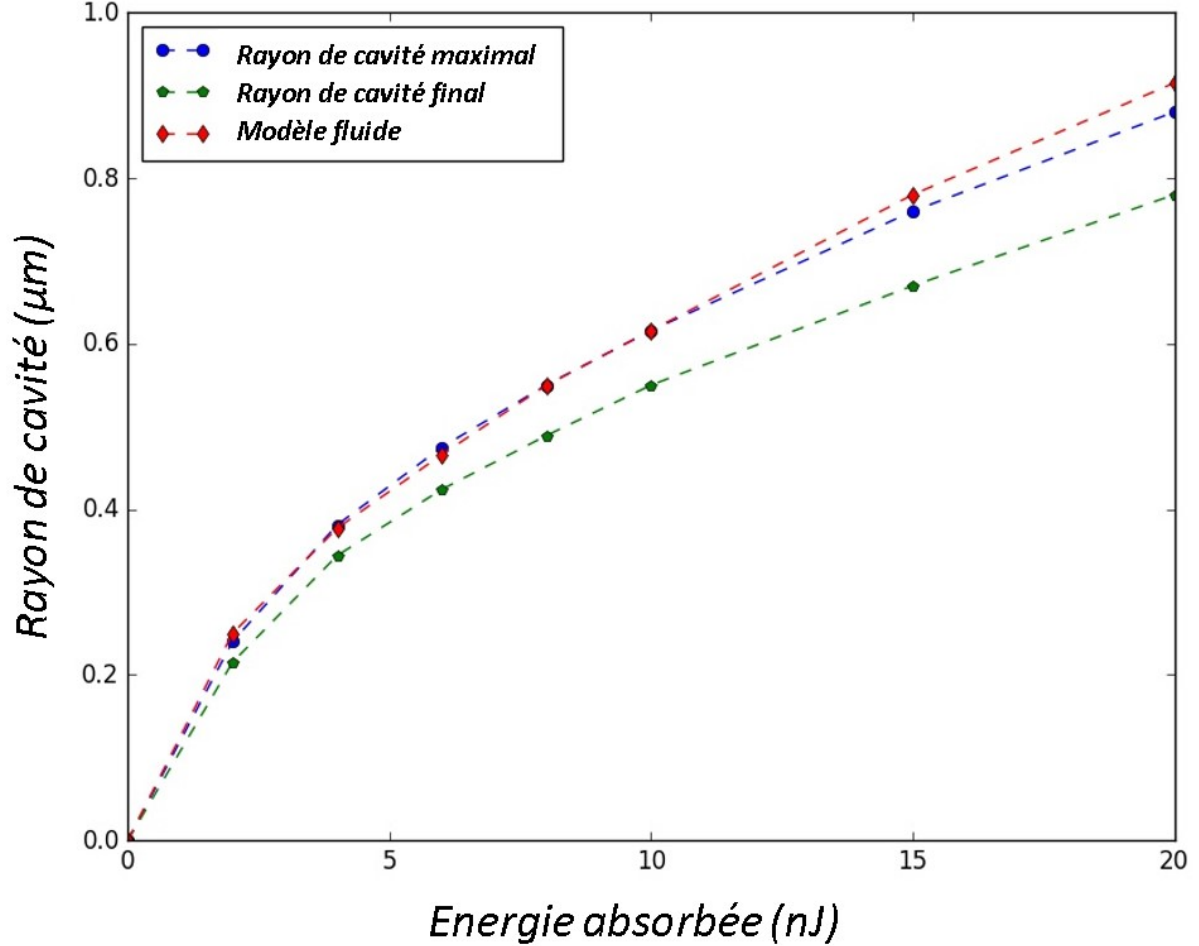


FIGURE 2.13 – Évolutions du rayon maximal et final de cavité en fonction de l'énergie absorbée.

La Fig. 2.12 présente également l'évolution du rayon de cavité dans le cas du modèle fluide en 2D pour une densité d'énergie absorbée de $2\text{MJ}/\text{cm}^3$. Le rayon prédit augmente de la même manière que dans le cas 1D, sans présenter aucune décroissance ni stabilisation (les étapes 2 et 3 sont absentes) telles qu'observées avec le modèle élasto-plastique, démontrant ainsi l'importance de ce dernier. Cependant, un rayon final de cavité peut être estimé [17] (Sec. 2.1) en comparant la pression du front d'onde P_{choc} à la limite élastique d'Hugoniot, *i.e.* lorsque $P_{choc} = Y_{LEH}$. Dans le cas présenté ici, cette condition est réalisée à $t = 480$ ps, menant à une estimation autour de $0.9\text{ }\mu\text{m}$. Cette valeur correspond approximativement au rayon maximal prédit par le modèle élasto-plastique. Cependant, le modèle fluide n'étant pas apte à prédire des déformations élastiques et plastiques, il ne peut présenter de relaxation (étape 2) ou de stabilisation (étape 3) comme le modèle élasto-plastique qui prédit alors un rayon final d'environ $0.8\text{ }\mu\text{m}$ et donne accès à l'ensemble de la dynamique de formation de la cavité.

La Fig. 2.13 présente les évolutions des rayons maximal et final de cavité en fonction de l'énergie absorbée prédites par les modèles élasto-plastique et fluide. Avec un intervalle

d'énergie absorbée entre 2 et 20 nJ (0.2 et 2 MJ/cm³), le rayon final de cavité varie entre 0.2 et 0.8 μm dans le modèle élasto-plastique. Il croît avec l'énergie absorbée en racine carrée, *i.e.* $r_{\text{cavity}} \propto \sqrt{E_{\text{abs}}}$, due à la géométrie 2D (pour une géométrie 3D, $r_{\text{cavity}} \propto \sqrt[3]{E_{\text{abs}}}$ dans l'Eq. (2.1)). La différence entre le rayon maximal et final croît également avec l'énergie absorbée. Ceci est dû à l'augmentation de la taille de la région où la matière a été compressée fortement et a donc subi une déformation plastique totale plus importante. La relaxation élastique, dont la quantité maximale est toujours la même, mène alors à une différence plus grande entre le rayon maximal atteint et le rayon final. Avec le modèle fluide, comme mentionné plus haut, le rayon final de la cavité correspond au rayon maximal prédit par le modèle élasto-plastique, à cause de l'absence de comportement élasto-plastique.

Ainsi, le désaccord exposé par le modèle fluide à la fois dans la prédiction du rayon final de la cavité, de la dynamique de sa formation et de la prédiction d'une zone surdense autour, montre clairement l'importance de la prise en compte de la réponse du solide environnant dans le cas de la génération d'une cavité dans la silice par un laser femtoseconde.

2.3.3 Prédiction des zones de fractures potentielles

Comme présenté dans la Sec. 1.2.6, par la connaissance de l'état de contrainte local et des limites de résistance du matériau, la simulation permet de déterminer les différentes zones critiques où de potentielles fractures peuvent apparaître. Dans le cas de la silice, les limites de résistance moyennes en traction et en compression à l'échelle microscopique sont respectivement $L_t = 8$ GPa et $L_c = 10$ GPa [102]. Il est à noter que les limites de résistance moyenne de la silice sont plus élevées que dans des cas macroscopiques puisque les volumes d'application des contraintes sont bien plus petits. La probabilité de rencontre de défauts de la matière initiant des fractures est ainsi plus faible ce qui, en moyenne, augmente la résistance du solide. Si les contraintes principales ou le cisaillement maximum induits par le dépôt d'énergie du laser et prédits par la simulation ne vérifient pas les critères énoncés dans la Sec. 1.2.6, alors le solide peut rompre, *i.e.* des fractures peuvent apparaître.

Dans les conditions de la formation d'une cavité unique dans la silice, une évaluation des régions critiques via le critère de Mohr (Sec. 1.2.6) a été menée dans un premier temps. Dans le cas présent d'un dépôt d'énergie isotrope dans un matériau avec des propriétés mécaniques également isotropes (matériau amorphe), la symétrie du système amène à conclure que la contrainte en compression, répartie de manière homogène autour de la cavité, est l'acteur principal de l'apparition de zones critiques dans le matériau, la contrainte en cisaillement n'étant pas suffisamment élevée ($\tau_{\text{max}} < L_t/2$ et vérifié par le calcul).

La Figure 2.14(a) montre la distribution spatiale de la contrainte en compression à 200 ps après le dépôt d'énergie laser pour une densité d'énergie de 0.6 MJ/cm³. À ce temps, la cavité a atteint son rayon maximal. Comme attendu, la contrainte en compression est distribuée de manière isotrope avec une valeur maximale sur un rayon d'environ 1 μm qui est, grossièrement, deux fois le rayon de cavité et situé au niveau de la région surdense. Cette contrainte induite amène à une région critique telle qu'illustrée Fig. 2.14(b). Elle est distribuée de la même manière que la contrainte en compression, en forme d'anneau, avec une probabilité de rencontre et d'activation d'un défaut, *i.e.* d'initier une fracture, qui dépend de sa taille et de la densité de défauts.

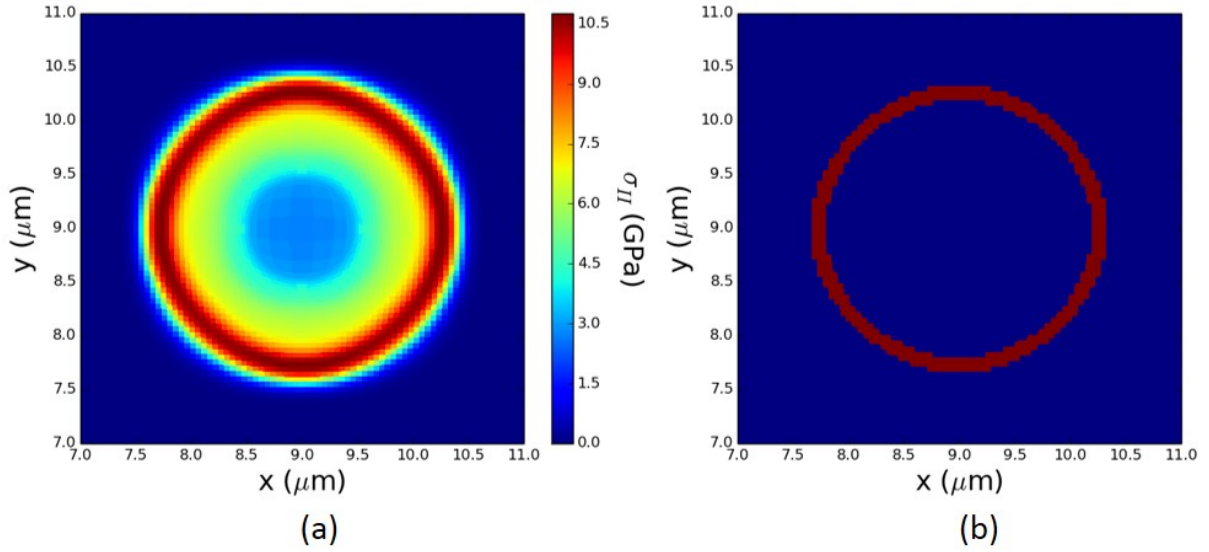


FIGURE 2.14 – (a) Carte 2D de la contrainte principale en compression σ_{II} à 200 ps. (b) Zones critiques en compression autour de la cavité où la région en rouge représente les lieux où des fractures peuvent être initiées.

Cette probabilité peut être définie par la loi de Weibull, dépendante de la distribution spatiale des défauts, de la contrainte et du volume dans lequel elle est appliquée au matériau [91], telle que présentée dans la Sec. 1.2.6. La distribution de probabilité de fracture en compression du matériau à 200 ps est présentée sur la Fig. 2.15.

Paramètres	Valeurs
Surface caractéristique S_0	$100 \mu m^2$
Surface d'application S	$7 \mu m^2$
Contrainte d'activation σ_0 en compression	10 GPa
Module de Weibull m	7

TABLEAU 2.3 – Tableau des paramètres utilisés dans la loi de Weibull appliquée au cas de la formation d'une cavité unique.

Les paramètres utilisés dans la loi de Weibull sont résumés dans le Tab. 2.3. La surface caractérisant l'échelle d'espace est égale à $S_0 = 100 \mu m^2$ (échelle de l'ordre de la dizaine de microns dans les directions cartésiennes x et y associées au module de Weibull m choisi [95]) et la surface où les contraintes sont non nulles est égale à environ $S = 7 \mu m^2$ (surface de rayon environ égal à $1.5 \mu m$). La contrainte moyenne d'activation $\sigma_0 = L_c = 10$ GPa en compression. Quant au module de Weibull m , celui-ci a été déterminé expérimentalement et est environ égal à 7 [95] pour les conditions physiques considérées. De manière identique à la Fig. 2.14, la région où la probabilité de fracture est la plus élevée, d'environ 10%, est distribuée de manière homogène autour de la cavité créée, en forme d'anneau. Cependant ici, bien que les contraintes soient légèrement au-dessus de 10 GPa, cette analyse nous renseigne sur le fait que des fractures ont peu de chance d'apparaître. En effet, puisque le volume d'application de la contrainte est petit par rapport à l'échelle d'espace de l'étude, la probabilité de rencontre et d'initiation d'un défaut à cette valeur de contrainte est faible. En augmentant l'énergie laser, une

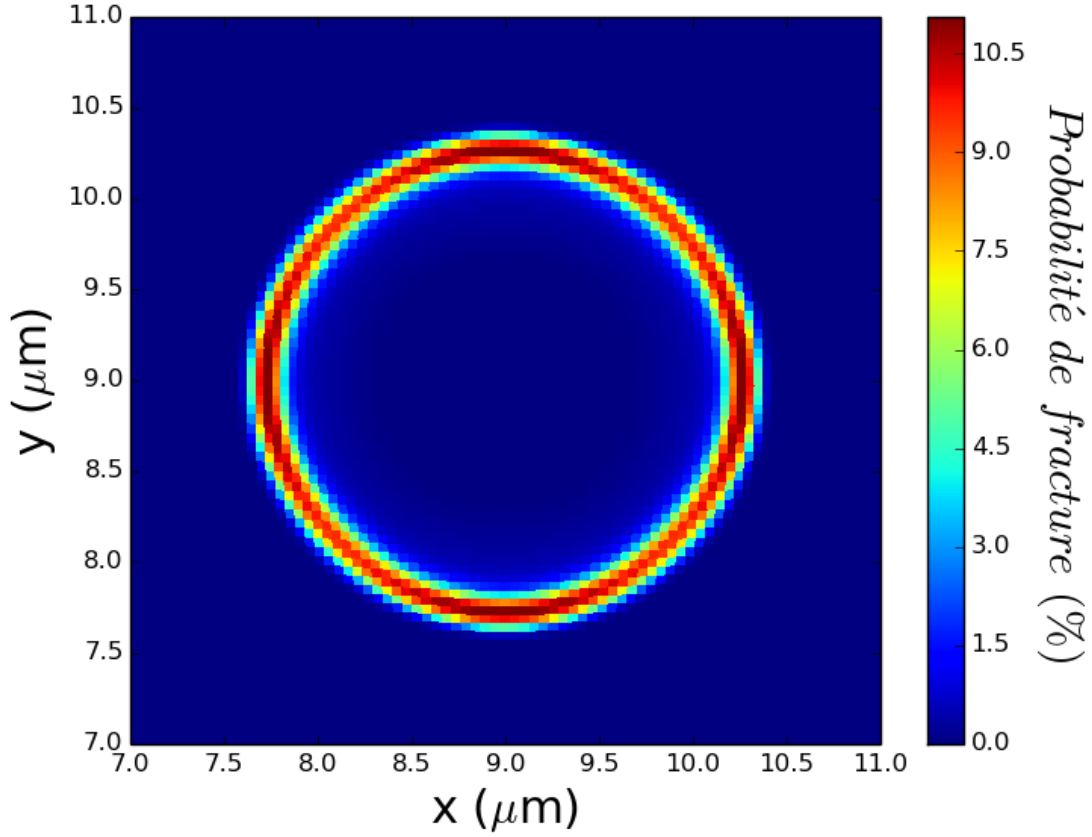


FIGURE 2.15 – Distribution de la probabilité de fracture en compression suivant la loi de Weibull.

plus grande partie de matériau sera fondue. Bien que le choc ait une amplitude plus importante, une diminution des contraintes ou du moins des contraintes comparables sont attendues, due aux transitions de phases et donc aux pertes des propriétés mécaniques sur une zone du matériau plus importante. Ceci explique donc pourquoi aucune fracture n'est observée lors de l'interaction d'un laser femtoseconde avec la silice (Sec. 2.1), à la différence des matériaux cristallins, tels que le saphir. Ceux-ci admettent en effet des plans cristallographiques avec des propriétés physiques supposées différentes. Ainsi, les vitesses du son, les limites élastiques, le module de cisaillement, les limites de résistance et autres propriétés, n'étant pas les mêmes, la distribution isotrope d'un dépôt d'énergie ne conduit pas nécessairement à des distributions isotropes de contraintes. Un cisaillement important peut alors apparaître et, en fonction de son amplitude, entraîner des fractures telles qu'observées expérimentalement dans le saphir [16, 17] (Sec. 2.1) ou dans le KDP par exemple [103].

De manière équivalente, un dépôt inhomogène dans un matériau amorphe, conduisant à une compression inhomogène et donc à l'augmentation du cisaillement, peut conduire également à l'apparition de fractures. Il a notamment été observé des fractures dans la silice, dans le cadre de régimes multi-impulsionnels et lors de la formation de multiples cavités voisines [33], sujet de la section suivante.

2.4 Simulation de la formation de multiple cavités

La simulation en deux dimensions de la formation de microstructures par laser permet d'étudier des cas plus complexes qu'un dépôt d'énergie homogène, soit par la prise en compte d'un matériau anisotrope tel qu'un cristal, soit par la prise en compte d'un dépôt d'énergie inhomogène. L'étude de dépôts inhomogènes a été choisie plutôt que l'étude de matériaux anisotropes tel que le saphir. La simulation thermo-élasto-plastique est donc appliquée au cas de la formation de multiples cavités voisines, utiles dans différentes applications [104, 105] telles que le stockage de données [15, 96] ou encore la découpe de verre [106].

Comme vu dans la section précédente, l'apparition significative de fractures dans la silice fondue n'est pas observée dans le cadre d'une seule impulsion laser formant une unique cavité mais dans le cadre de la formation de multiples cavités [33]. Cependant, plusieurs conditions semblent nécessaires. Tout d'abord, l'énergie absorbée dans le ma-

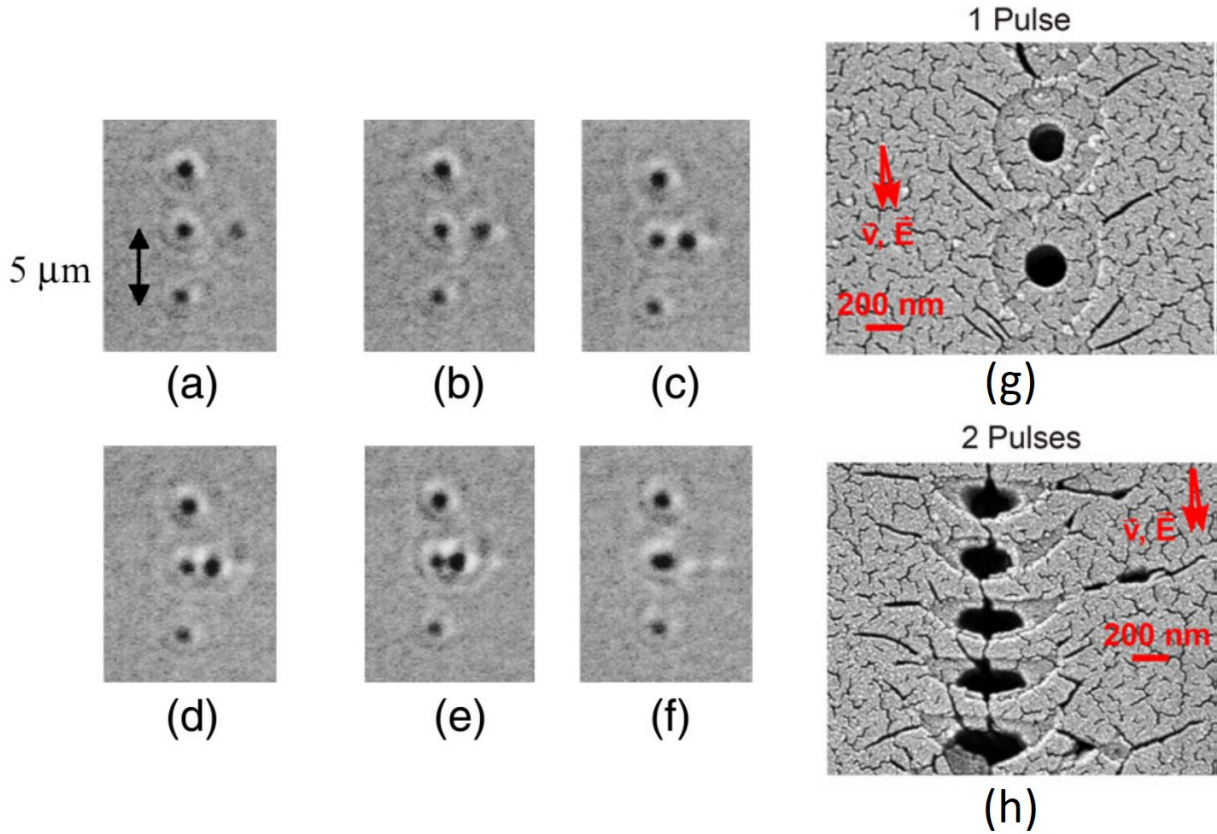


FIGURE 2.16 – (a-f) Expérience sur la fusion de deux cavités en une [107]. Les deux cavités générées par une impulsion femtoseconde dans la silice fusionnent sans produire de fracture. Le facteur de forme (dépôt inhomogène formé par deux spots laser) est également perdu durant les déformations du matériau, donnant lieu à la formation d'une unique cavité. (g et h) Image de la formation de multiple cavités par laser femtoseconde dans la silice pour (g) une impulsion et (h) deux impulsions [33]. Des cavités séparées par une distance inférieure au μm sont générées. Des fractures sont visibles autour des cavités et semble être induites suivant des directions privilégiées bien que le matériau soit amorphe.

tériau, conduisant à la génération des cavités, semble jouer un rôle dans l'apparition des fractures puisque Watanabe *et al.* [107] ont réussi à suffisamment rapprocher des cavités

pour que celles-ci fusionnent et n'en forme plus qu'une, tout en contrôlant l'énergie du laser de sorte à les former sans provoquer de fracture (2.16 (a-f)). En outre, une distance particulière entre chacune des cavités formées semble également jouer un rôle dans l'apparition de fractures. En effet, alors que dans le papier de E. N. Glezer *et al.* [15] les structures générées sont séparées d'environ $2\ \mu\text{m}$ et qu'aucune fracture n'est observée (même pour des énergies cent fois supérieures au seuil d'endommagement du matériau), dans le papier de Zimmermann *et al.* [33] les structures sont plus proches et des fractures apparaissent (voir Fig. 2.16 (g et h)) selon des directions privilégiées.

Dans un premier temps, pour simplifier l'étude afin de comprendre les mécanismes en jeu lors de la formation de multiple cavités induites par une impulsion laser femtoseconde, le cas de la génération de deux cavités voisines est étudié. Dans un deuxième temps, le cas de la formation de multiple cavités sera traité.

2.4.1 Cas 2D de la formation d'une double cavité

Paramètres de la simulation	Valeurs
Domaine de maillage 2D	$18\ \mu\text{m} \times 18\ \mu\text{m}$
Taille des mailles	$50\ \text{nm} \times 50\ \text{nm}$
Densité initiale ρ_0	$2.2\ \text{g/cm}^3$
Limite d'élasticité Y_0	$7.1\ \text{GPa}$
Module de cisaillement G_0	$22.6\ \text{GPa}$
Densité d'énergie laser absorbée	$1.2\ \text{MJ/cm}^3$ ($2 \times 0.6\ \text{MJ/cm}^3$)
Rayon des dépôts d'énergie	$0.13\ \mu\text{m}$
Distance entre les dépôts d'énergie	$0.72\ \mu\text{m}$

TABLEAU 2.4 – Tableau des paramètres de la simulation 2D dans le cas de la formation instantanée de deux cavités voisines.

Le cas d'un double dépôt d'énergie simultané est considéré dans cette section. Le tableau 2.4 résume l'ensemble des paramètres de la simulation. Chacun des deux dépôts est identique au dépôt de la Sec. 2.3.2, à savoir un dépôt de forme gaussienne avec un rayon de $0,13\ \mu\text{m}$ à mi-hauteur. L'énergie absorbée totale est égale à $12\ \text{nJ}$, soit le double de l'énergie précédente absorbée dans le cas de la formation d'une cavité unique. Celle-ci est distribuée selon deux taches lasers distantes de $0,72\ \mu\text{m}$ dans un premier temps, le long de l'axe x de la géométrie 2D de la simulation. Dans ce cas, deux cavités, séparées par une région légèrement plus dense, sont créées. La figure 2.17 présente la carte 2D de la densité du matériau ainsi que le profil de densité associé le long de l'axe x , $270\ \text{ps}$ après le dépôt d'énergie. Deux cavités légèrement allongées sont formées et entourées par une région surdense inhomogène.

De la même manière que pour le cas de la formation d'une cavité unique, la relaxation du plasma dense induit par chacun des dépôts d'énergie laser va initier une onde de choc qui va se propager et déformer le matériau solide (onde mère). Cependant, dans le cas présent, l'interaction entre les deux ondes de choc va mener à un comportement particulier. Suivant l'axe x , entre les deux dépôts d'énergie, les deux ondes de chocs vont entrer en collision, conduisant notamment à la génération de deux ondes filles (Fig. 2.18). L'une se propage dans la direction perpendiculaire avec une amplitude plus élevée que

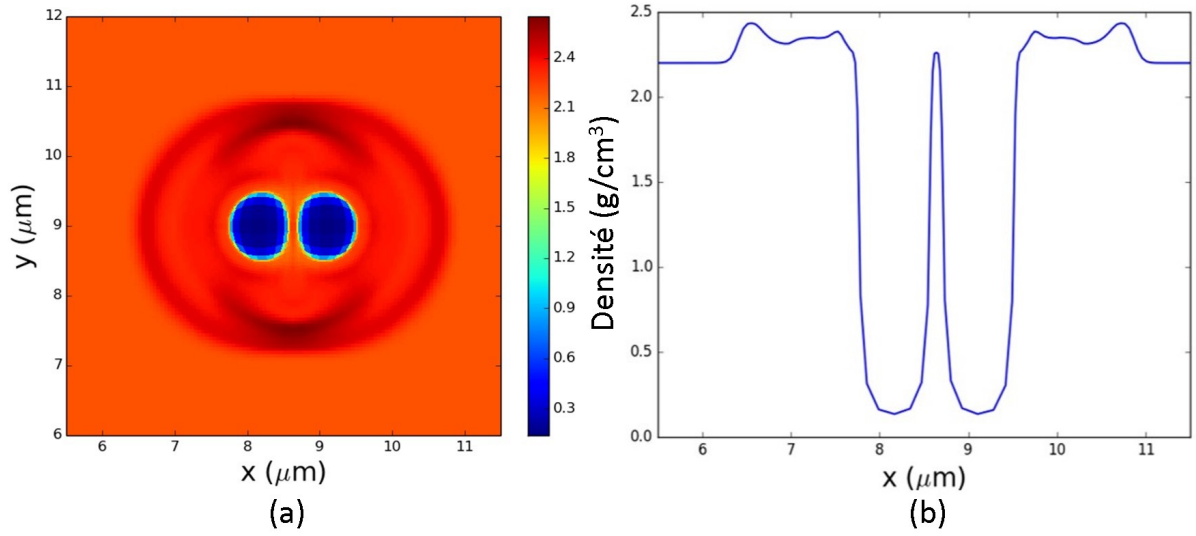


FIGURE 2.17 – (a) Carte 2D de la densité du matériau et (b) le profil de densité selon l'axe x à 270 ps après le dépôt d'énergie. Deux cavités allongées sont générées et entourées par une région surdense distribuée de manière inhomogène.

l'onde mère tandis que la seconde se propage sur l'axe x dans le sillage de l'onde mère avec une amplitude moindre. Cette dernière n'a donc que peu de conséquences sur la déformation permanente du matériau ou la génération de fracture. Elle s'apparente à une onde acoustique. À l'extérieur des deux cavités, le choc, *i.e.* l'onde mère, se propage comme dans le cas précédent d'une cavité unique. Le matériau est alors comprimé et déformé de manière inhomogène.

Tandis que deux régions symétriques (Fig. 2.17), fortement compressée autour de 2.5 g/cm^3 , apparaissent le long de l'axe y sous l'effet de l'onde fille, une région surdense autour de 2.3 g/cm^3 le long de l'axe x est induite par l'onde mère. De plus, la propagation asymétrique de l'onde de choc, induisant une compression inhomogène dans le matériau, mène à l'élongation des deux cavités le long de l'axe y . Ceci va avoir alors pour conséquence d'induire une augmentation du cisaillement, pouvant être suffisant pour initier des fractures potentielles.

L'évaluation des contraintes principales en compression et de cisaillement maximal sont présentées, respectivement, sur les Figs. 2.19 et 2.20, avec leurs zones critiques associées. Deux temps différents sont considérés pour la contrainte principale en compression afin de mettre en avant l'évolution particulière de la région critique autour des deux cavités en formation. À 200 ps après le dépôt d'énergie (Figs. 2.19(a) et (b)), les contributions à la fois des ondes mère et fille sont visibles dans l'apparition d'une zone critique de fractures potentielles en compression sur la Fig. 2.19(b). Cette région critique est relativement isotrope, de la même manière que dans le cas de la formation d'une cavité unique. Cependant, tel que mentionné plus haut, l'onde mère a une amplitude plus faible que l'onde fille. À cet instant, son amplitude se situe autour de 10-11 GPa tandis que l'onde fille a une amplitude autour de 18 GPa. En se propageant, celle-ci décline donc plus rapidement sous la limite en compression L_c égale à 10 GPa. À 220 ps après le dépôt d'énergie, l'onde mère ne contribue plus à l'apparition de zones critiques de fractures potentielles, ayant une amplitude inférieure à 10 GPa. À 270 ps après le dépôt d'énergie (Figs. 2.19(c) et (d)), seule l'onde fille induit alors des contraintes en compression excédant la limite de

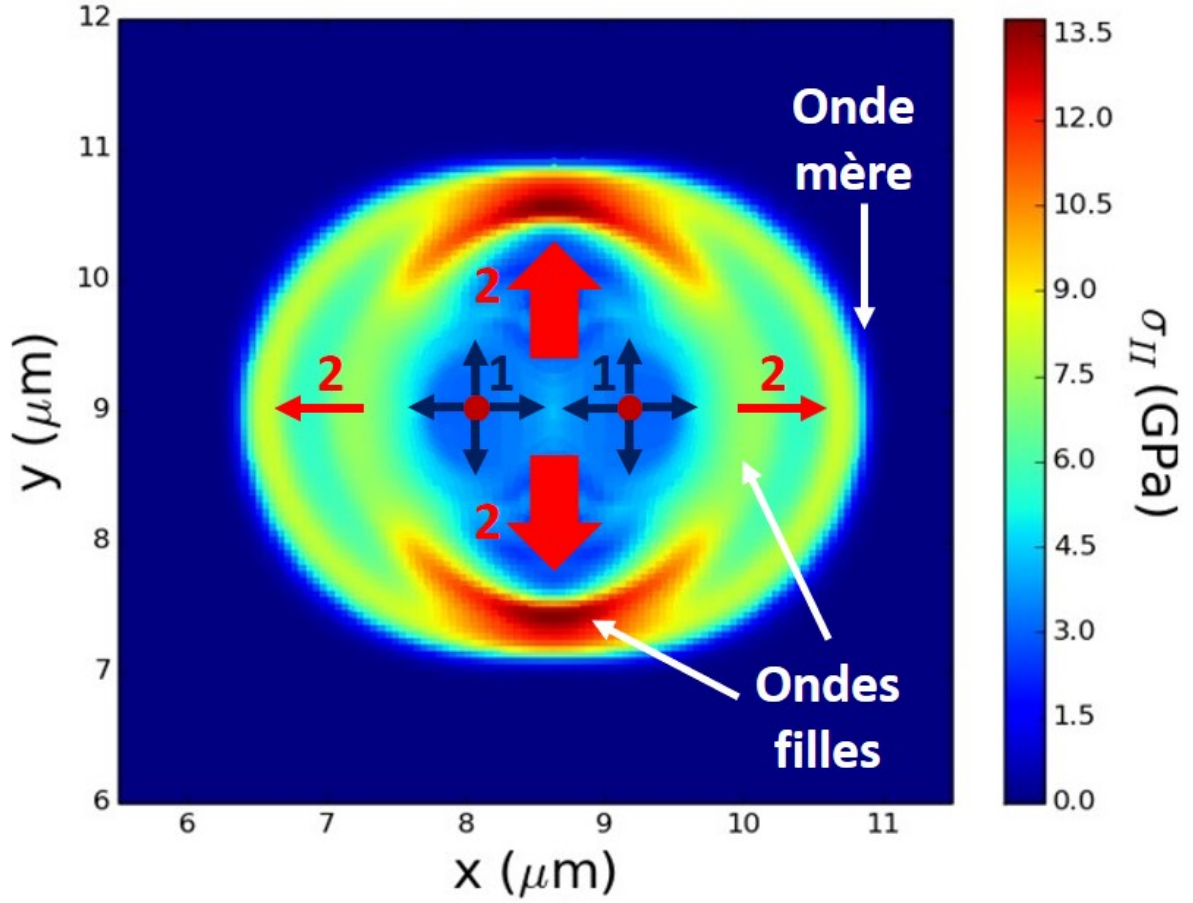


FIGURE 2.18 – Illustration des mécanismes de collisions des chocs via la distribution spatiale de la contrainte principale σ_{II} dans les conditions physiques résumées dans le Tab. 2.4. Zone 1 : deux ondes issues des deux dépôts d'énergie sont initiées. Vers l'extérieur des dépôts, les ondes initiales forment des ondes mères. Zone 2 : Ces deux ondes mères entrent en collision et forment deux ondes filles. L'une se propage dans la direction y avec une amplitude plus importante que l'onde mère. La seconde se propage dans la direction x dans le sillage de l'onde mère avec une amplitude plus faible que celle-ci.

résistance en compression du matériau le long de l'axe y (autour de 13 GPa), résultant en une distribution inhomogène des régions critiques autour des deux cavités telles que présentées Fig. 2.19(d). En outre, cette distribution asymétrique des contraintes en compression à cet instant (autour de 13 GPa le long de l'axe y et autour de 8 GPa le long de l'axe x), à l'origine de l'élongation des cavités le long de l'axe y, amène à l'augmentation de la contrainte de cisaillement le long de l'axe x (Fig. 2.20(a)). Celle-ci est maximale à 270 ps et autour de 4,1 GPa, excédant ainsi la limite en cisaillement $L_t/2$ [90] égale à 4 GPa. Ceci amène donc à l'apparition de deux zones critiques en cisaillement, symétriquement réparties le long de l'axe x autour des cavités, telles que représentées sur la Fig. 2.20(b).

Tel qu'énoncé plus haut, la distance d entre les centres des deux taches laser du dépôt d'énergie est un paramètre jouant un rôle important dans l'apparition ou non d'un cisaillement élevé et donc d'une zone critique de fractures potentielles. Si les deux taches lasers sont trop proches ($d \leq 0.43 \mu\text{m}$ dans les mêmes conditions), les calculs montrent que les deux cavités formées se combinent durant leur croissance, menant finalement à une unique cavité. Dans ce cas, la distribution des contraintes en compression au sein de

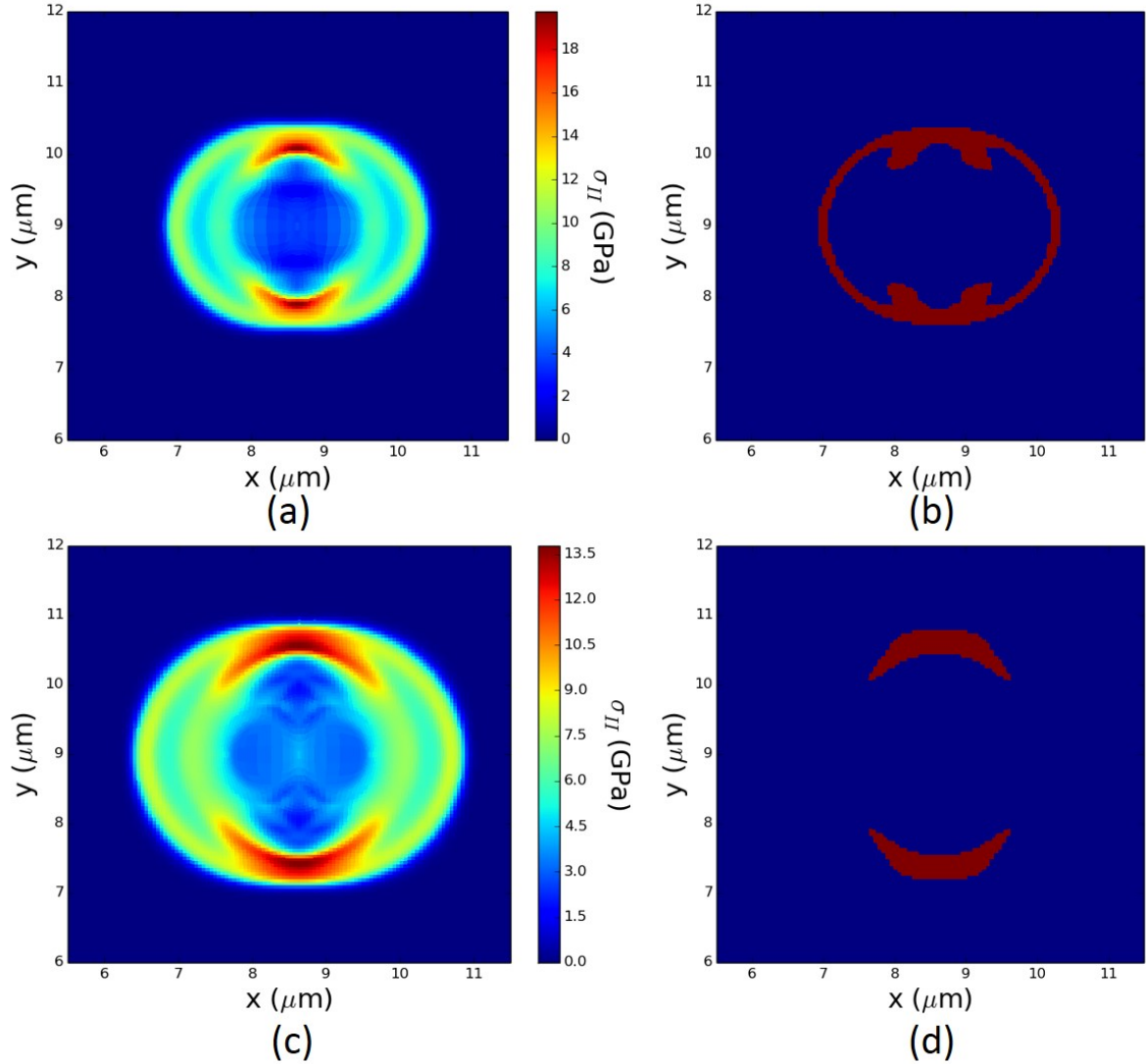


FIGURE 2.19 – Profils spatiaux 2D de la contrainte principale en compression avec les zones critiques associées à (a,b) 200 ps et (c,d) 270 ps. Une distribution inhomogène de compression est observée. À 200 ps, l’onde mère et l’onde fille contribuent toutes les deux à l’apparition d’une zone critique en compression autour des cavités. À 270 ps, seule l’onde fille contribue à l’apparition d’une zone critique en compression autour des cavités.

la matière environnante est quasiment homogène comme sur la Fig. 2.14. Les cavités sont alors moins allongées et l’amplitude des contraintes en cisaillement devient trop faible pour induire une région critique associée. La fusion des deux cavités, comme montrée dans les expériences de Watanabe *et al.* [107], justifie l’hypothèse selon laquelle la forme d’un dépôt inhomogène est relativement perdue durant les processus hydrodynamiques. En effet, deux impulsions lasers suffisamment rapprochées (dépôt inhomogène) conduisent à la formation d’une cavité unique similaire à celle formée par une seule impulsion avec une énergie deux fois plus importante (dépôt homogène). À l’inverse, si la distance d est trop grande ($d \geq 0.81 \mu\text{m}$), l’amplitude de l’onde fille, générée par la collision des deux ondes de chocs, n’est pas assez élevée pour induire une répartition fortement inhomogène des contraintes en compression. Dans ce cas également, l’amplitude des contraintes en

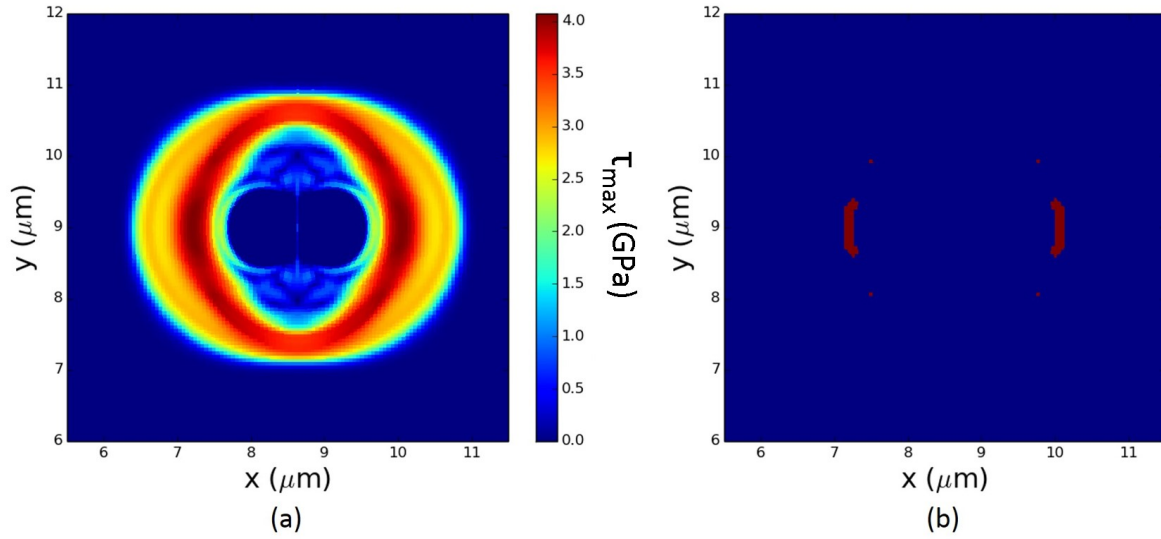


FIGURE 2.20 – Profils spatiaux 2D de (a) la contrainte de cisaillement maximal avec (b) la zone critique associée à 270 ps. Une augmentation significative de la contrainte en cisaillement est observée due à la distribution inhogène de compression dans le matériau. Deux régions critiques en cisaillement symétriques apparaissent de part et d'autre des deux cavités.

cisaillement n'est pas assez élevée pour induire une zone critique de fractures potentielles.

Quant à la variation de l'énergie pour une distance donnée, une diminution des contraintes en cisaillement avec la diminution de la densité d'énergie absorbée est attendue, puisque l'amplitude des ondes mères et filles diminuent. Celles-ci devraient donc moins allonger les cavités et leur distribution en compression devrait être moins inhomogène. Une disparition des zones critiques en cisaillement est donc également attendue dans ce cas.

Pour aller plus loin dans l'évaluation de la rupture du matériau, la loi de Weibull est appliquée à présent (Sec. 1.2.6). Celle-ci fournit les cartes 2D de probabilités de fracture du matériau en compression (Fig. 2.21 (a)) et en cisaillement (Fig. 2.21 (b)), 270 ps après le dépôt d'énergie. Les paramètres utilisés dans la loi de Weibull sont résumés sur le Tab. 2.5. La surface caractéristique, la contrainte d'activation en compression et le module

Paramètres	Valeurs
Surface caractéristique S_0	$100 \mu m^2$
Surface d'application S	$12 \mu m^2$
Contrainte d'activation σ_0 en compression	10 GPa
Contrainte d'activation σ_0 en cisaillement	4 GPa
Module de Weibull m	7

TABLEAU 2.5 – Tableau des paramètres utilisés dans la loi de Weibull appliquée au cas de la formation instantanée de deux cavités voisines.

de Weibull restent les mêmes que dans le cas précédent. Seule la valeur de la contrainte d'activation σ_0 change en cisaillement et est égale à $L_t/2 = 4$ GPa. De plus, la surface S d'application des contraintes est ici environ égale à $12 \mu m^2$. Celle-ci correspond à la

région où les contraintes sont non nulles, soit sur une surface de rayon environ égal à 2 μm . Comme attendu, les probabilités de fracture sont réparties dans ce cas de manière

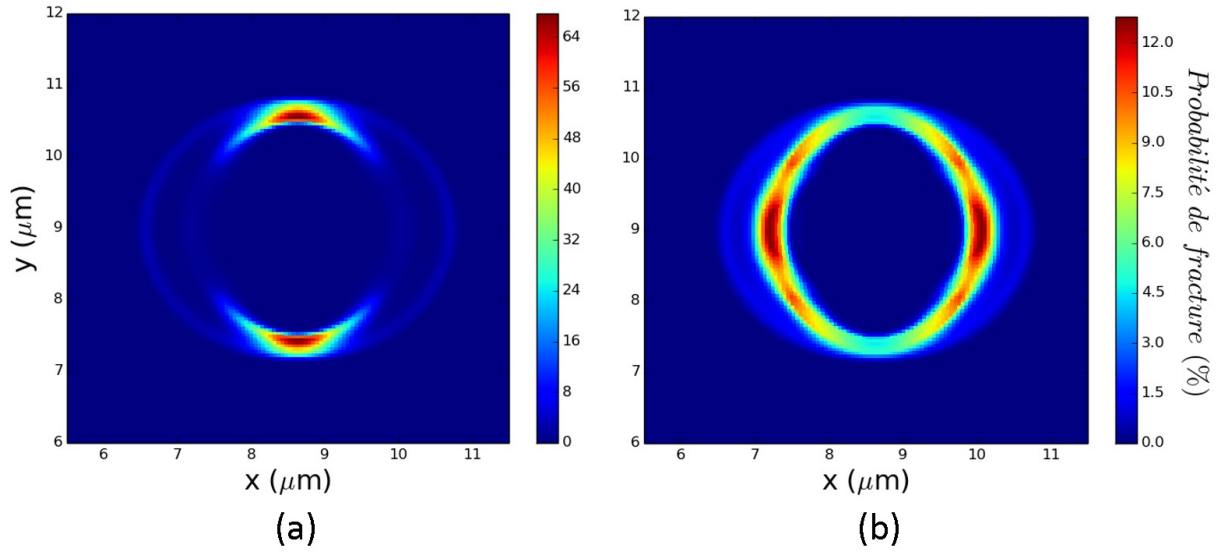


FIGURE 2.21 – Carte 2D des probabilités de fracture du matériau (a) en compression et (b) en cisaillement à 270 ps. Une augmentation de la probabilité de fracture en compression et en cisaillement est observée autour des deux cavités voisines, selon des directions privilégiées.

inhomogène autour des deux cavités formées. Tandis que la probabilité de fracture en compression atteint plus de 64% de chance d’activation d’un défaut dans la direction y (Fig. 2.21 (a)), elle reste inférieure à 10% le long de l’axe x où se propagent l’onde mère et l’onde fille de faible amplitude. Quant à la probabilité maximale de fracture par cisaillement, celle-ci est de l’ordre de 12% dans la direction x et moins de 5% dans la direction y (Fig. 2.21 (b)). Ainsi, une direction privilégiée de fracture est observée dans le cas de la formation d’une double cavité, due à l’interaction des deux ondes de choc mères entre les cavités, qui les ont allongé selon l’axe y et augmenté en conséquence le cisaillement le long de l’axe x .

2.4.2 Cas 2D de la formation de multiple cavités

Le cas précédent de la double cavité est à présent généralisé au cas de la formation de multiple cavités. La génération de quatre cavités est présentée ici, ce nombre étant supposé suffisamment important pour mettre en avant une interaction complexe des ondes de choc et être représentatif d’un nombre plus grand de cavités formées, tel que dans les expériences [33, 96].

Le tableau 2.6 résume l’ensemble des paramètres des simulations de la formation de multiple cavités dans la silice. L’énergie totale déposée est de 24 nJ, soit 6 nJ par cavité. La distance entre deux taches lasers voisines est de 0.72 μm . Dans un premier temps, le cas d’un dépôt d’énergie de quatre taches lasers simultanées est considéré. Quatre ondes de chocs sont alors initiées simultanément à partir de chacune des zones irradiées. Leurs interactions mènent à différentes ondes filles, avec des amplitudes plus importantes que dans le cas précédent de la double cavité, se propageant le long de l’axe y . Dans

Paramètres de la simulation	Valeurs
Domaine de maillage 2D	18 μm $\times$ 18 μm
Taille des mailles	50 nm $\times$ 50 nm
Densité initiale ρ_0	2.2 g/cm ³
Limite d'élasticité Y_0	7.1 GPa
Module de cisaillement G_0	22.6 GPa
Densité d'énergie laser absorbée	2.4 MJ/cm ³ (4 $\times$ 0.6 MJ/cm ³)
Rayon des dépôts d'énergie	0.13 μm
Distance entre les dépôts d'énergie	0.72 μm

TABLEAU 2.6 – Tableau des paramètres de la simulation 2D dans le cas de la formation de multiple cavités.

un deuxième temps, les quatre dépôts d'énergie sont faits successivement avec un délai de 100 ps entre chacun. La valeur de ce délai assure que chaque dépôt d'énergie se fait dans une zone non-modifiée du matériau. Expérimentalement, ces conditions peuvent être mises en place par l'intermédiaire d'une seule impulsion laser divisée en quatre faisceaux à l'aide d'un dispositif optique approprié. Puis, à l'aide de lignes à retard, chaque faisceau pourrait être décalé en temps et en espace afin d'interagir avec le matériau tous les 100 ps à l'endroit désiré. Dans ce cas, les quatre ondes de choc, initiées à différents temps, interagissent principalement sur l'axe x avec une accumulation d'ondes de compression dans cette direction. Le long de l'axe y, la formation d'ondes filles est moins marquée en raison des ondes de choc initiées à des temps différents. En effet, deux ondes de choc induites par deux dépôts d'énergie décalés dans le temps ne sont pas symétriques, ce qui a pour conséquence de diminuer de manière significative le transfert de moment entre la direction x et y.

Dépôts d'énergie simultanés

Le cas de quatre dépôts d'énergie instantanés est tout d'abord étudié. La Fig. 2.22 montre la carte spatiale 2D du profil final de densité dans ce cas. Quatre cavités allongées sont formées selon y, avec des tailles et un rapport d'aspect similaires. Elles sont entourées par une région de surdensité inhomogène, plus étendue le long de l'axe y. Comme expliqué précédemment, l'interaction des ondes de chocs conduisant à des ondes filles d'amplitudes plus grandes le long de l'axe y, mène à une compression plus importante de la matière dans cette direction. Comme dans le cas précédent de la double cavité induite par deux dépôts d'énergie simultanés, les mêmes phénomènes forment la zone de surdensité observée dont les valeurs sont autour de 2.4 g/cm³ le long de l'axe y et de 2.25 g/cm³ le long de l'axe x.

La Fig. 2.23 montre les cartes 2D de la contrainte principale en compression (2.23(a)) et de la contrainte de cisaillement maximal (2.23(c)), avec leurs régions critiques associées (2.23(b) et (d)), 280 ps après le dépôt d'énergie (temps pour lequel la valeur maximale de la contrainte en cisaillement est observée, autour de 4.1 GPa). Comme dans le cas de la double cavité, la formation d'ondes filles mène à deux zones symétriques de forte compression le long de l'axe y (Fig. 2.23(a)), induisant une large région critique en compression (2.23(b)). Cette répartition inhomogène de compression mène alors à un allongement des cavités formées, ainsi qu'à l'augmentation du cisaillement le long de l'axe x (2.23(c)). Deux régions critiques sont alors induites par le cisaillement de par et d'autre des cavi-

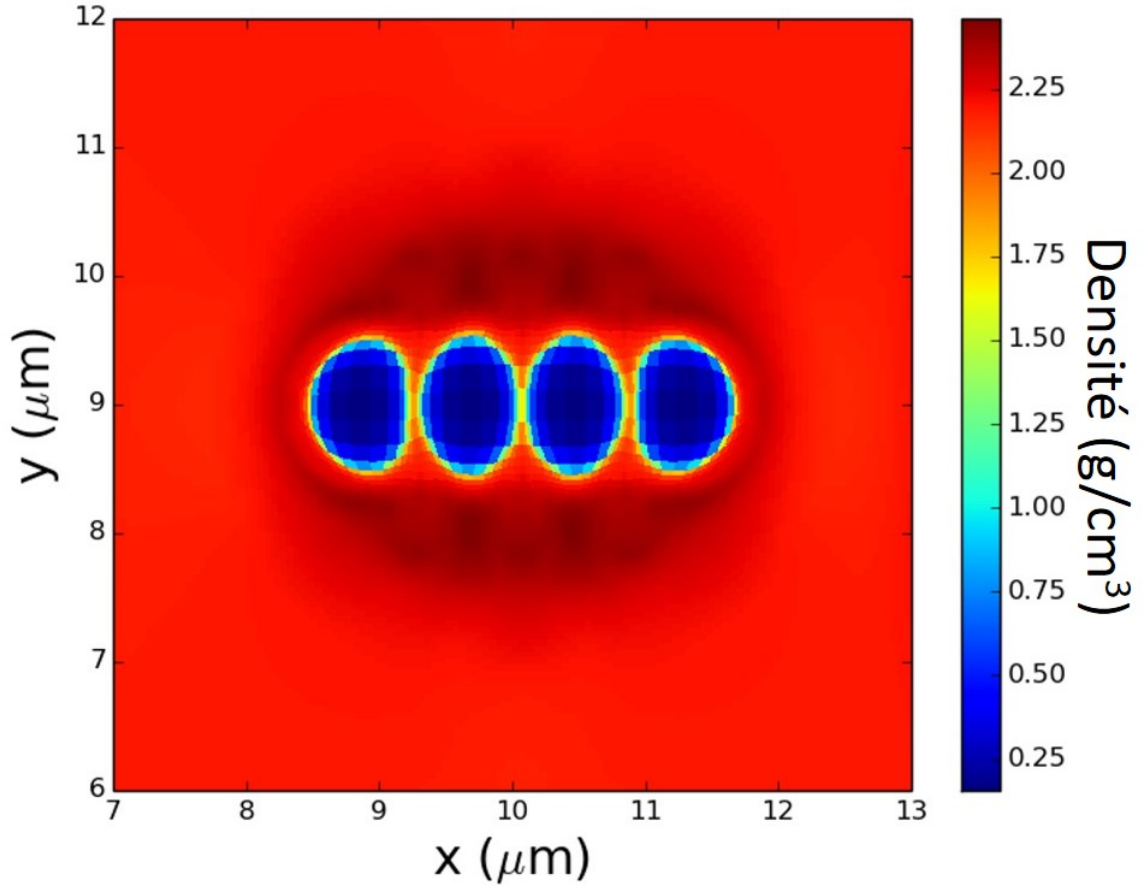


FIGURE 2.22 – Carte 2D du profil final de densité dans le cas de quatre dépôts d'énergie simultanés. Quatre cavités allongées selon y sont générées dans le matériau, entourées d'une région surdense inhomogène.

tés dans cette direction(2.23(d)). Aucune contrainte en cisaillement n'est visible entre les cavités où la matière a été fondue et les contraintes ont été annulées. En augmentant la distance entre les dépôts d'énergie, une partie de la matière solide devrait être préservée et des contraintes en cisaillement devraient être observables dans ces régions. Cependant, comme vu dans Sec. 2.4.1, pour des distances trop importantes entre les dépôts ($d \geq 0.81 \mu\text{m}$ dans les conditions présentes), l'influence des ondes filles s'amenuise et les contraintes en cisaillement induites ne sont pas assez importantes pour excéder la limite de résistance en cisaillement du matériau $L_t/2$.

La loi de Weibull est appliquée à présent afin d'évaluer les probabilités de fractures. Les paramètres utilisés sont résumés sur le Tab. 2.7. La surface S d'application des contraintes est dans ce cas plus grand et environ égal à $24 \mu\text{m}^2$, tandis que les autres paramètres restent identiques. Celle-ci correspond à la région où les contraintes sont non nulles, soit sur une surface de $6 \mu\text{m}$ le long de l'axe x et $4 \mu\text{m}$ le long de l'axe y . La Figure (Fig. 2.24) présente les cartes 2D de la probabilité de fracture du matériau en compression (Fig. 2.24 (a)) et en cisaillement (Fig. 2.24 (b)). Dans le cas présent de la formation de multiple cavités simultanées, la probabilité maximale de fracture par compression est située au niveau de la région critique observée précédemment sur la Fig. 2.23(b) où elle est entre 90 et 100% de chance d'activer un défaut entraînant une fracture dans le matériau. Les

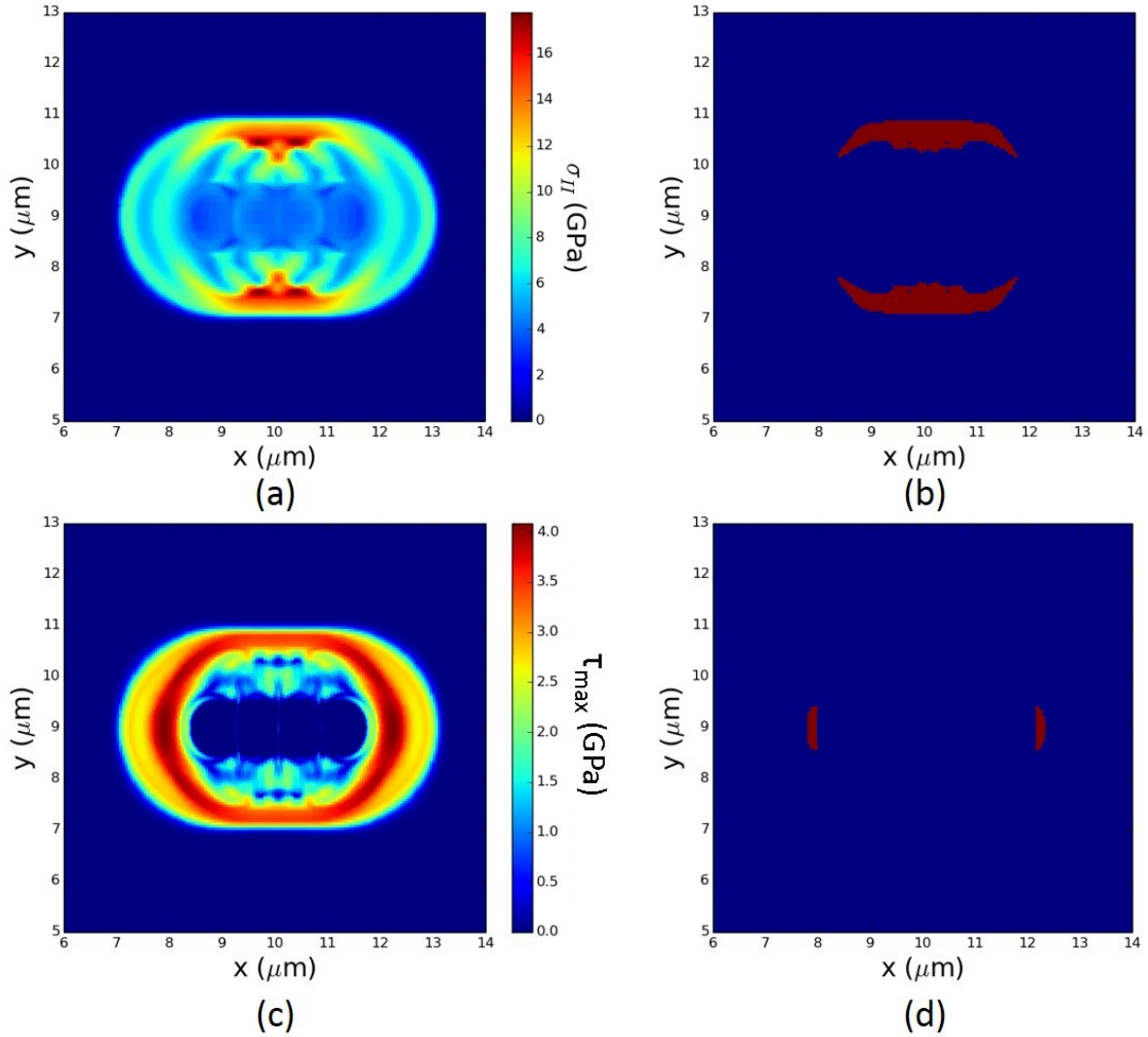


FIGURE 2.23 – Profils spatiaux 2D à 280 ps pour (a) la contrainte principale en compression avec (b) la zone critique associée; (c) la contrainte de cisaillement maximal avec (d) la zone critique associée. La distribution inhomogène de la contrainte en compression, dues aux interaction entre les ondes, mène à l'apparition de régions critiques en compression le long de l'axe y . Ceci conduit alors à un allongement des cavités et à l'augmentation du cisaillement le long de l'axe x . Deux régions critiques en cisaillement apparaissent alors de part et d'autre des cavité selon x .

différentes ondes se propageant dans les autres directions, génèrent des régions où les probabilités de fracture sont inférieures à 10 %. La probabilité maximale de fracture en cisaillement se situe dans la direction x , au niveau des zones critiques présentées sur la Fig. 2.23(d) atteignant des valeurs de l'ordre de 23 %, soit quasiment deux fois plus de chance d'activer un défaut par rapport au cas de la double cavité (Sec. 2.4.1). Cela est dû au fait que le volume, où les contraintes appliquées aux matériau sont non nulles, est deux fois plus important que le cas de la double cavité. La probabilité de rencontrer un défaut et de l'activer est donc deux fois plus importante. Il est à noter que si on augmente le nombre de cavité, l'échelle d'espace caractéristique d'étude doit être augmentée en

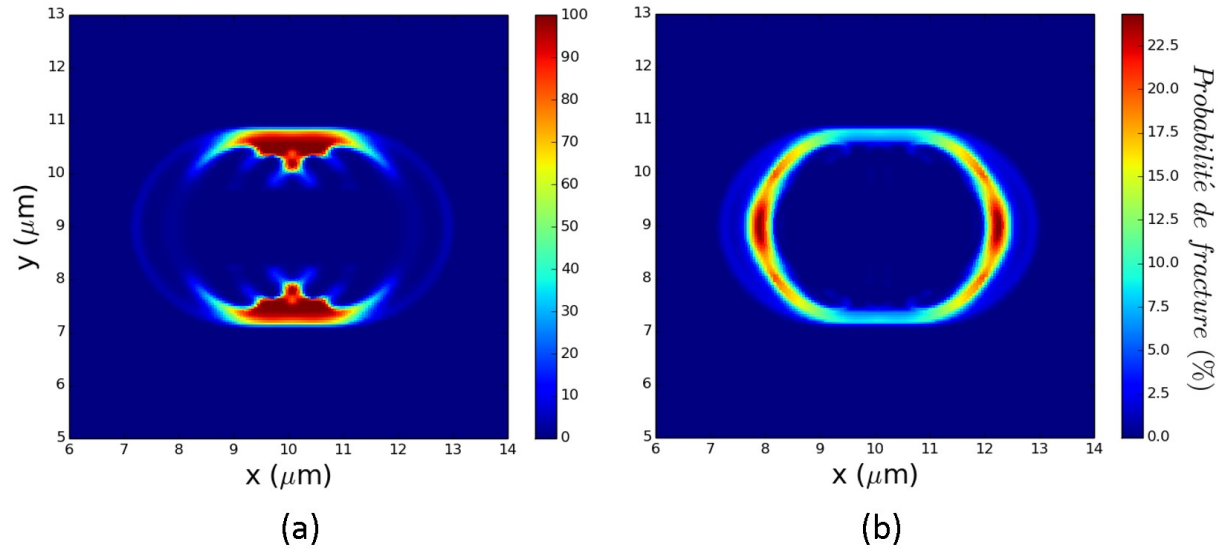


FIGURE 2.24 – Carte 2D des probabilités de fracture du matériau (a) en compression et (b) en cisaillement à 280 ps. Les probabilités de fracture sont plus élevées par rapport au cas de la double cavité dû à un volume d'application des contraintes plus grand et donc à une probabilité de rencontre et d'initiation des défauts plus importante.

Paramètres	Valeurs
Surface caractéristique S_0	$100 \mu m^2$
Surface d'application S	$24 \mu m^2$
Contrainte d'activation σ_0 en compression	10 GPa
Contrainte d'activation σ_0 en cisaillement	4 GPa
Module de Weibull m	7

TABEAU 2.7 – Tableau des paramètres utilisés dans la loi de Weibull appliquée au cas de la formation instantanée de multiple cavités voisines.

conséquence de sorte à ce que le rapport S/S_0 ne soit pas supérieur à 1. Ces résultats mettent en avant tout d'abord des directions d'initiation des fractures privilégiées, comme dans le cas de la double cavité. Cependant, ici, le nombre plus important de cavité voisines augmente les effets de collaboration des ondes de choc menant à une amplitude des ondes filles plus grande. Les cavités générées sont donc plus allongées et le cisaillement, bien qu'il soit comparable en amplitude, est distribué sur une région plus importante dans le matériau, augmentant ainsi les probabilités de rencontre et d'activation des défauts et donc la probabilité de fracture.

Dépôts d'énergie successifs

Le cas de quatre dépôts d'énergie successifs est à présent traité. La Fig. 2.25 montre la carte spatiale 2D du profil final de densité dans ce cas. Quatre cavités allongées sont également générées (de la gauche vers la droite comme indiqué par la flèche). Cependant, leurs tailles et leurs rapports d'aspect sont légèrement différents. La première cavité (sur la gauche), qui se forme librement pendant 100 ps, est approximativement similaire au cas d'un unique dépôt d'énergie, mais la dernière cavité (sur la droite) est plus petite et plus

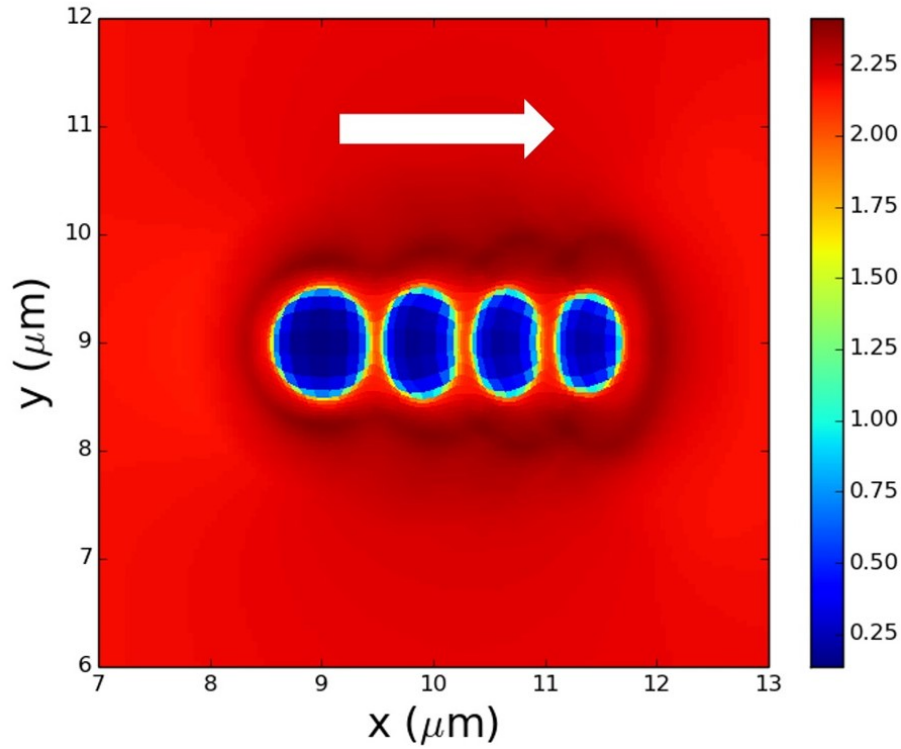


FIGURE 2.25 – Carte 2D du profil final de densité dans le cas de quatre dépôts d'énergie successifs. La flèche indique le sens d'application de chaque impulsion laser. Quatre cavités allongées selon y sont induites de manière successive et entouré d'une région surdense inhomogène.

allongée le long de l'axe y . Ceci est dû à l'accumulation progressive des ondes de choc le long de l'axe x , menant à des états de contraintes de plus en plus important autour des cavités nouvellement formées. En effet, leur expansion est de plus en plus ralentie puisque chaque nouvelle cavité est soumise aux ondes de chocs générées par les précédents dépôts d'énergie. En outre, pour les mêmes raisons (accumulation des contraintes de compression), la taille de la région surdense, autour de chaque nouvelle cavité, croît légèrement, avec des valeurs autour de 2.5 g/cm^3 le long de l'axe x et de 2.3 g/cm^3 le long de l'axe y .

La Fig. 2.26 montre les cartes 2D de la contrainte principale en compression (Fig. 2.26(a)) et de la contrainte de cisaillement maximale (Fig. 2.26(c)), avec leurs régions critiques associées (Figs. 2.26(b) et (d)), 550 ps après le dépôt d'énergie (temps pour lequel la valeur maximale de la contrainte en cisaillement est observée, autour de 4.1 GPa également). L'accumulation des ondes de compression le long de l'axe x (Fig. 2.26(a)) conduit à une unique région critique par compression, située sur la droite de la dernière cavité formée (Fig. 2.26(b)). Cette distribution de compression mène à une augmentation de la contrainte en cisaillement le long de l'axe y (Fig. 2.26(c)) et deux régions critiques en cisaillement symétriques sont créées dans cette direction (Fig. 2.26(d)). Des fractures sont alors attendues dans ces régions, situées perpendiculairement par rapport à la direction de formation des cavités, tel qu'observé expérimentalement [33].

La loi de Weibull est appliquée à présent afin d'évaluer les probabilités de fractures. Les paramètres utilisés sont résumés sur le Tab. 2.8. La surface S d'application des contraintes est dans ce cas plus grand et environ égal à $38 \mu\text{m}^2$. Les autres paramètres restent iden-

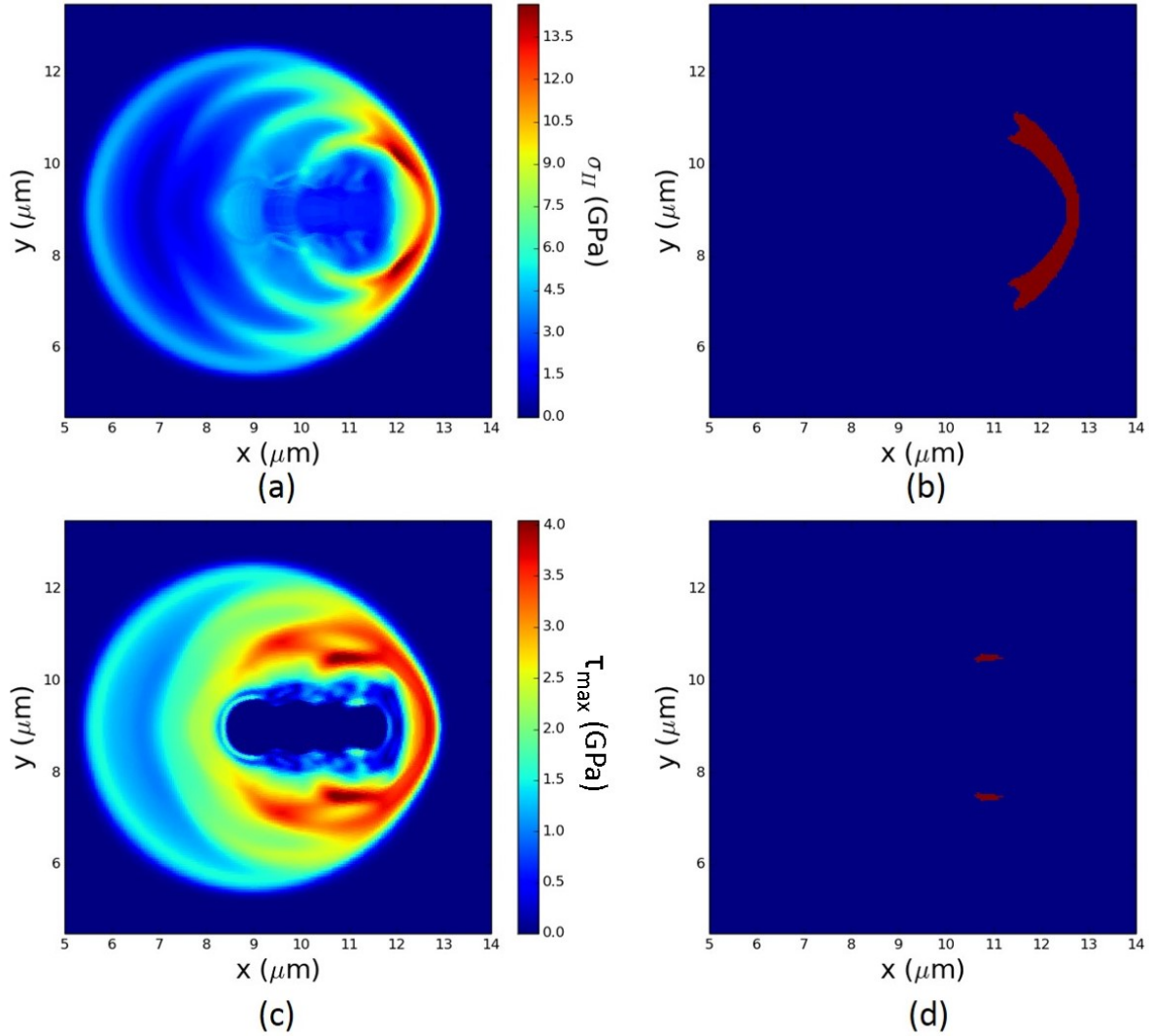


FIGURE 2.26 – Profils spatiaux 2D à 550 ps pour (a) la contrainte principale en compression avec (b) la zone critique associée ; (c) la contrainte de cisaillement maximal avec (d) la zone critique associée.

tiques. Elle correspond ici à une surface de rayon environ égal à $3.5 \mu\text{m}$.

550 ps après le dépôt d'énergie, les probabilités de fracture maximales sont situées au niveau des régions critiques présentées sur les Figs. 2.26(b) et (d), à savoir sur l'axe x, là où les ondes de compression se sont accumulées et sur l'axe y, là où le cisaillement est maximal à cause de l'étirement des cavités. Pour la compression, la probabilité de fracture s'élève à plus de 90 %, tandis que pour le cisaillement les probabilités de fractures sont de plus de 32%. Ainsi, des directions privilégiées de fractures sont attendues, notamment dans les régions de fort cisaillement, telles qu'observées expérimentalement [33].

Ainsi, en changeant seulement un paramètre, ici le délai entre divers dépôts d'énergie, les interactions entre les différentes cavités générées peuvent être contrôlées et paramétrées de sorte à obtenir les structures ou les processus désirés. Ces résultats numériques sont en bon accord avec les observations expérimentales [33,96] qui montrent les mêmes tendances, à savoir, la non apparition de fractures lorsque les cavités générées sont trop éloignées [96],

Paramètres	Valeurs
Surface caractéristique S_0	$100 \mu m^2$
Surface d'application S	$24 \mu m^2$
Contrainte d'activation σ_0 en compression	10 GPa
Contrainte d'activation σ_0 en cisaillement	4 GPa
Module de Weibull m	7

TABLEAU 2.8 – Tableau des paramètres utilisés dans la loi de Weibull appliquée au cas de la formation successive de multiple cavités voisines.

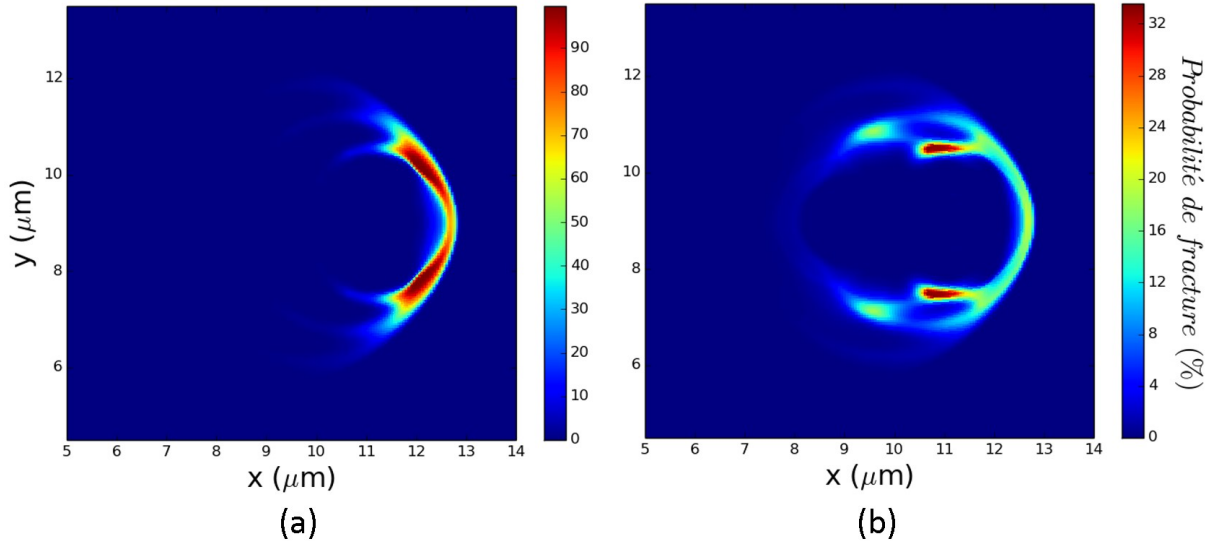


FIGURE 2.27 – Carte 2D des probabilités de fracture du matériau (a) en compression et (b) en cisaillement à 550 ps.

puis l'élongation des cavité générées lorsque celles-ci sont plus proches [33]. Enfin, les observations expérimentales ont bien montré des directions privilégiées des fractures [33] suivant la dynamique du dépôt d'énergie, tel que prédit par les simulations thermo-élasto-plastique.

Chapitre 3

Simulations de la structuration de la silice fondue par un faisceau de Bessel-Gauss femtoseconde

*« Tu sais, moi et les
probabilités... »*

Han Solo

Sommaire

3.1	État de l'art expérimental et théorique de l'interaction de faisceaux de Bessel-Gauss avec les matériaux	91
3.2	Simulations du dépôt d'énergie induit par un faisceau de Bessel-Gauss dans la silice	94
3.2.1	Le code ARCTIC	94
3.2.2	Simulations de l'interaction d'une impulsion de 150 fs avec la silice	96
3.2.3	Simulations de l'interaction d'une impulsion de 300 fs avec la silice	102
3.3	Simulations Thermo-Élasto-Plastique de la déformation d'un volume de silice par un faisceau de Bessel-Gauss	105
3.3.1	Etablissement des champs de températures initiaux	106
3.3.2	Cas 2D de la formation de structure dans la silice par une impulsion de 150 fs	109
3.3.3	Cas 2D de la formation de structure dans la silice par une impulsion de 300 fs	115

Les faisceaux de type Gaussien trouvent de nombreuses applications et offrent un très bon contrôle dans la fabrication de nanostructures telles que les cavités. Cependant, les manipulations de leur forme, afin d'augmenter leur rapport d'aspect, sont difficiles. Bien que des méthodes, telle que la filamentation [108], permettent d'augmenter considérablement la longueur du dépôt du faisceau laser, celui-ci devient rapidement instable avec des pertes d'uniformité, limitant ainsi les possibilités de micro-structuration. En 1987, Durnin prédit d'abord théoriquement l'existence d'ondes non-diffractantes [109]. Les faisceaux de Bessel sont des solutions de l'équation d'onde paraxiale avec un profil de propagation invariant [12]. Cependant, cette propriété n'est assurée, sur une distance infinie, que pour des énergies infinies, ce qui en réalité est impossible. En pratique, la génération de faisceaux de Bessel-Gauss d'ordre zéro et d'énergie finie, est une bonne approximation. Durnin *et al.* proposèrent expérimentalement une méthode de génération de tels faisceaux en éclairant une fente circulaire dans le plan focale arrière d'une lentille [110]. Par la suite, de nombreuses méthodes ont été élaborées afin de produire des faisceaux de Bessel-Gauss. Ceux-ci peuvent être générés notamment par hologrammes [111–113] ou par SLM (Spatial Light Modulator) [12, 114–116] mais la méthode la plus standard reste cependant l'utilisation d'un axicon qui peut être de différentes formes et tailles [117–121]. Les faisceaux de Bessel-Gauss ont rapidement trouvé de nombreuses applications dans des domaines variés, notamment dans la fabrication de guides d'onde (photonique) et de micro-canaux (nano-fluidique et perçage), dans l'ablation par laser et dans la découpe de verres [12, 106, 114, 122–128]. Les avantages principaux des faisceaux de Bessel-Gauss sont, entre autres, leur rapport d'aspect très important, leur relative stabilité, la relative uniformité des dépôts induits et la réduction des pertes d'énergie lors de leur propagation dans la matière [129]. La compréhension de leur interaction avec les matériaux étant donc très importante dans de nombreux domaines, des simulations du dépôt d'énergie couplées à la simulation thermo-élasto-plastique sont effectuées dans ce chapitre afin de comprendre et décrire la structuration de la silice par un faisceau de Bessel-Gauss femtoseconde. Dans un premier temps, un état de l'art expérimental et théorique de la génération et de l'interaction des faisceaux de Bessel-Gauss dans la silice est fait. Puis, le code de simulation ARCTIC, permettant de calculer les dépôt d'énergie via la résolution des équations de Maxwell couplée à la dynamique électronique, est présenté. Dans un deuxième temps, les résultats des simulations de l'interaction de faisceaux de Bessel-Gauss, pour deux durées d'impulsions et des intensités initiales variables, sont montrés et décrits. Les évolutions des profils de densité électronique et des densités d'énergie des électrons, présentant des comportements particuliers, sont analysées d'abord dans le cas d'impulsions de 150 fs. Puis, celles-ci sont ensuite comparées au cas de l'interaction d'impulsions de durée 300 fs. Dans une dernière partie, les dépôts d'énergie calculés par la simulation ARCTIC sont introduits dans la simulation thermo-élasto-plastique afin d'évaluer les contraintes et les déformations induites dans le matériau. Tout d'abord, les champs de températures initiaux sont établis dans cinq cas différents de durées d'impulsion et d'intensités variables puis sont discutés quant aux tendances attendues. Enfin, les résultats des simulations thermo-élasto-plastiques sont présentés et décrits, puis comparés aux observations expérimentales.

3.1 État de l'art expérimental et théorique de l'interaction de faisceaux de Bessel-Gauss avec les matériaux

Comme expliqué précédemment, la manière la plus classique de générer un faisceau de Bessel-Gauss est d'utiliser un axicon de forme conique tel que présenté sur la Fig. 3.1. Les rayons du faisceau Gaussien illuminant l'axicon vont, de par l'épaisseur variable

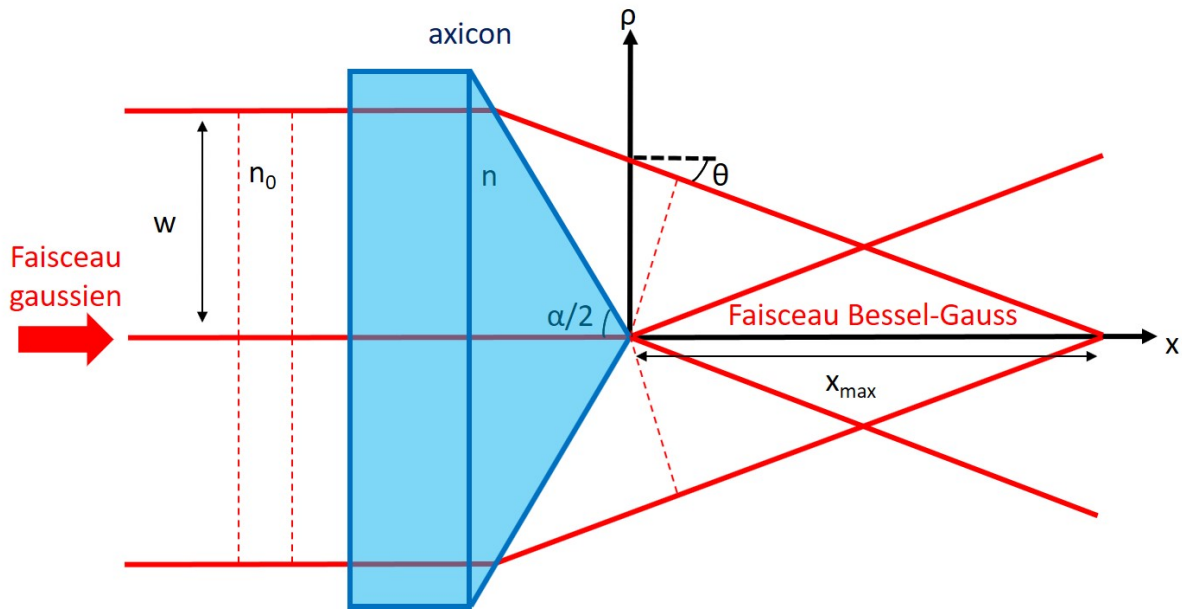


FIGURE 3.1 – Schéma de la génération d'un faisceau de Bessel-Gauss en illuminant un axicon de forme conique par un faisceau Gaussien. w , n_0 , n , α et $x_{\max}$ sont, respectivement, le rayon du faisceau Gaussien, l'indice de l'air et de l'axicon, l'angle au sommet de l'axicon et la distance caractéristique maximale longitudinale du faisceau de Bessel.

de ce dernier, subir différentes déviations convergentes entraînant ainsi des interférences d'ondes planes dont les vecteurs d'onde sont contenus dans un cône d'angle $\theta = (n-1)\frac{\pi-\alpha}{2}$ (notations définies sur la Fig. 3.1). La figure d'interférence induite forme alors un faisceau de Bessel-Gauss constitué d'un faisceau central de haute intensité entouré d'anneaux lumineux de moindre intensité comme observé sur la Fig. 3.2 [121]. La particularité des faisceaux de Bessel-Gauss est la distance très importante sur laquelle ils sont capables de se propager le long de leur axe de propagation (bien plus grande que la zone de Rayleigh des faisceaux Gaussien), sans subir de diffraction et tout en conservant des dimensions transverses d'un ordre de grandeur plus petites. Cette géométrie confère à ce type de faisceau des rapports d'aspect très importants, supérieurs à 10 [12, 114, 116, 121, 130]. Sur la Fig. 3.2 [121] par exemple, tandis que la longueur du faisceau de Bessel-Gauss est de l'ordre de $60 \mu\text{m}$, la largeur du faisceau central n'excède pas $1 \mu\text{m}$, exhibant ainsi un rapport d'aspect d'environ 60 (Fig. 3.2(b, c et d)). Un tel faisceau a été obtenu en illuminant un axicon par un faisceau Gaussien de largeur 5 mm puis en imageant le Bessel-Gauss généré au travers d'un système de deux lentilles tel que présenté sur la figure (Fig. 3.2(a)).

En outre, la propriété non-diffractante des faisceaux de Bessel-Gauss repose sur un phénomène d'auto-reconstruction particulier [131–135], selon lequel l'amplitude et la phase

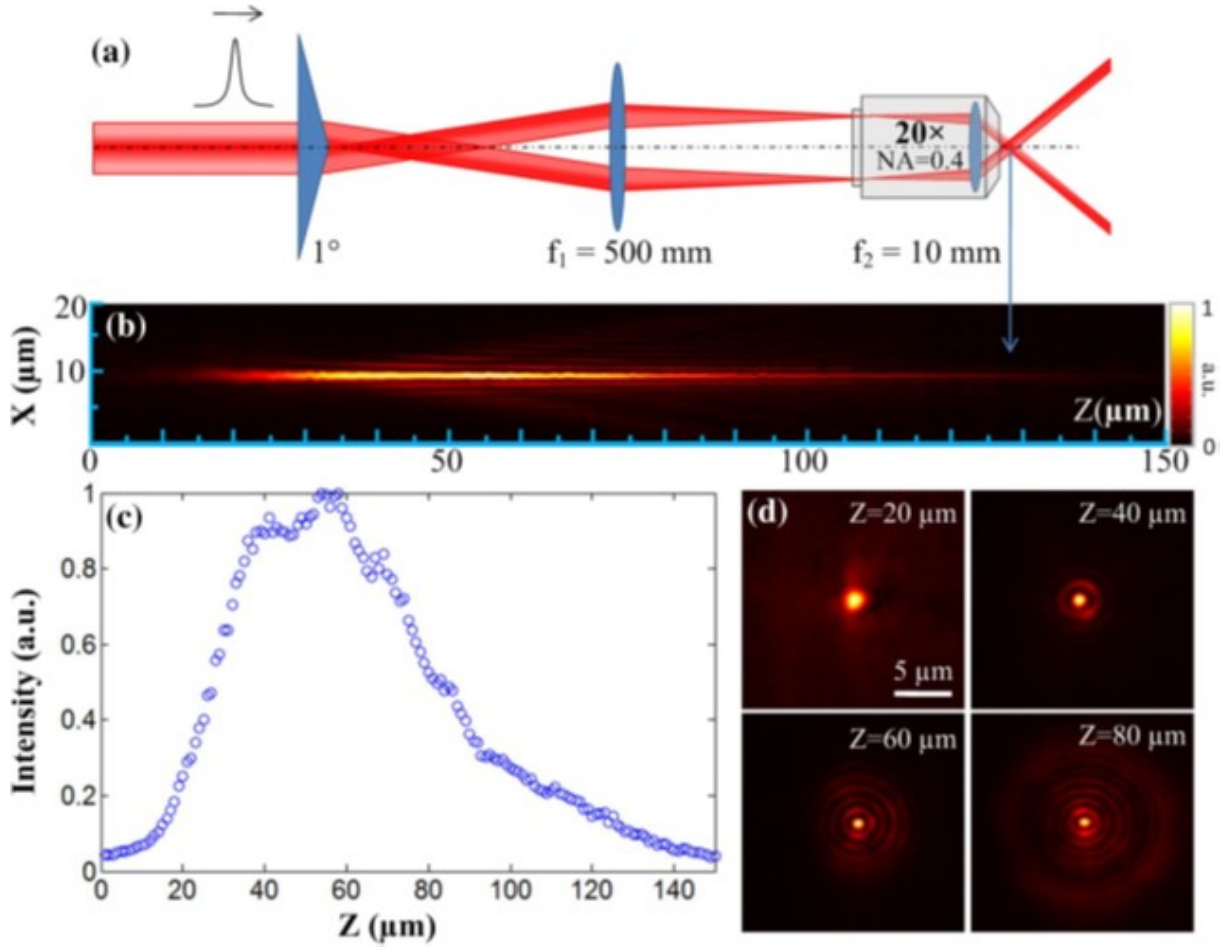


FIGURE 3.2 – Caractérisation d'un faisceau de Bessel-Gauss dans l'air. (a) Schéma du montage expérimental pour générer un tel faisceau. (b) Image de l'intensité reconstruite du faisceau. (c) Profil d'intensité le long de l'axe optique. (d) Images de l'intensité reconstruite du faisceau sur différentes sections transverses le long de l'axe optique. [121]

du faisceau se reconstituent après avoir rencontré un obstacle dont les dimensions n'excèdent pas les dimensions caractéristiques du faisceau (phénomène limité). Ainsi, lors de l'interaction d'un tel faisceau avec la matière et à l'inverse des impulsions de forme gaussienne, cette propriété leur confère une bonne stabilité. Lors de leur propagation non-linéaire dans les diélectriques, ils exhibent, notamment, une résistance à l'effet Kerr et aux pertes d'énergie non-linéaires [129]. Cependant cette stabilité dépend de trois paramètres : l'angle conique θ , l'énergie et la durée d'impulsion du laser [12, 123]. Pour des angles coniques supérieurs à 10° , correspondant à une forte focalisation produisant des faisceaux de Bessel-Gauss de petites dimensions, ceux-ci exhibent une bonne stabilité permettant la génération avec une seule impulsion d'une structure longue d'une centaine de μm et large de plusieurs centaines de nm. Pour des angles coniques inférieurs à 10° , correspondant à des faisceaux de Bessel-Gauss faiblement focalisés avec des dimensions plus importantes, ceux-ci semblent instables et inefficaces pour transférer correctement l'énergie laser dans le matériau [123, 129]. Cependant, en sélectionnant correctement la durée d'impulsion et l'énergie du laser, il a été démontré que même pour des angles coniques relativement petits, la stabilité du faisceau pouvait être augmentée [123]. Ainsi, en fonction de ces trois paramètres, les faisceaux de Bessel-Gauss permettent de structurer

les matériaux en volume avec des dimensions variées.

Pour des énergies laser de l'ordre du μJ à 800 nm et des durées d'impulsion de l'ordre de 100 fs à 1 ps, seule une variation d'indice ($\delta n \geq 0$) est observée après l'interaction d'un faisceau de Bessel-Gauss (longueur de l'ordre de 30 à 100 μm et largeur submicrométrique) avec la silice, lorsque celui-ci est entièrement contenu dans le volume du matériau. Les observations montrent qu'un canal se forme en volume lorsque celui-ci exhibe une ouverture en surface, pour les mêmes énergies et durée d'impulsion [12, 114, 116, 123], dû à l'éjection de la matière en dehors du volume.

Dans le cas du saphir, en revanche, des canaux se forment, dans des conditions d'illumination similaires, lorsque le faisceau de Bessel-Gauss est entièrement contenu en volume [116] comme montré sur la Fig. 3.3. Le seuil de dommage a notamment été évalué

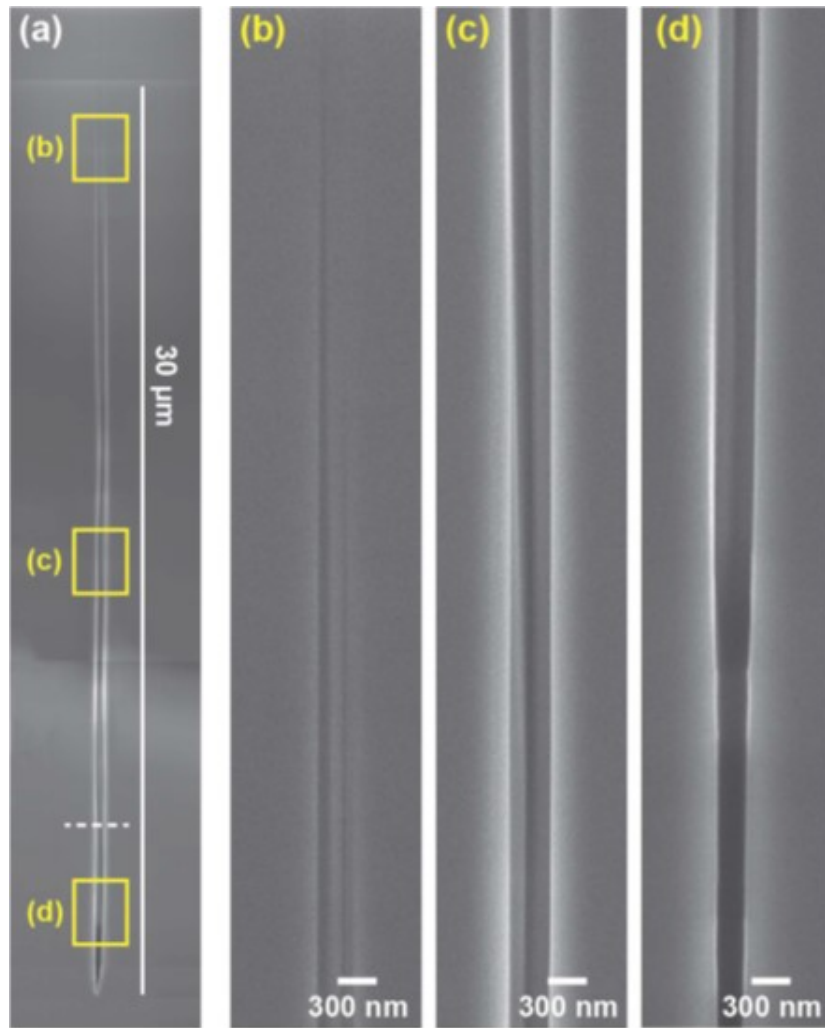


FIGURE 3.3 – (a) Image SEM d'un micro-canal dans le saphir créé par une unique impulsion femtoseconde de 2 μJ . (b-d) Différents zooms du micro-canal sur les régions indiquées dans (a) [116].

autour d'une énergie laser de 1,2 μJ avec une durée d'impulsion de 140 fs. Des canaux longs d'environ 30 μm et larges d'environ 300 nm (rapport d'aspect de 100) sont observés (Fig. 3.3 (a)). Un vide de matière est créé au centre du canal (Fig. 3.3 (c)) tandis qu'une réduction du diamètre à chaque extrémité du canal est observée (Fig. 3.3 (b et d)). Une densification du matériau autour du canal est estimée à environ $1,15\rho_0$. Pour des énergies

supérieures à $2,4 \mu\text{J}$, la formation de fractures autour du canal, longues de $1 \mu\text{m}$, sont observées. De plus, une ellipticité de la forme transverse du canal est également remarquable. Celle-ci est certainement due aux variations des propriétés physiques suivant les directions cristallographiques du saphir, déjà évoquées dans les Sections 2.3.3 et 2.4.

Il est à noter que dans le cas de la silice, les densités d'énergie absorbées évaluées sont de l'ordre du kJ/cm^3 [123, 130], tandis que dans le saphir celles-ci sont estimées entre plusieurs dizaines et centaine de kJ/cm^3 (du même ordre de grandeur que dans le cas des micro-explosions) [116]. Un effort est donc tout d'abord porté dans l'évaluation du dépôt d'énergie dans la silice par la résolution des équations de Maxwell, couplées à un modèle de dynamique électronique. Puis le dépôt obtenu est introduit dans la simulation thermo-élasto-plastique, afin de comprendre les phénomènes observés lors des expériences.

3.2 Simulations du dépôt d'énergie induit par un faisceau de Bessel-Gauss dans la silice

Dans cette section, la simulation de l'interaction d'un faisceau de Bessel-Gauss focalisé à l'intérieur d'un volume de silice est présentée. Celle-ci nous donne accès, via la résolution des équations de Maxwell et en tenant compte de l'ionisation du matériau, à la dynamique électronique, l'évolution du champ électrique et à l'énergie laser absorbée dans le matériau. Ainsi, l'évolution de la densité électronique en bande de conduction est discutée dans un premier temps en fonction de la durée d'impulsion et des différentes intensités laser. Puis, l'évolution des profils spatiaux d'énergie des électrons sera examinée dans un deuxième temps.

Le volume de silice considéré pour la simulation a une longueur de $30 \mu\text{m}$ (axe x) et des dimensions transverses de $25 \mu\text{m}$ (axes y et z). La valeur en énergie de la bande interdite de la silice est de 9 eV [52–55]. Le laser, de longueur d'onde 800 nm , est gaussien en entrée de boîte. Sa largeur (FWHM) est égale à $8 \mu\text{m}$, de sorte qu'avec un axicon d'angle $\alpha = 76^\circ$ (voir Fig. 3.4) le faisceau de Bessel-Gauss généré dans la silice ait une longueur $x_{\text{max}} = w/\tan(\theta) = 14 \mu\text{m}$ et un rayon (premier zéro de la fonction Bessel) du faisceau central de $0,7 \mu\text{m}$. Bien que la longueur du faisceau de Bessel-Gauss soit plus courte que dans les expériences, les intensités considérées sont adaptées afin de retrouver des comportements supposés similaires. Le choix de fixer la géométrie pour cette étude a été fait afin de ne faire varier que les deux autres paramètres importants (énergie et durée d'impulsion). L'angle conique θ (voir Fig. 3.4) est donc fixé à 26° (forte focalisation) [116] tandis que les intensités en entrée varient de 2 à $6 \text{ TW}/\text{cm}^2$ pour deux durées d'impulsion différentes : 150 et 300 fs .

3.2.1 Le code ARCTIC

Le code ARCTIC a été développé au laboratoire du CELIA à partir du code PIC OCEAN. Il modélise l'interaction laser-solide ou laser-gaz dans une géométrie 1D, 2D et 3D. Comme présenté dans la Sec. 1.1, il résout les équations de Maxwell pour les champs électromagnétiques couplées aux équations décrivant la réponse non-linéaire de la matière (Eqs. (1.1), (1.2), (1.3) et (1.4)). Les équations de Maxwell, tenant compte du déplacement électrique et du champ magnétique, sont résolues selon le schéma de différences finies dans le domaine temporel (*FDTD : Finite Difference Time Domain*) de Yee reposant sur une méthode *leapfrog* de résolution numérique des équations différentielles. Dans ARCTIC, la

matière irradiée est soumise à des processus de photo-ionisation, de collisions élastiques et de recombinaison. Ces processus sont décrits via l'évolution temporelle de la densité d'électrons de conduction. Cette dynamique électronique est modélisée par les équations d'Euler (Eqs. (1.14), (1.15) et (1.16)) qui fournit une réponse fluide du gaz d'électrons soumis à l'action du champ électrique.

Dans le code ARCTIC, le faisceau de Bessel-Gauss est généré dans le matériau par l'introduction d'un champ de la forme :

$$\mathbf{E}(0, y, z, t) = \mathbf{E}_0 e^{-0.5 \ln 2 \left[\frac{t - T_{max}}{\tau_L} \right]^2} e^{-0.5 \ln 2 \left[\left(\frac{y - y_0}{w_{fwhm}} \right)^2 + \left(\frac{z - z_0}{w_{fwhm}} \right)^2 \right]} e^{-i\delta(r)} \quad (3.1)$$

où $\delta(r) = k \sin(\theta) r$ avec k le nombre d'onde et $r = \sqrt{(y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}$. y_0 et z_0 sont les coordonnées de focalisation de l'onde sur le plan Oyz.

Analytiquement, la distribution d'intensité d'un tel faisceau peut se calculer via la relation [119] :

$$I(\rho, x, t) = \frac{4P_L k \sin(\theta)}{w} \frac{x}{x_{max}} e^{-2 \frac{x^2}{x_{max}^2}} J_0^2(k \rho \sin(\theta)) e^{-2 \frac{\rho^2}{w^2}} e^{-2 \ln 2 \left(\frac{t - T_{max}}{\tau_L} \right)^2} \quad (3.2)$$

où $P_L = I_0 \frac{\pi w^2}{4 \ln 2}$ est la puissance du laser, $w = \frac{w_{fwhm}}{\sqrt{2 \ln 2}}$ est la largeur du faisceau, $\rho = \sqrt{y^2 + z^2}$ est la coordonnée radiale, J_0 est la fonction de Bessel d'ordre zéro et T_{max} correspond au temps où l'impulsion gaussienne atteint son maximum d'intensité. La fluence est liée à l'intensité par $F(\rho, x, t) = I(\rho, x, t) \tau_L \sqrt{\frac{\pi}{4 \ln 2}}$.

Dans le cas d'une impulsion gaussienne de 150 fs à 800 nm avec une intensité initiale I_0 de 2.5 TW/cm² et une largeur à mi-hauteur w_{fwhm} de 8 μm , les profils de fluence calculés par la simulation et analytiquement sont comparés sur la Fig. 3.4. Il est à noter que

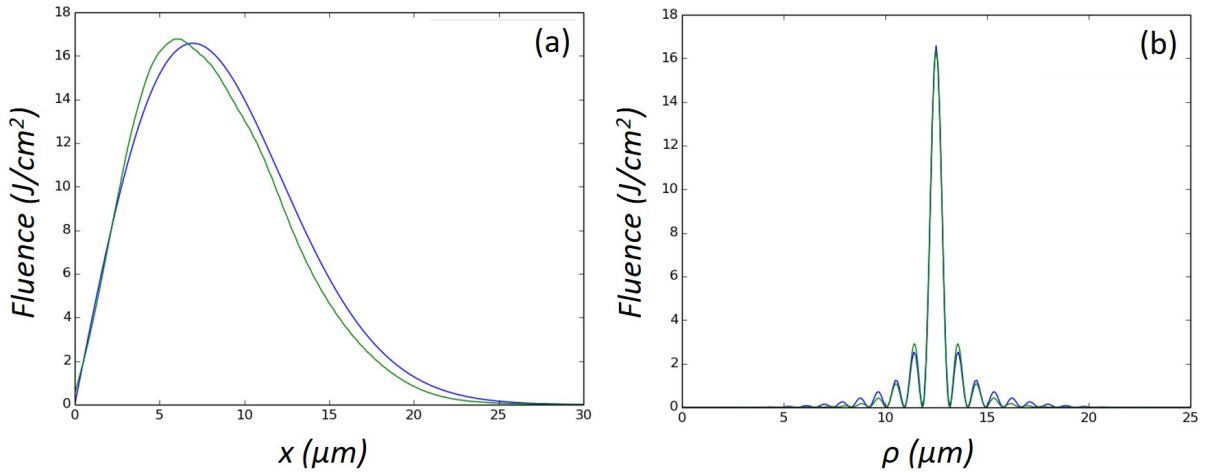


FIGURE 3.4 – Profils (a) longitudinal et (b) transverse en fluence d'un faisceau de Bessel-Gauss généré dans le vide par une impulsion gaussienne de 150 fs à 800 nm avec une intensité initiale de 2.5 TW/cm² et une largeur à mi-hauteur de 8 μm . Les courbes bleues ont été calculées analytiquement tandis que les courbes vertes ont été prédites par la simulation ARCTIC.

les profils calculés (dans le vide) par la simulation ARCTIC sont en bon accord avec les profils analytiques, bien qu'une légère différence soit visible. Celle-ci provient du fait qu'un axicon de taille infinie est considéré analytiquement, tandis que dans la simulation, l'onde

gaussienne initiale est coupée au bord du domaine. Ce dernier est donc choisi relativement grand devant la taille du faisceau gaussien initial afin de pouvoir supposer négligeables les effets de cette différence sur les résultats présentés ci-dessous.

3.2.2 Simulations de l'interaction d'une impulsion de 150 fs avec la silice

Cas	I_L (TW/cm ²)
1	2.5
2	3
3	4
4	6

TABLEAU 3.1 – Tableau résumant les paramètres des différents cas avec des durées d'impulsion de 150 fs étudiés dans le cadre de la simulation de l'interaction laser-silice.

L'évolution du profil de densité électronique produite dans le matériau, le long de l'axe central de propagation du faisceau de Bessel, est dans un premier temps analysée dans le cas 1 (voir Tab. 3.1) et présentée sur la Fig. 3.5. Il est à noter que les cas de moindre intensité ne sont pas montrés car les densités atteintes n'atteignent pas la densité critique et ne sont donc pas pertinents. Le domaine temporel de la simulation est de 600 fs, durant lequel l'impulsion interagit avec la silice pendant 150 fs et atteint son maximum à $T_{max} = 300$ fs. Aux alentours de 250 fs (Fig. 3.5(a)) jusqu'à environ 350 fs (Fig. 3.5(c)), le matériau est photoionisés et la densité d'électrons en bande de conduction augmente progressivement jusqu'à une valeur proche de la densité critique $n_e/n_c = 0.8$. Puis, à partir de 350 fs, les électrons sont soumis à de l'ionisation par impact. Les électrons en bande de conduction ont continué d'absorber des photons et ont atteint une énergie suffisante pour en transférer une partie par impact aux électrons de valence et les mener à leur tour en bande de conduction. Un phénomène d'avalanche électronique se met en place au maximum d'intensité du faisceau de Bessel-Gauss entre $x = 6$ et $x = 7$ μm , augmentant fortement la densité électronique dont la valeur avoisine deux fois la densité critique à 400fs (Fig. 3.5(d)) jusqu'à environ huit fois la densité critique à 500 fs (Fig. 3.5(f)). À ce temps, un pic et un plateau commencent à se distinguer dans le profil de densité d'électron en bande de conduction.

Il est à noter que des oscillations quasi périodiques, espacées en moyenne de 1.2 μm , apparaissent sur les profils de densité électronique à 350 et 400 fs (Fig. 3.5(c et d)). Leurs amplitudes croissent également avec le temps. À 350 fs (Fig. 3.5(c)), la densité électronique étant proche de la densité critique du matériau ($n_e/n_c = 0.8$), celle-ci rend localement opaque le matériau. Les rayons du faisceau sont donc, à cet endroit, légèrement réfléchis et le faisceau est diffracté. Cependant, comme évoqué plus haut (Sec. 3.1), les faisceaux de Bessel-Gauss ont un caractère non-diffractant dus à des phénomènes d'auto-reconstruction [131–135] permettant de se reformer derrière l'obstacle diffractant, à l'inverse des faisceaux gaussien par exemple. Ces effets sont caractérisés notamment par des oscillations le long de l'axe de propagation du faisceau.

Ce comportement oscillatoire particulier peut-être calculé analytiquement de manière approchée, en considérant un faisceau de Bessel-Gauss initial dont l'amplitude est perturbée par un obstacle. Si l'amplitude complexe (normalisée) du champ incident non perturbé

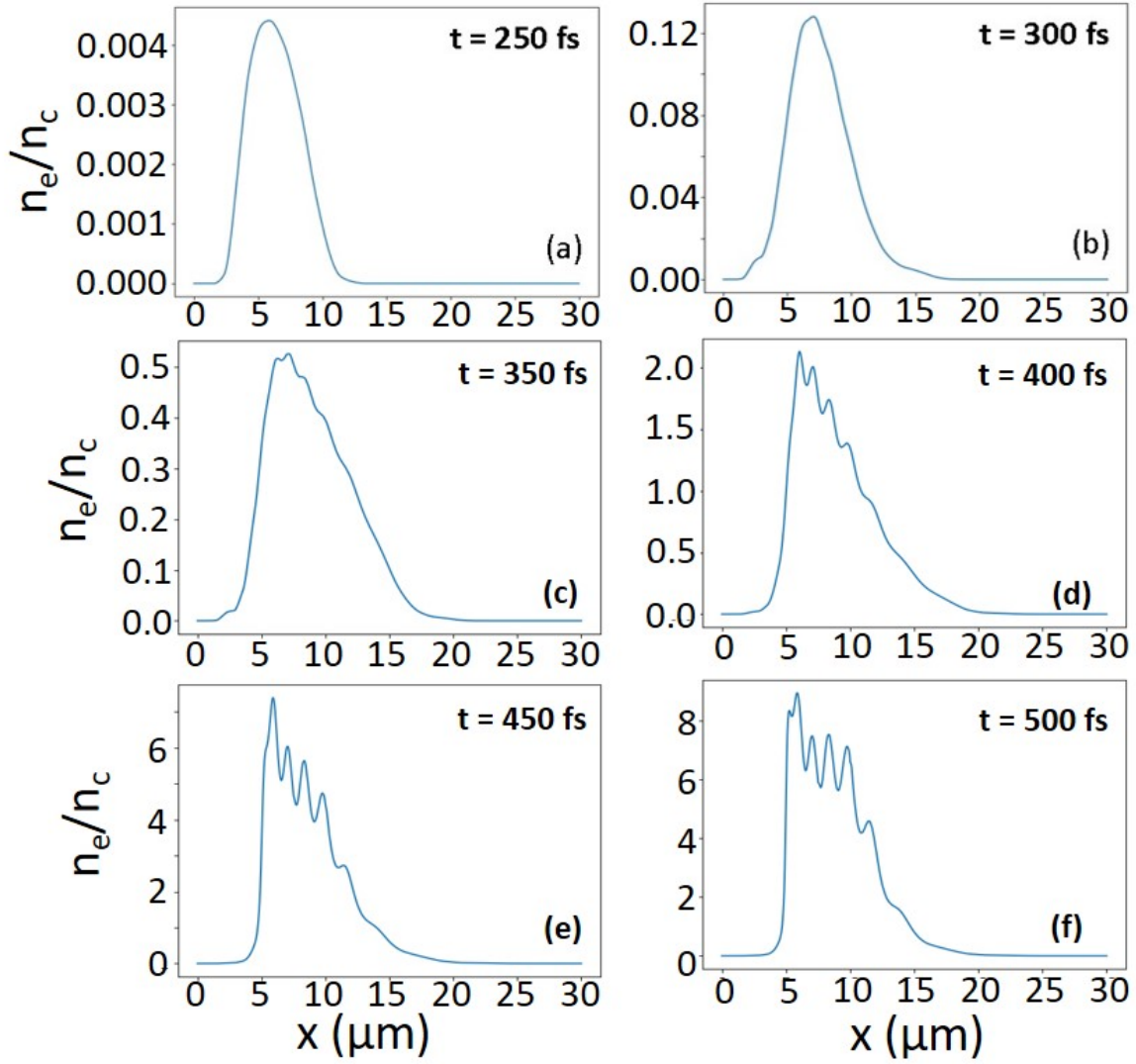


FIGURE 3.5 – Évolution du profil longitudinal de densité électronique au centre du faisceau de Bessel-Gauss dans le cas 1 (voir Tab. 3.1) aux temps : (a) 250, (b) 300, (c) 350, (d) 400, (e) 450, (f) 500 fs. La densité d'électrons de conduction atteint plusieurs fois la valeur critique après 400 fs. Des oscillations de densité sont observées à partir de 350 fs.

est notée U_I et l'obstacle est placé en $x = x_0$, le champ perturbé U_P dans la région $x \geq x_0$ peut-être obtenu en appliquant le principe de Babinet [132, 136] tel que $U_P = U_I - U_C$, où U_C correspond à l'amplitude complexe du champ diffracté au travers d'une ouverture circulaire dont la taille caractéristique correspond à celle de l'obstacle. En connaissant la forme analytique de U_I [119] et en calculant au travers de l'intégrale de diffraction de Fresnel son amplitude complexe diffractée par l'ouverture circulaire, alors le champ perturbé peut-être retrouvé. L'amplitude complexe du champ incident peut s'écrire :

$$U_I = \sqrt{\frac{x}{x_{max}}} \exp\left(-\frac{x^2}{x_{max}^2} - i\frac{\pi}{4}\right) J_0(k\rho\theta) \exp\left(-\frac{\rho^2}{w^2}\right) \exp(i\beta x) \quad (3.3)$$

Le champ diffracté au travers d'une ouverture circulaire se calcule au travers de l'intégrale de diffraction de Fresnel :

$$U_C = 2\pi \frac{1}{i\lambda_L} \int U_I(\rho', x_0) \frac{\exp(ikr)}{r} \rho' d\rho' \quad (3.4)$$

avec $r = \sqrt{(\rho')^2 + x^2}$. En appliquant le principe de Babinet [132, 136] et en considérant un obstacle placé à $x_0 = 6 \mu\text{m}$ (correspond à la position où les faisceaux deviennent perturbés dans les cas présentés) avec des dimensions caractéristiques de 200 nm à 500 nm (correspond aux tailles caractéristiques estimées des régions de densité surcritique), les profils longitudinaux oscillants des faisceaux de Bessel-Gauss perturbés (U_P normalisé) sont retrouvés (Fig. 3.6). Le champ étant perturbé par l'obstacle, l'intensité et a fortiori

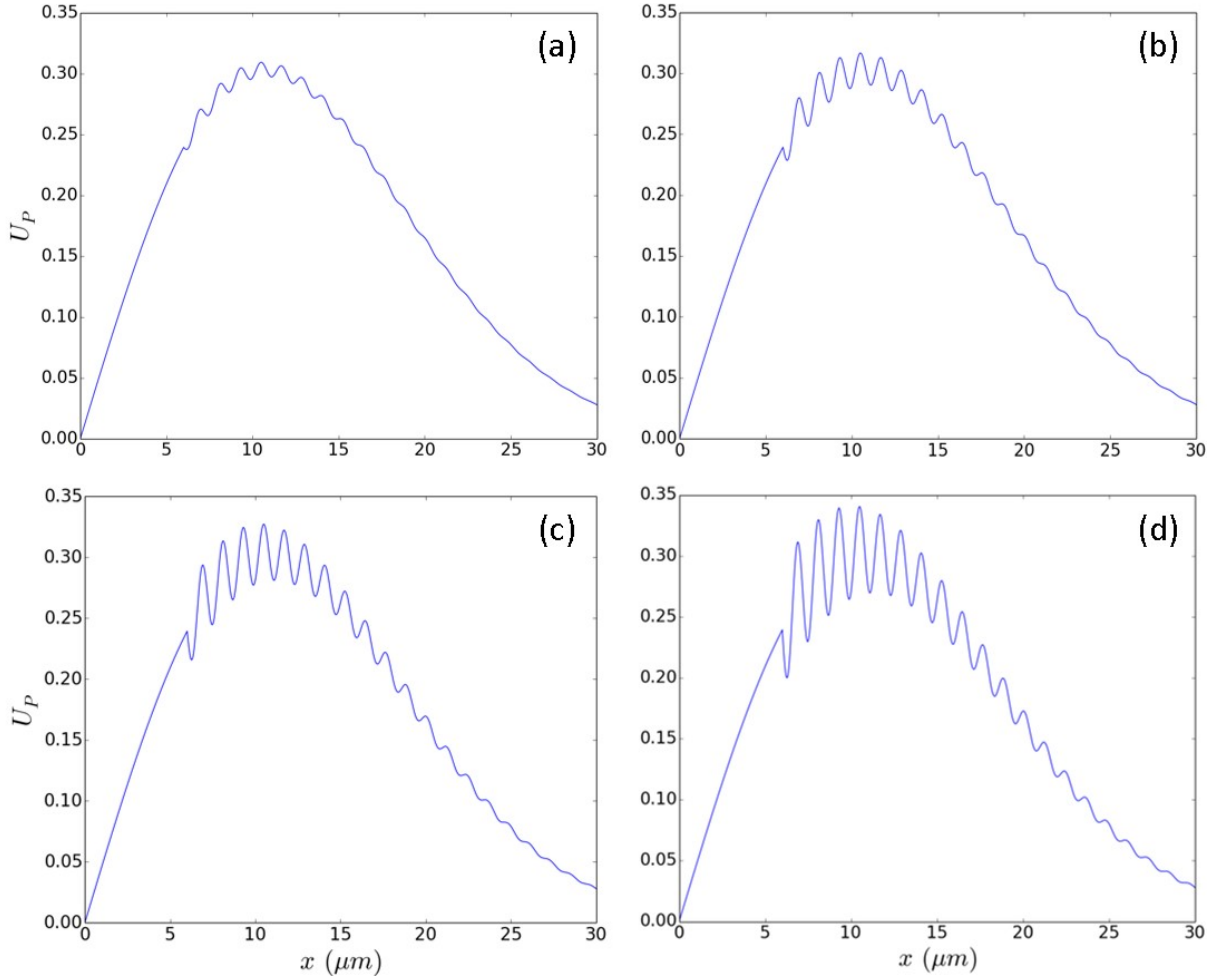


FIGURE 3.6 – Champ U_P (normalisé) d'auto-reconstruction d'un faisceau de Bessel-Gauss pour un obstacle sphérique situé à $x_0 = 6 \mu\text{m}$ et de rayon : (a) 0.2, (b) 0.3 (c) 0.4 et (d) 0.5 μm . Les oscillations sont espacées de 1.2 μm (proportionnel à la longueur d'onde) et leur amplitude augmente avec la taille de l'obstacle

la densité électronique en subissent eux aussi les conséquences. Leurs profils sont donc similaires et comme observées, les oscillations croissent avec la taille de l'obstacle, reproduisant l'augmentation de la taille de la zone de densité surcritique au cours du temps. De plus, un espacement entre chaque oscillation de 1.2 μm est retrouvé et est proportionnel à la longueur d'onde λ_L (vérifié par le calcul). Ainsi, de manière approchée, en supposant un seul obstacle, le comportement oscillatoire des profils longitudinaux des faisceaux de Bessel, dus à leurs phénomènes d'auto-reconstruction, est retrouvé.

En augmentant l'intensité du laser en entrée, correspondant aux cas 2, 3 et 4 (voir Tab. 3.1), le pic et le plateau précédemment observés à 500 fs sont plus distincts et le pic de densité électronique a atteint une valeur de saturation. Des oscillations dues aux

phénomènes d'auto-reconstruction des faisceaux de Bessel-Gauss Fig. 3.7 sont là aussi observées. En outre, dans un premier temps, la densité électronique dans le plateau aug-

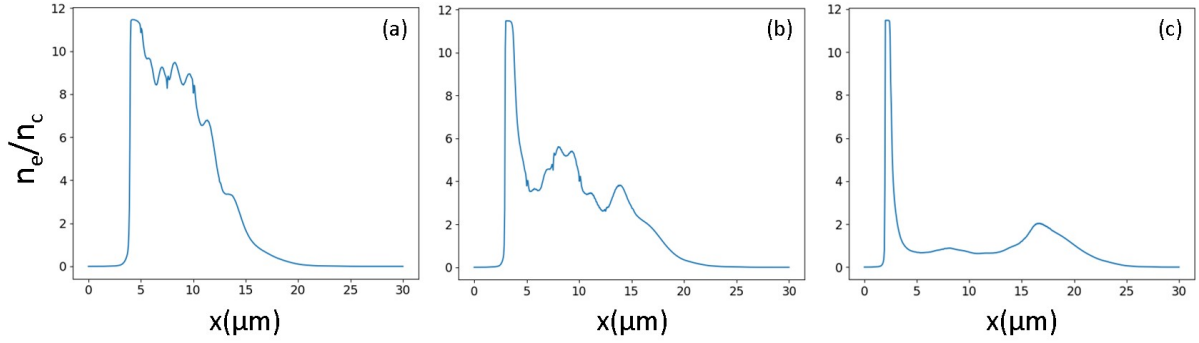


FIGURE 3.7 – Profils longitudinaux finaux de densité électronique au centre des faisceaux de Bessel-Gauss dans les cas (a) 2, (b) 3 et (c) 4 (voir Tab. 3.1). Les profils sont constitués d'un pic principal de densité et d'un plateau qui diminue lorsque l'intensité augmente.

mente avec l'intensité, jusqu'à une valeur maximale de l'ordre de $9n_c$ pour le cas 2 (Fig. 3.7(a)). Puis, pour les cas suivants, plus l'intensité en entrée est grande, plus le plateau est abaissé, passant de $9n_c$ à $4.5n_c$ pour le cas 3 (Fig. 3.7(b)) et à $1n_c$ pour le cas 4 (Fig. 3.7(c)), ce qui, au premier abord est contre intuitif. Cette évolution de la valeur de la densité électronique du plateau en fonction de l'intensité est résumée sur la Fig. 3.8.

Celle-ci montre d'abord une augmentation de la densité d'électrons de conduction dans le plateau jusqu'à une intensité de l'ordre de 3 TW/cm^2 , puis une diminution de la valeur de densité pour des intensités plus importantes. Il est à noter que son évolution a été approchée (courbe d'ajustement) par une fonction $\propto \frac{1}{I_L} \exp \left[-\frac{\ln(I_L/I_{max})^2}{2d^2} \right]$ avec I_{max} l'intensité maximale et d la déviation standard. La capacité d'ionisation de l'impulsion laser derrière le pic de densité généré diminue donc lorsque l'intensité augmente. Ce comportement est dû à la formation de plus en plus rapide et grande de la zone de densité surcritique située autour du maximum d'intensité du profil longitudinal du faisceau de Bessel-Gauss (autour de $x_{max}/2 = 7 \text{ } \mu\text{m}$). Comme expliqué plus haut, le champ laser est alors perturbé, tel que montré Fig. 3.9 par les cartes 2D de la composante du champ électrique E_y dans le cas 3 (voir Tab. 3.1). Les cartes 2D associées de densité sont également présentées. La Figure 3.9(a, b) montre tout d'abord la forme du champ non perturbé, à 250 fs, lorsque la densité électronique n'a pas encore atteint la densité critique du matériau. Cependant, à partir de 350 fs (Figs. 3.9(c, d)), celle-ci atteint plusieurs fois la densité critique en raison du phénomène d'avalanche électronique, notamment dans la région d'intensité maximale du faisceau de Bessel. Le champ est alors perturbé et diffracté par la zone de densité surcritique où la partie centrale du faisceau de Bessel-Gauss semble être coupée en deux à partir de $x \simeq 5 - 6 \text{ } \mu\text{m}$ jusqu'à se reformer un peu plus loin autour de $x \simeq 12 - 13 \text{ } \mu\text{m}$. Ceci met en évidence le caractère non-diffractant des faisceaux de Bessel-Gauss et de leur capacité d'auto-reconstruction. À 400 fs (Figs. 3.9(e, f)), la zone de reconstruction du faisceau s'est élargie d'une centaine de nanomètres et s'est allongée d'environ $5 \text{ } \mu\text{m}$ en raison de l'augmentation de la taille de la région de densité surcritique. Lorsque l'intensité du laser augmente (non montré) le résultat principal émergeant est l'élargissement et l'élongation de plus en plus importante de la zone de reconstruction du faisceau. En effet, l'augmentation de la taille de la zone de densité surcritique avec l'intensité du laser (pic de densité) augmente la taille caractéristique de l'obstacle situé sur l'axe de propagation de l'impulsion. De ce fait la quantité de rayons diffractés est plus importante et a pour

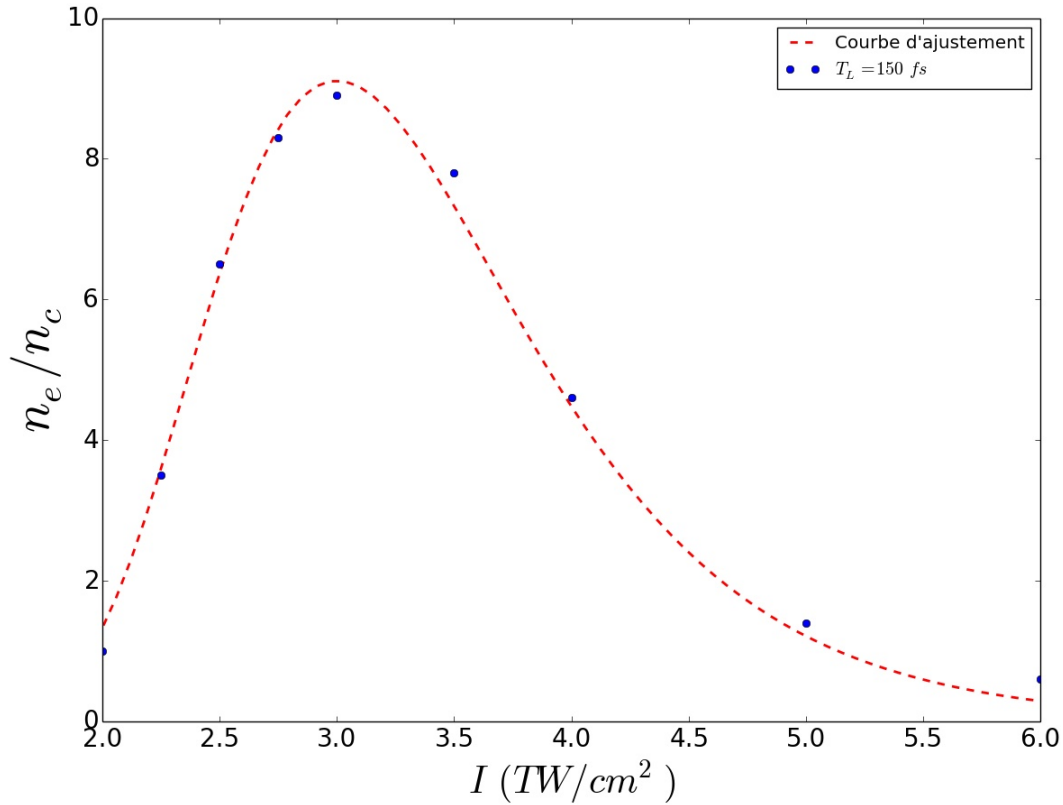


FIGURE 3.8 – Évolution de la valeur de la densité électronique du plateau en fonction de l'intensité initiale approchée par une fonction $\propto \frac{1}{I_L} \exp \left[-\frac{\ln(I_L/I_{max})^2}{2d^2} \right]$ avec I_{max} l'intensité maximale et d la déviation standard. La densité dans le plateau, observé sur les profils de densité, augmente d'abord avec l'intensité jusqu'à une valeur maximale puis diminue jusqu'à devenir quasiment nulle pour les plus hautes intensités.

effet d'élargir le faisceau, rendant leur capacité d'auto-reconstruction moins efficace et allongeant la zone de reconstruction. Ainsi, les champs reconstruits derrière l'obstacle ayant donc une amplitude moindre (de plus en plus faible en augmentant l'intensité du laser), la photoionisation du matériau sur l'axe de propagation à $x > \frac{x_{max}}{2}$ est moins importante, limitant ainsi l'ionisation par impact et donc la valeur de la densité électronique dans le plateau, expliquant ainsi la perte de densité électronique observée dans cette région en élevant l'intensité (Fig. 3.9).

Ce phénomène a des répercussions sur les profils longitudinaux finaux de densité d'énergie des électrons présentés ci-dessous sur la Fig. 3.10. Sur l'ensemble des figures, un pic d'énergie est visible, situé en amont de la zone de densité surcritique produite pendant l'interaction, c'est à dire là où l'ionisation est la plus efficace car le champ du laser n'est pas perturbé. Ce pic se déplace vers les x décroissant lorsque l'intensité augmente car celle-ci dépasse le seuil d'ionisation sur ces positions. La valeur du pic de densité d'énergie ne varie pas de manière monotone avec l'intensité. Il a une valeur environ égale à 70 kJ/cm³ dans le cas 1 (Fig. 3.10(a)) tandis que sa valeur dans le cas 2 est inférieure, d'environ 50 kJ/cm³ (Fig. 3.10(b)). Pour les cas 3 et 4 (Figs. 3.10(c et d)), en revanche, les densités d'énergie dans le pic augmentent de nouveau et sont égales, respectivement, à 100 et 140 kJ/cm³. Ce comportement est dû à l'élargissement du faisceau lorsque la zone

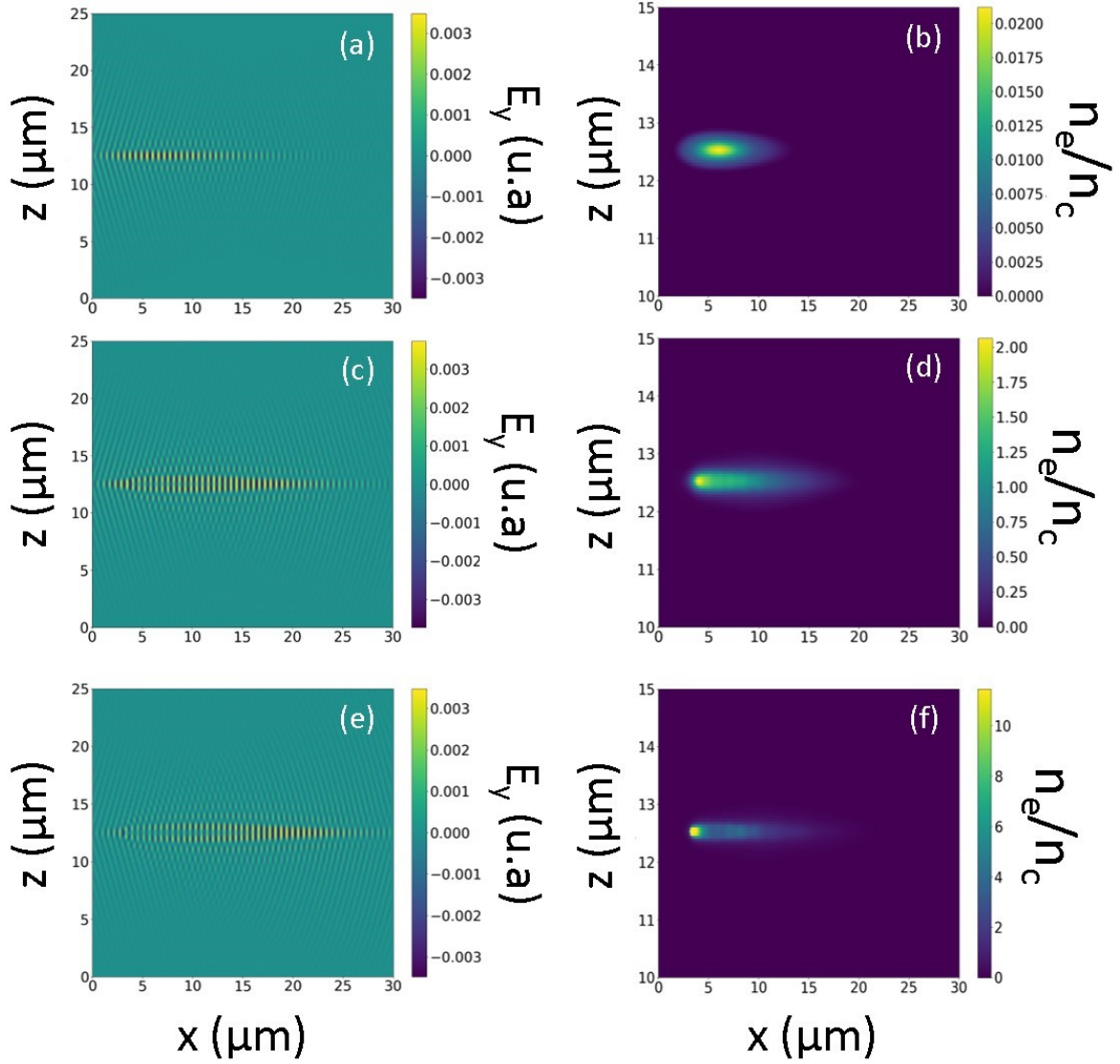


FIGURE 3.9 – Cartes 2D du champ électrique E_y et de la densité associée dans le cas 3 (voir Tab. 3.1) pour les temps : (a, b) 250, (c, d) 350 et (e, f) 400 fs. Au début de l’irradiation, à 250 fs, le champ est non perturbé. À partir de 350 fs le champ commence à être perturbé par la densité électronique surcritique. À 400 fs, le champ est fortement perturbé. Un élargissement et une élongation plus importante de la zone de reconstruction du champ électrique est visible et la densité est distribuée principalement dans une région localisée autour de l’intensité maximale du faisceau de Bessel-Gauss (pic de densité).

de densité surcritique s’élargit avec l’augmentation d’intensité en entrée. En effet, dans le cas 2, l’intensité au centre du faisceau de Bessel-Gauss (qui est plus large) diminue, transférant donc moins d’énergie aux électrons (Fig. 3.10(b)). Cependant, en augmentant encore l’intensité dans les cas 3 et 4, bien que le faisceau s’élargisse de plus en plus, l’énergie transférée redevient supérieure, induisant donc des pics plus importants (Figs. 3.10(c et d)) par rapport au cas 1. Pour les Figs. 3.10(a, b et c), un plateau est visible derrière le pic d’énergie, avec la présence des oscillations du champ en auto-reconstruction. La valeur en énergie de ce plateau diminue lorsque l’intensité s’élève. La densité d’énergie du plateau dans le cas 1 est en moyenne de 30 kJ/cm³ (Fig. 3.10(a)), tandis que pour les

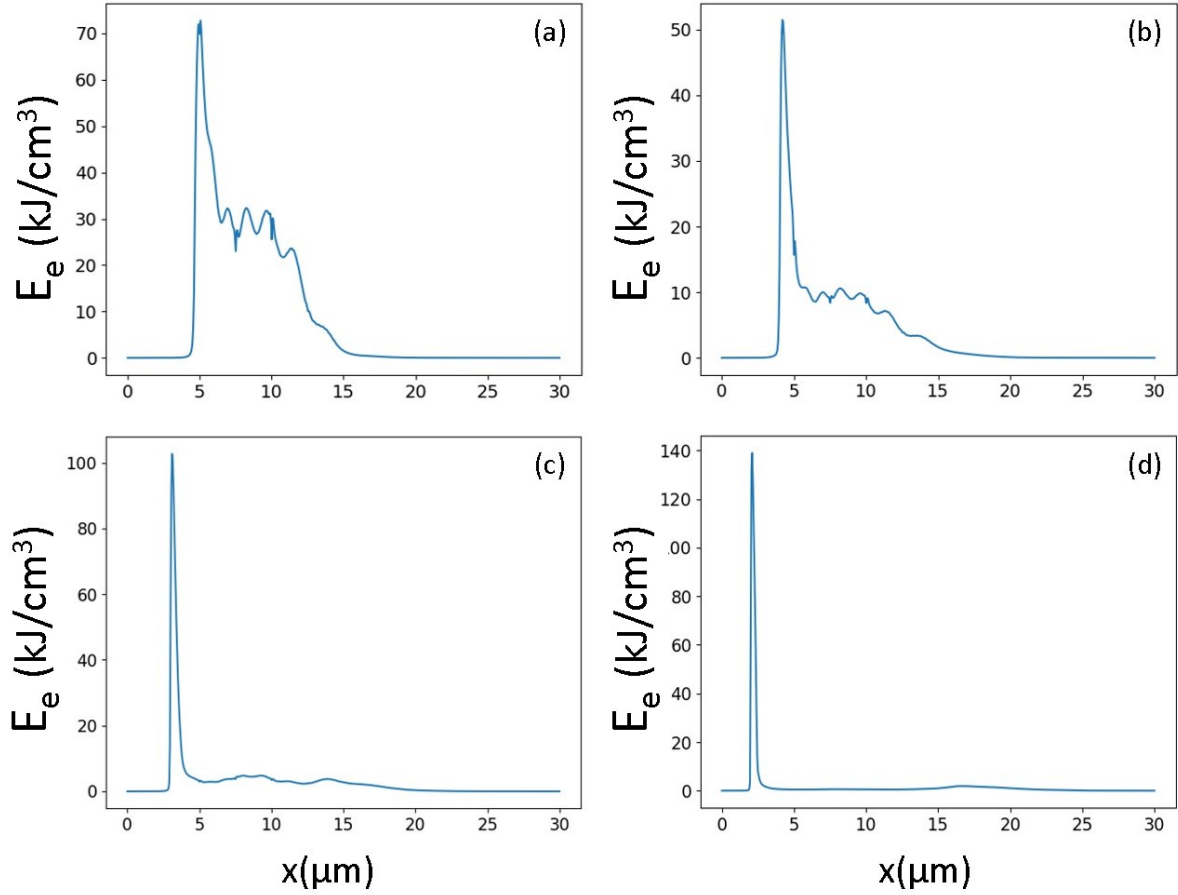


FIGURE 3.10 – Profils longitudinaux fins de la densité d’énergie des électrons en bande de conduction dans les cas (a) 1, (b) 2, (c) 3 et (d) 4 (Tab. 3.1). Les profils sont constitués d’un pic central d’énergie et d’un plateau qui, respectivement, augmente et s’atténue avec l’augmentation d’intensité. Des oscillations sont visibles dans les plateaux. Pour le cas 4, de plus haute intensité, le plateau disparaît.

cas 2 et 3 elles sont, respectivement, de 10 et 5 kJ/cm³ (Figs. 3.10(b et c)). Dans le cas 4 (Fig. 3.10(d)), le plateau a quasiment disparu, ne subsistant alors qu’un pic d’énergie très localisé. Ce phénomène est lui aussi dû à l’élargissement et l’élongation du faisceau de Bessel-Gauss en auto-reconstruction. Ce dernier ne pouvant plus ioniser efficacement le matériau, comme vu précédemment sur les profils de densités électroniques, de moins en moins d’électrons absorbent l’énergie du laser, diminuant ainsi la densité d’énergie du plateau.

3.2.3 Simulations de l’interaction d’une impulsion de 300 fs avec la silice

À présent, la durée d’impulsion du laser est doublée, passant de 150 fs à 300 fs (intensité maximale au temps $T_{max} = 600$ fs). L’évolution du profil de densité d’électrons en bande de conduction, le long de l’axe central de propagation du faisceau de Bessel, dans le cas 5 (voir Tab. 3.2) est tout d’abord montrée sur la Fig. 3.11. Comme dans le cas précédent, le matériau est dans un premier temps photoionisés et la densité d’électrons en bande de conduction augmente progressivement entre 500 fs et 660 fs (Fig. 3.11(a,b,c et d))

Cas	I_L (TW/cm ²)
5	2
6	2.5
7	4

TABEAU 3.2 – Tableau résumant les paramètres des différents cas avec des durées d’impulsion de 300 fs étudiés dans le cadre de la simulation de l’interaction laser-silice.

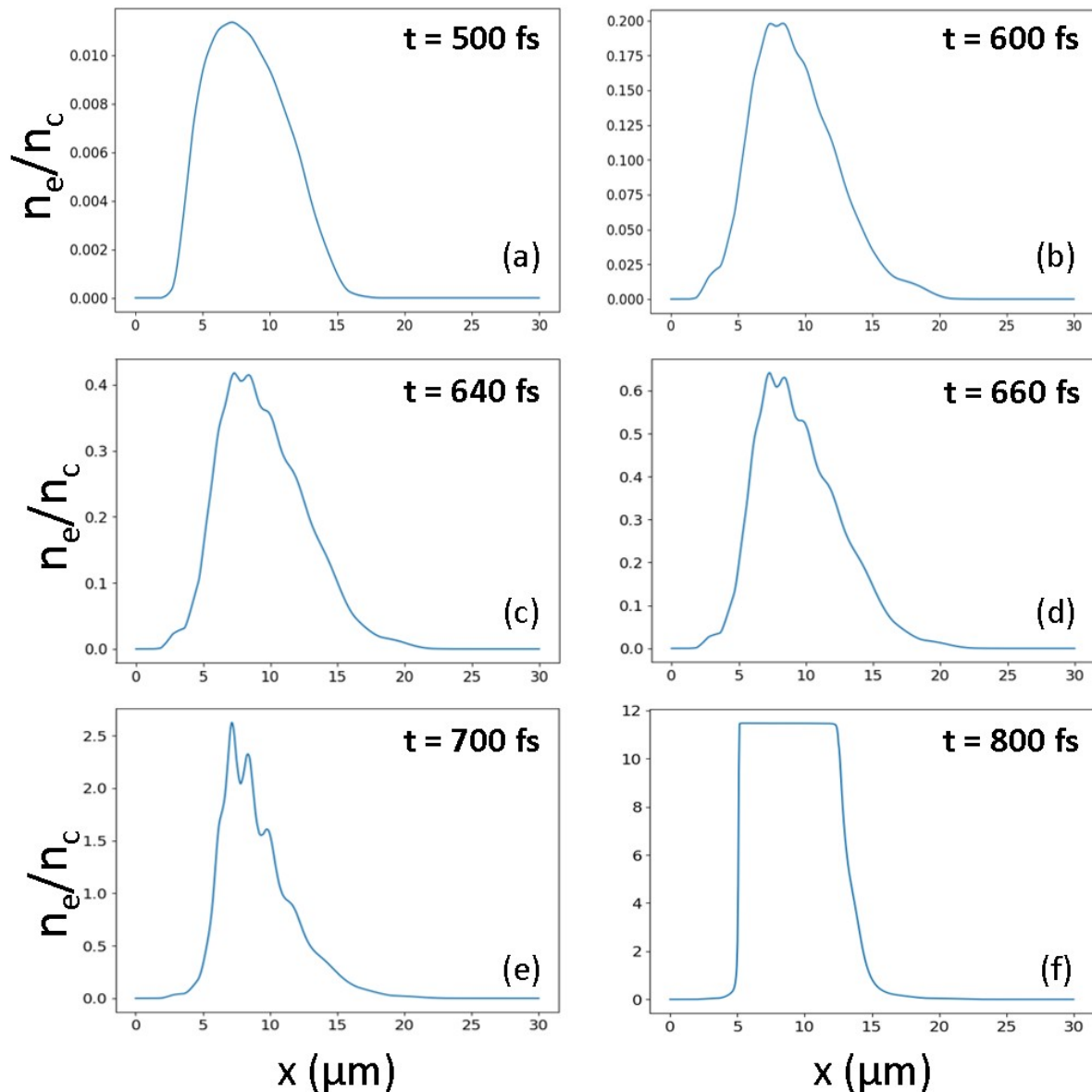


FIGURE 3.11 – Évolution temporelle du profil longitudinal de densité électronique au centre du faisceau de Bessel-Gauss dans le cas 5 (voir Tab. 3.2) aux temps : (a) 500, (b) 600, (c) 640, (d) 660, (e) 700, (f) 800 fs. La densité d’électrons de conduction atteint plusieurs fois la valeur critique, mais sur des temps plus long. Des oscillations de densité sont ici aussi observées.

jusqu’à atteindre la densité critique du matériau un peu avant 700 fs (Fig. 3.11(e)). Puis, à

partir de 700 fs, l'ionisation par impact contribue à l'ionisation du matériau et conduit de plus en plus d'électrons en bande de conduction. Un phénomène d'avalanche électronique apparaît alors tout d'abord au maximum d'intensité du faisceau de Bessel-Gauss autour de $x = 7 \mu\text{m}$, augmentant drastiquement la densité électronique dans cette région puis par la suite sur une distance de l'ordre de $10 \mu\text{m}$ sur l'axe central de propagation de l'impulsion laser. La densité électronique sature alors (plateau) sur l'ensemble du profil. Il est à noter qu'avec une impulsion plus longue, l'avalanche électronique apparaît bien plus tard, ne saturant qu'en fin d'interaction la densité électronique, pour l'intensité considérée en entrée. De plus, des oscillations sont là encore visibles dans les profils de densité électroniques à partir de 600 fs jusqu'à 700 fs (Fig. 3.11(b, c, d et e)), pour les mêmes raisons qu'évoquées précédemment (phénomènes d'auto-reconstruction).

Les profils longitudinaux finaux de densités électroniques pour les cas 6 et 7 sont montrés ci-dessous (Fig. 3.12). Dans les deux cas, bien que l'intensité a augmenté, des

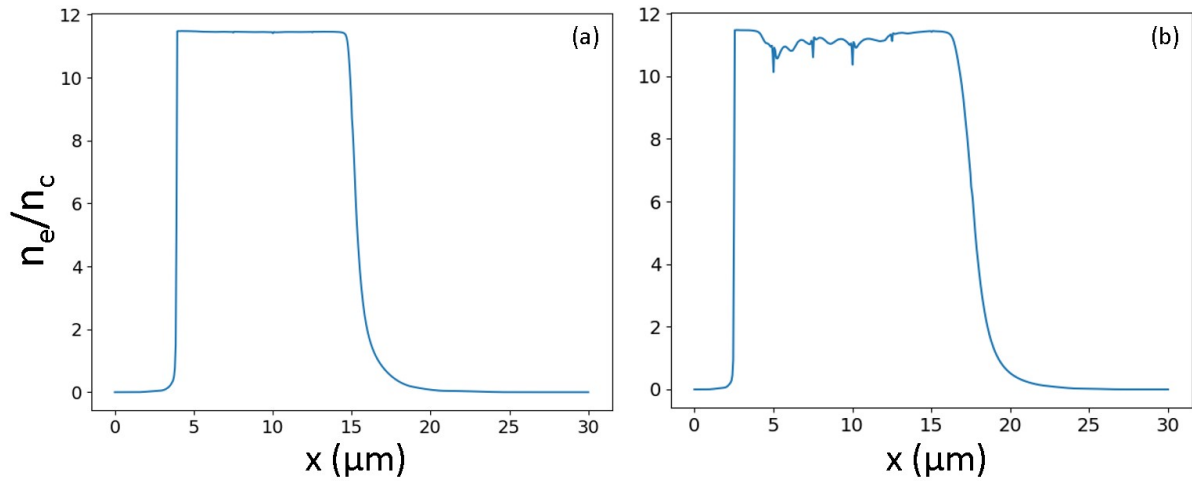


FIGURE 3.12 – Profils longitudinaux finaux de densité électronique au centre des faisceaux de Bessel-Gauss dans les cas (a) 6 et (b) 7 (voir Tab. 3.2). Les profils sont uniquement constitués d'un plateau à la valeur de saturation de la densité électronique.

plateaux à la valeur de saturation de la densité électronique en bande de conduction sont observés dans les deux profils. En effet, malgré l'élargissement des zones de densité surcritiques avec l'augmentation d'intensité, celles-ci ne sont formées que plus tard par rapport à une impulsion de 150 fs, laissant plus de temps au laser pour photoioniser et chauffer un nombre d'électrons plus important sur l'ensemble du faisceau. Ainsi, lorsque l'avalanche électronique apparaît, elle entre en jeu sur la quasi-totalité de l'axe de propagation et non pas, comme dans le cas précédent, au niveau d'une région localisée en amont de la zone surcritique. En augmentant encore l'intensité, ce comportement est cependant attendu.

Les profils longitudinaux finaux de densité d'énergie dans les cas 5, 6 et 7 sont présentés sur la Fig. 3.13. Comme dans le cas précédent d'une impulsion de 150 fs, un pic de densité d'énergie est visible en amont de la zone de densité surcritique. Cependant, il varie ici de manière monotone puisque sa valeur augmente avec l'intensité. Il est égal à 120, 200 et 230 kJ/cm^3 pour, respectivement, les cas 5, 6 et 7 (Fig. 3.13(a, b et c, respectivement)). Ce comportement différent est dû à un établissement des zones de densité surcritique et donc à l'élargissement du faisceau de Bessel-Gauss plus lent. Ce dernier peut donc transférer efficacement de l'énergie aux électrons pendant un temps plus long, limitant ainsi l'effet

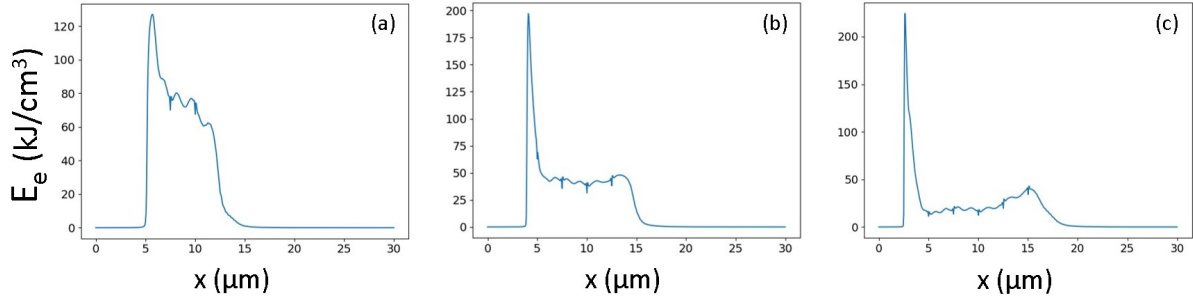


FIGURE 3.13 – Profils longitudinaux fins de la densité d’énergie des électrons en bande de conduction dans les cas (a) 5, (b) 6, et (c) 7 (Tab. 3.2). Les profils sont ici aussi constitués d’un pic central d’énergie et d’un plateau qui, respectivement, augmente et s’atténue avec l’augmentation d’intensité. Des oscillations sont visibles dans les plateau.

de diminution de l’énergie du pic pour une intensité plus élevée.

En outre, ici aussi un plateau apparaît derrière le pic d’énergie. Cependant, celui-ci est beaucoup moins marqué dans le cas 5, puisque le phénomène de saturation de la densité électronique n’arrive que tard dans l’évolution de son profil, rendant donc l’absorption d’énergie du laser par les électrons homogène. Les valeurs de densité d’énergie dans le plateau diminuent lorsque l’intensité augmente, bien que de manière moins abrupte, par rapport aux cas 1 à 4 avec une durée d’impulsion de 150 fs. La densité d’énergie varie en moyenne de 70 à 50 puis 25 kJ/cm³, respectivement, pour les cas 5, 6 et 7 (Fig. 3.13(a, b et c, respectivement)). En effet, l’élargissement de la zone de densité surcritique et donc du faisceau, diminue la quantité d’énergie transférée aux électrons dans la zone de reconstruction (plateau). Cependant, les quantités d’énergie laser absorbées sont bien plus grandes que dans le cas précédent, du fait de l’augmentation de la durée d’impulsion.

Ainsi, en augmentant la durée d’impulsion du laser, tout en gardant la même géométrie du faisceau et les mêmes intensités, il a été mis en évidence ici l’amélioration de la stabilité du faisceau de Bessel-Gauss ainsi que la possibilité d’utilisation d’énergie plus élevées afin de structurer de manière plus nette les matériaux en volume. Dans la section, suivante, les champs de températures issus des dépôts d’énergie précédemment prédits dans les différents cas sont introduits dans la simulation thermo-élasto-plastique afin de calculer les déformations induites par de tels dépôts. Des comparaisons aux observations expérimentales seront effectuées dans cette section.

3.3 Simulations Thermo-Élasto-Plastique de la déformation d’un volume de silice par un faisceau de Bessel-Gauss

Dans le cas de la déformation d’un matériau par un faisceau de Bessel-Gauss, la coupe transverse du dépôt d’énergie correspond approximativement au cas de la formation d’une cavité, telle que présentée précédemment dans la Sec. 2.3. La géométrie 2D de la simulation nous donnant accès également à la coupe le long du dépôt d’énergie, la déformation dans la section longitudinale est donc étudiée.

Les coupes longitudinales, prises au centre des dépôts d’énergie calculés en 3D par la simulation ARCTIC dans les différents cas physiques présentés précédemment, sont alors

insérées dans le code CHIC en tant que conditions initiales de la simulation thermo-élasto-plastique. Il est à noter que ces dépôts d'énergie 3D sont de forme quasi-cylindrique. Ainsi, bien que la géométrie de la simulation thermo-élasto-plastique soit 2D, les distributions de températures dans le matériau et les formes des chocs initiés seront, par abus de langage, qualifiées de cylindriques ou sphériques en fonction des cas.

Pour rappel, les temps d'interaction du laser avec le matériau, établissant le dépôt d'énergie, prennent place jusqu'à quelques picosecondes dans le cas d'une impulsion femtoseconde alors que les temps hydrodynamiques de déformation du matériau prennent place bien plus tard, sur des échelles de temps de la dizaine de picosecondes jusqu'à la nanoseconde. Ainsi, le dépôt d'énergie est considéré comme une condition initiale de la déformation du matériau sous la forme d'une carte de températures initiales du réseau. Une projection des valeurs de température dans le maillage du code ARCTIC est faite sur le maillage du code CHIC qui est pris identique.

Cas	τ_L (fs)	I_L (TW/cm ²)
1	150	2
2	150	2.5
3	150	4
4	300	2
5	300	2.5

TABLEAU 3.3 – Tableau résumant les paramètres des différents cas étudiés dans le cadre de la simulation thermo-élasto-plastique.

Cinq cas sont étudiés dans cette section et résumés dans le Tab. 3.3. Les trois premiers cas (cas 1, 2 et 3) correspondent à l'interaction d'un faisceau de Bessel-Gauss avec la silice pour des impulsions de 150 fs avec, respectivement, des intensités en entrée égales à 2, 2.5 et 4 TW/cm². Les deux derniers cas (cas 4 et 5) correspondent à l'interaction d'un faisceau de Bessel-Gauss avec la silice pour des impulsions plus longues, de 300 fs avec, respectivement des intensités en entrée égales à 2 et 2.5 TW/cm².

Comme dans le cas de la formation d'une cavité, l'absence d'une troisième dimension dans la direction z et des contraintes σ_z , τ_{xz} et τ_{yz} devrait légèrement modifier les temps des dynamiques de formation des micro-canaux et de leurs dimensions. Cependant, les comportements quant aux réponses du matériau devraient être identiques et les dimensions des structures obtenues devraient être du même ordre de grandeur.

3.3.1 Etablissement des champs de températures initiaux

Comme vu dans la Sec. 1.1.4, en supposant que l'intégralité de l'énergie laser absorbée par les électrons E_{abs} soit transférée aux ions, la température du réseau (T_L) est obtenue via l'Eq. (1.24). La capacité calorifique électronique est calculée via la relation $C_{ve} = 3/2n_e k_B$, où k_B est la constante de Boltzmann. La capacité calorifique ionique est déduite par la relation $C_{vi} = \rho c_V$ où, dans le cas de la silice, $\rho = 2200$ kg.m⁻³ et $c_V = 1000$ J.kg⁻¹.K⁻¹, dans les conditions normales de pression et de température (réseau froid).

Dans les différents cas présentés (voir Tab. 3.3), le dépôt d'énergie est réparti de manière générale selon un cylindre variant entre 10 et 12 μm le long de l'axe de propagation du laser et en moyenne large d'environ 0.2-0.3 μm . Son rayon est donc du même ordre de grandeur que le rayon de 0.13 μm des dépôts d'énergie du chapitre 2 sur la formation de

cavité. Cependant, à la différence des faisceaux gaussiens, le rapport d'aspect du dépôt d'énergie est ici cent fois plus élevé.

La Figure 3.14 présente tout d'abord les profils initiaux de températures le long de l'axe de propagation dans le cas 1, 2 et 3 correspondant à des durées d'impulsions de 150 fs. Dans le cas 1 (Fig. 3.14 (a)), les températures au centre du dépôt augmentent de 300

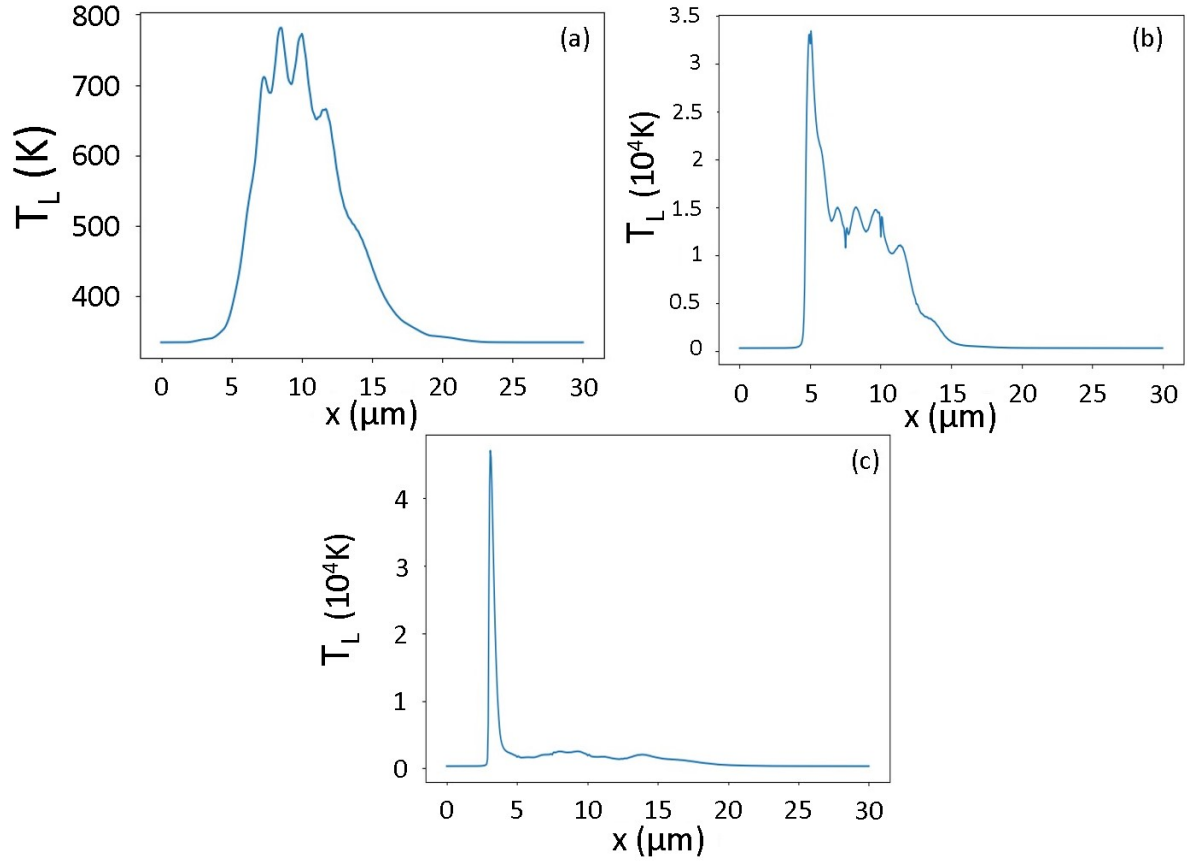


FIGURE 3.14 – Profils initiaux de température du matériau le long de l'axe de propagation du laser dans les cas (a) 1, (b) 2 et (c) 3 (voir Tab. 3.3).

K à un peu moins de 800 K de $x = 4 \mu\text{m}$ jusqu'à $x = 10 \mu\text{m}$, puis diminuent et retournent à la température ambiante du solide autour de $x = 20 \mu\text{m}$. Cela est dû aux faibles densités électroniques produites (proches mais inférieures à la valeur de densité critique du matériau) lors de l'interaction avec le laser, (cas non montré en Sec. 3.2). Peu d'électrons de conduction ont pu absorber l'énergie du laser et la transmettre au réseau (densité d'énergie absorbée inférieure à 1 kJ/cm^3), induisant donc une faible augmentation de température. Des oscillations sont également visibles au sommet du dépôt de Bessel-Gauss avec des variations d'environ 70 à 90 K en raison des phénomènes d'auto-reconstruction du faisceau pendant l'interaction (voir Sec. 3.2).

Dans le cas 2, le profil de température le long de l'axe de propagation (Fig. 3.14 (b)) est constitué d'un pic, situé entre $x = 5 \mu\text{m}$ et $x = 7 \mu\text{m}$ et d'un plateau, allant de $x = 7 \mu\text{m}$ à $x = 10 \mu\text{m}$ due à la distribution de densité électronique induite lors de l'interaction avec l'impulsion laser (voir Sec. 3.2). La distribution de température n'est donc pas homogène le long de l'axe de propagation du laser. Elle atteint plus de 3.10^4 K dans le pic et $1.5.10^4 \text{ K}$ dans le plateau. Cette élévation de température s'explique par la production d'une densité d'électrons de conduction beaucoup plus importante, atteignant plusieurs fois la densité

critique du matériau. Ceux-ci ont donc pu absorber une quantité d'énergie laser bien plus grande. Dans ce cas les densités d'énergie absorbées sont de l'ordre de 70 kJ/cm^3 dans le pic et 30 kJ/cm^3 dans le plateau (voir Sec. 3.2). Les oscillations dans le plateau, observées et discutées précédemment (Sec. 3.2), sont ici aussi visibles, comme attendues. Les traces de leurs variations en température, d'environ 2000 K , devraient se retrouver dans les déformations induites. De plus, une différence significative de déformation est attendue dans le matériau entre le pic et le plateau, les températures dans les deux régions étant différentes d'un facteur 2.

Dans le cas 3 (Fig. 3.14 (c)) des températures élevées, atteignant plus de 5.10^4 K et capables d'induire des déformations significatives dans le matériau, sont distribuées très localement au niveau du pic, dans une zone longue de moins de $1 \mu\text{m}$ entre $x = 3 \mu\text{m}$ et $x = 4 \mu\text{m}$. Des températures plus basses, de l'ordre de 1000 K sont observées dans une zone plus étendue le long de l'axe de propagation, sur un plateau d'environ $10 \mu\text{m}$, entre $x = 5 \mu\text{m}$ et $x = 15 \mu\text{m}$, où les oscillations ont disparues (lissées). Cela est dû à la limite d'auto-reconstruction des faisceaux de Bessel-Gauss (voir 3.2). Les densités électroniques produites derrière le pic sont alors faibles, de l'ordre de la densité critique réduisant la quantité d'énergie absorbée et donc les températures induites.

La Figure (Fig. 3.15) montre à présent les profils initiaux de températures le long de l'axe de propagation du faisceau dans le cas 4 et 5 correspondant à des durées d'impulsions de 300 fs . Dans le cas 4, le profil de température est également constitué d'un pic

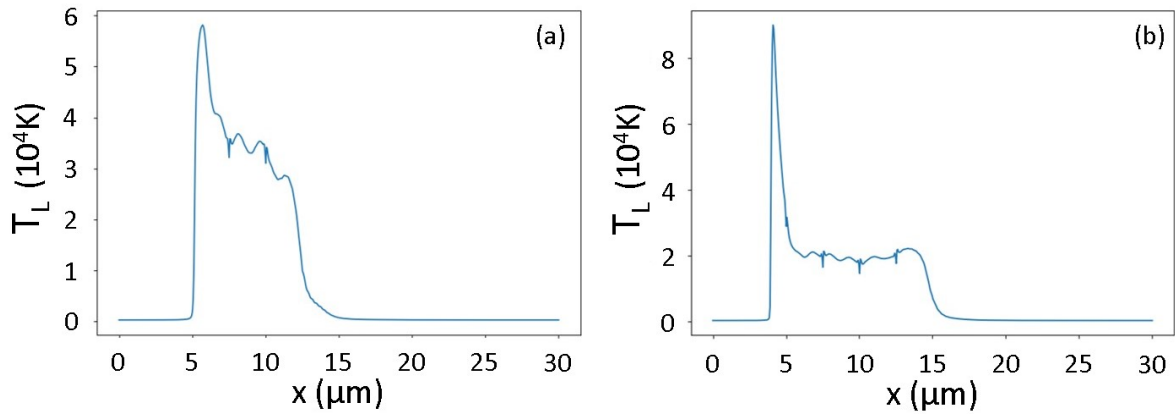


FIGURE 3.15 – Profils initiaux de température du matériau le long de l'axe de propagation du laser dans les cas (a) 4, (b) 5 (voir Tab. 3.3).

entre $x = 5 \mu\text{m}$ et $x = 7 \mu\text{m}$ et d'un quasi-plateau entre $x = 7 \mu\text{m}$ et $x = 10 \mu\text{m}$, pour les mêmes raisons qu'énoncées plus haut, mais les températures générées sont globalement plus importantes. Tandis que dans le pic elles atteignent un peu moins de 6.10^4 K , dans le plateau elles sont d'environ $3.5.10^4 \text{ K}$, soient plus de deux fois les températures observées dans le cas 2. En effet, comme vu dans la Sec. 3.2, les densités électroniques atteintes pendant l'interaction sont comparables, mais celles-ci étant atteintes sur des temps plus long dû à un impact collisionnel retardé, le faisceau de Bessel-Gauss est moins perturbé avec des phénomènes d'auto-reconstruction diminués. Les électrons en bande de conduction, notamment dans le plateau ont pu alors absorber des quantités d'énergie plus importantes. Ainsi, les densités d'énergie laser absorbées sont de l'ordre de 120 kJ/cm^3 dans le pic et de 80 kJ/cm^3 dans le plateau. Les températures induites sont donc d'autant plus élevées. Cela a également des conséquences sur la différence de température entre le

pic et le plateau qui est ici légèrement moins importante. Des oscillations de température d'environ 2000 K sont visibles dans le plateau.

Dans le cas 5, tandis que la température dans le pic atteint quasiment 9.10^4 K, soit trois fois plus que dans le cas 2 et 1,5 fois plus que dans le cas 4, la température dans le plateau atteint plus de 2.10^4 K et est répartie de manière quasi-homogène sur plus de $12\text{ }\mu\text{m}$. En augmentant l'énergie, les effets d'auto-reconstruction du faisceau atteignent leur limite (voir Sec. 3.2). Cependant les densités électronique élevées étant atteintes sur des temps plus longs, ces effets de limitation arrivent plus tard lors de l'interaction. Les électrons de conduction ont donc pu absorber sur des temps plus longs l'énergie du laser dans la région du plateau sur des distances plus importantes. Des oscillations plus faibles (apparition d'artefacts numériques) que dans les cas 2 et 4 sont visibles, avec des variations en température inférieures à 1000 K. Dues aux pertes de forme des dépôts d'énergie lors des mouvements hydrodynamiques comme mentionnées dans le chapitre précédent (Sec. 2.2), leurs variations en température ne devraient quasiment pas se retrouver dans les déformations induites. Cependant, la différence de température entre le pic et le plateau étant plus importante que dans le cas 4, une différences de déformations significatives entre les deux régions est attendue.

Les simulations thermo-élasto-plastique de la formation de structures induites par l'interaction de faisceaux de Bessel-Gauss dans des volumes de silice sont à présent décrites et étudiées. Dans un premier temps, les cas analysés sont les cas 1, 2 et 3 (Tab. 3.3). Puis, dans un deuxième temps, les cas analysés sont les cas 4 et 5 (Tab. 3.3).

De manière générale, la distribution de température, induite par le dépôt d'énergie qui a échauffé le matériau localement, va générer des déformations sous l'effet de la relaxation de la matière. Dans le cas d'un dépôt de forme cylindrique, un choc de forme similaire est initié et se propage dans le matériau. Dans une géométrie 2D, selon la coupe longitudinale du cylindre, cela revient à une onde de choc se propageant selon la direction perpendiculaire (direction y) à l'axe central du dépôt d'énergie de part et d'autre de celui-ci (Fig. 3.16 (Zone 1)). Dans le cas où un pic d'énergie est également présent, une onde de choc quasi-sphérique est également initiée (Fig. 3.16 (Zone 2)). Celle-ci va alors interagir avec l'onde de choc initiée depuis le plateau du dépôt d'énergie de manière constructive, augmentant dans les zones d'interaction les contraintes générées (Fig. 3.16 (Zone 3)).

3.3.2 Cas 2D de la formation de structure dans la silice par une impulsion de 150 fs

Les simulations de la déformation d'un volume de silice par le dépôt d'énergie dans les cas 1, 2 et 3 (Tab. 3.3) sont analysées dans cette section.

Tout d'abord les cartes spatiales 2D de la distribution de densité finale (Fig. 3.17 (a)) et de la distribution de contrainte principale en compression (Fig. 3.17 (b)), 200 ps après le dépôt d'énergie, sont présentées dans le cas 1. Dans ces conditions physiques (voir Tab. 3.3), seule une onde de forme cylindrique a été initiée autour du dépôt d'énergie. En effet, ce dernier n'était pas constitué d'un pic et d'un plateau comme présenté sur la Fig. 3.14. L'onde générée se propageant était une onde acoustique (élastique) dont les valeurs de contraintes (équivalente) étaient inférieures à la limite élastique du matériau Y. Cette onde n'a donc induit que de très légères variations de densité, de l'ordre de 0.01%, entre $x = 4\text{ }\mu\text{m}$ et $x = 18\text{ }\mu\text{m}$, sur une largeur de $0.6\text{ }\mu\text{m}$ (Fig. 3.17 (a)). La variation de

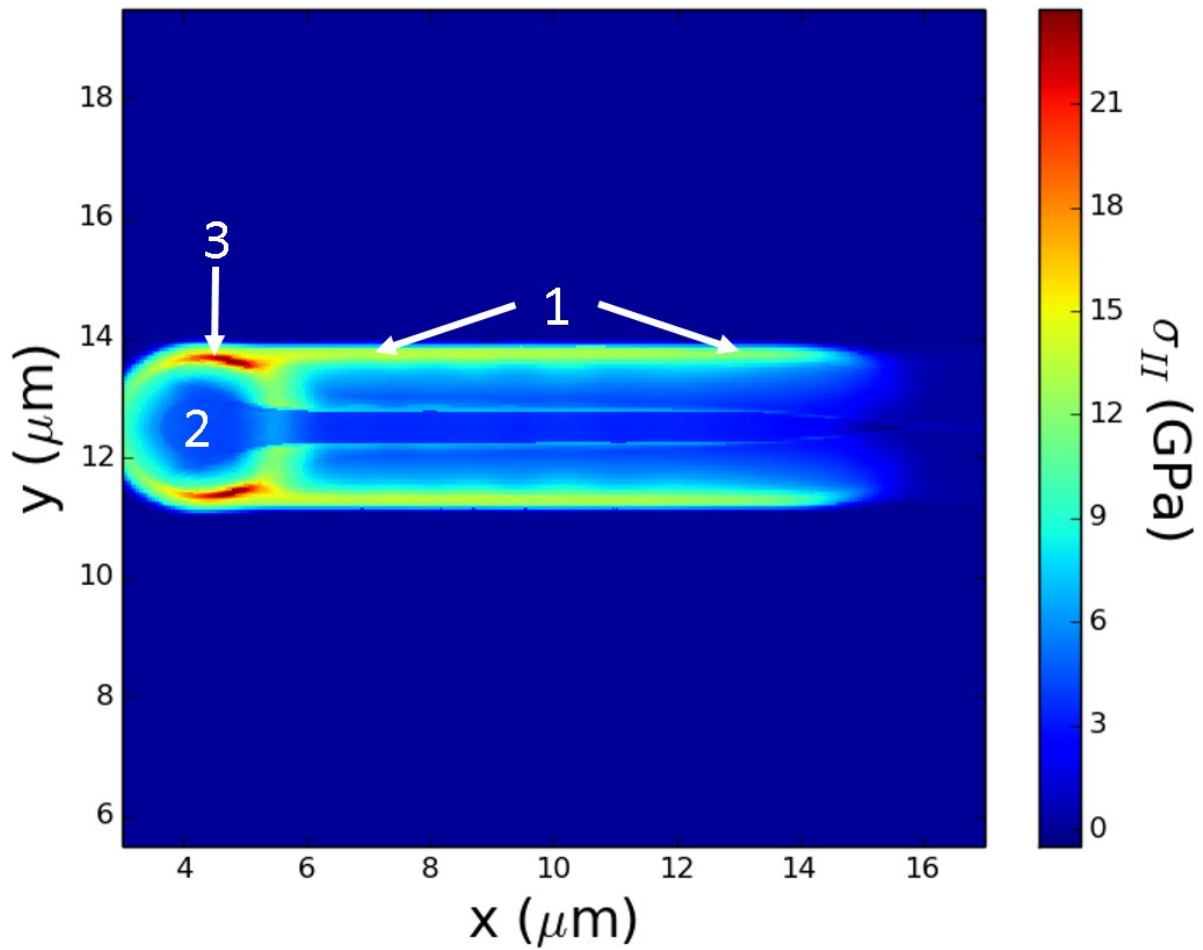


FIGURE 3.16 – Profil spatial de la contrainte principale en compression dans le cas 5 (Tab. 3.3), 200 ps après le dépôt d'énergie induit par le faisceau de Bessel-Gauss. Illustre au mieux les mécanismes d'interaction des chocs initiés par le dépôt d'énergie constitué d'un pic et d'un plateau. Zone 1 : Onde de choc cylindrique initiée par le plateau, se propageant radialement dans la direction perpendiculaire à l'axe central du dépôt d'énergie. Zone 2 : Choc sphérique initié par le pic principal d'énergie du dépôt. Zone 3 : Zone d'interaction des deux ondes de choc.

l'indice de réfraction du matériau est donc du même ordre de grandeur d'après la relation $\frac{\Delta n}{n} = \frac{\Delta \rho}{\rho}$, supposant de petites déformations et une structure électronique inchangée. Comme attendu, aucun micro-canal ni surdensité ne se sont donc formés, les variations de densité de matière étant trop faibles. Les modifications générées dans le matériau sont négligeables, d'un ordre de grandeur inférieur à celles formant un guide d'onde. En jouant finement avec la valeur d'intensité initiale de l'impulsion, la génération d'un guide d'onde (variation de densité et d'indice de réfraction de l'ordre de 0.1%) est attendue.

En outre, la contrainte principale en compression induite est en moyenne de l'ordre de 200 MPa (Fig. 3.17 (b)). Des contraintes maximales en compression de l'ordre de 400 MPa sont situées au centre du dépôt d'énergie où la température est la plus élevée, de l'ordre de 800 K à la densité du solide. Aucune région critique ne peut être induite dans ce cas, les contraintes étant largement inférieures aux limites de résistance du matériau.

Dans le deuxième cas (voir Tab. 3.3), les températures et les pressions produites par le dépôt d'énergie associé (Fig. 3.15(a)) ont initié une onde de choc sphérique (pic) et

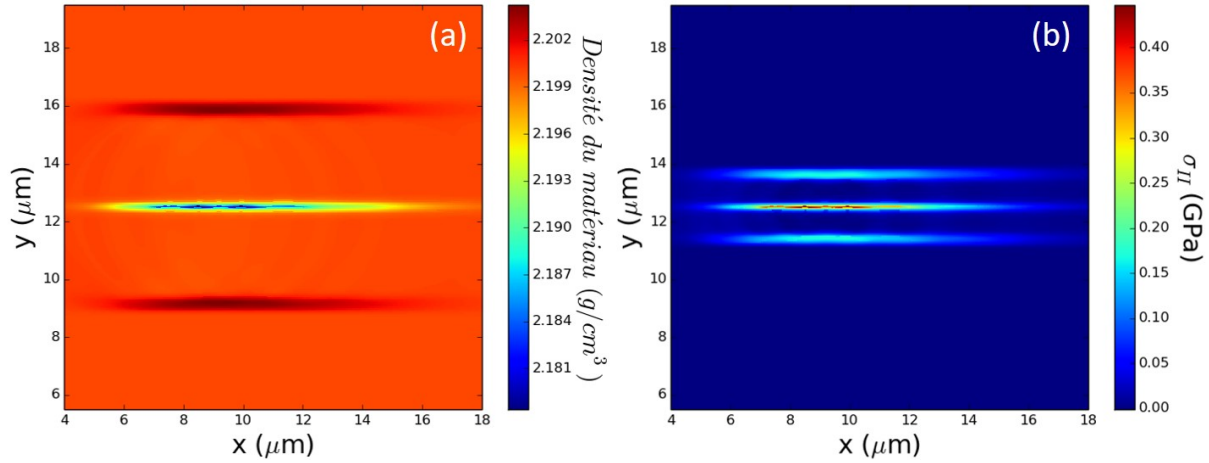


FIGURE 3.17 – (a) Carte 2D du profil final de densité et (b) distribution de la contrainte principale en cisaillement induits par le dépôts d'énergie dans le cas 1 (voir Tab. 3.3). Des variations négligeables de la densité du matériau sont visibles. Les contraintes principales en compression sont bien inférieures à la limite de résistance en compression.

une onde de choc cylindrique (plateau). Comme vu ci-dessus (Fig. 3.16), les deux ondes ont interagi de manière constructive et leurs amplitudes ont dans ce cas dépassé la limite élastique du matériau Y, induisant des déformations permanentes dans le solide. Les cartes spatiales 2D de la distribution de densité finale (Fig. 3.18 (a)) et du profil longitudinal associé (Fig. 3.18 (b)) sont présentées. Un micro-canal, long d'environ 6 μm et large de

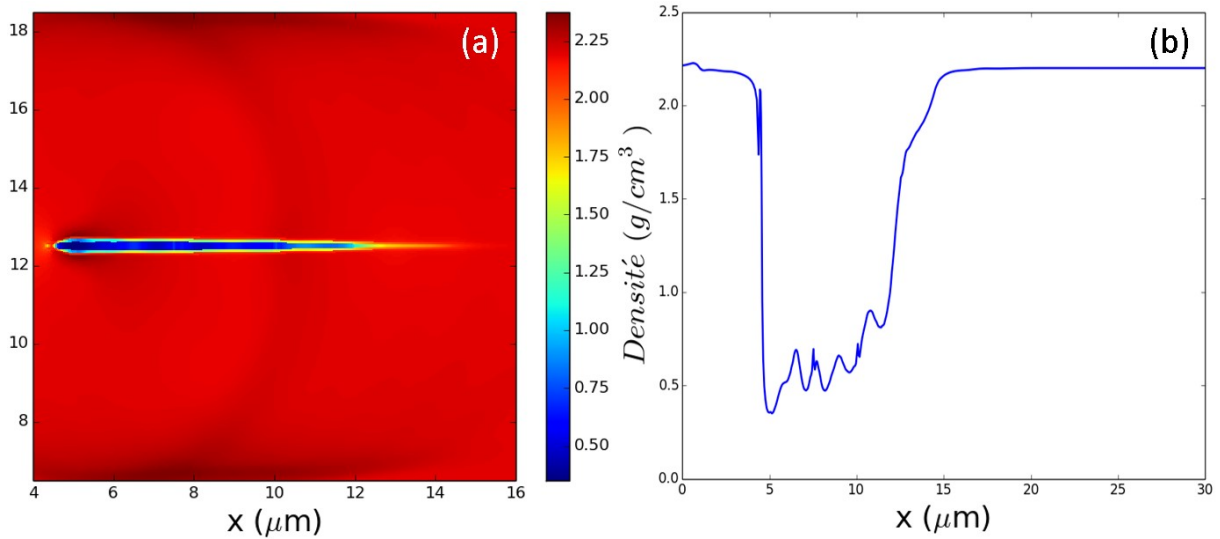


FIGURE 3.18 – (a) Carte 2D du profil final de densité et (b) profil final longitudinal de densité associés induits par le dépôts d'énergie dans le cas 2 (voir Tab. 3.3). Un micro-canal inhomogène est généré, présentant des oscillations due à la forme du dépôt d'énergie.

0.4 μm en moyenne s'est formé (Fig. 3.18 (a)). La densité minimale au centre du canal est inférieure à 0.4 g/cm^3 . Une zone de surdensité, dont la valeur est de l'ordre de 2.25 g/cm^3 est visible dans la région où les ondes ont interagi. Aucune région surdense significative n'est observée ailleurs autour du micro-canal. Quant au profil longitudinal final de densité au centre du micro-canal formé (Fig. 3.18 (b)), celui-ci est inhomogène et présente des oscillations de densité, trace des oscillations observées dans le profil du dépôt d'énergie

présenté dans la Sec. 3.3.1 (Fig. 3.15). De plus la différence de densité entre la région du pic central du dépôt d'énergie (situé entre $x = 5 \mu\text{m}$ et $x = 7 \mu\text{m}$) et la région du plateau (situé entre $x = 7 \mu\text{m}$ et $x = 10 \mu\text{m}$) varie de 0.4 g/cm^3 à 0.6 g/cm^3 . Un micro-canal s'est donc formé mais celui-ci est inhomogène pour les conditions physiques du cas 2 (Tab. 3.3).

La Figure 3.19 montre les cartes spatiales de la contrainte principale en compression (Fig. 3.19 (a)) et du cisaillement maximal (Fig. 3.19 (b)), 100 ps après le dépôt d'énergie (temps pour lequel la contrainte en cisaillement est la plus importante) dans le cas 2. Deux

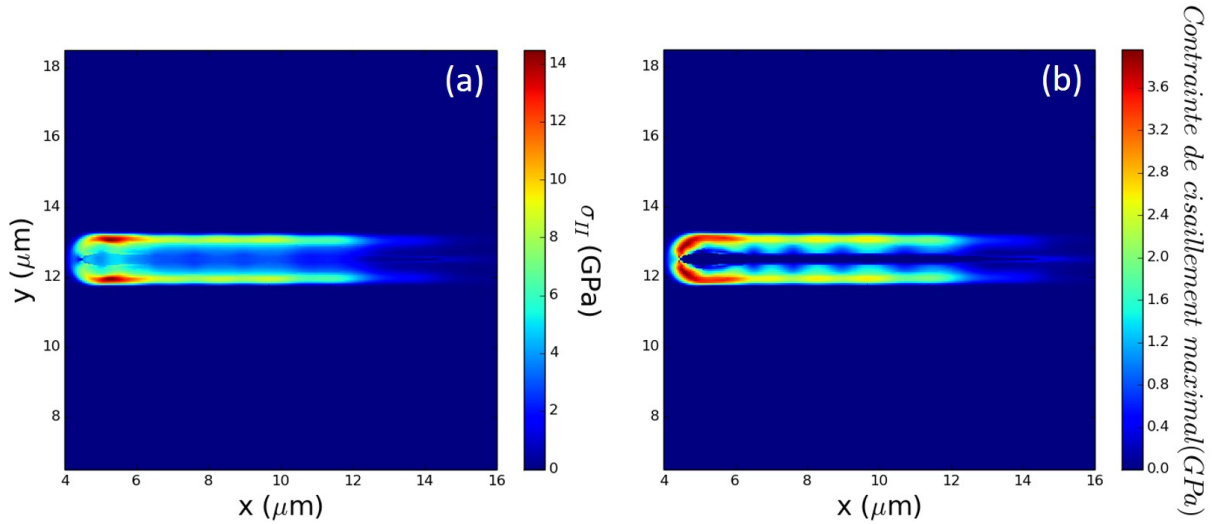


FIGURE 3.19 – Cartes 2D de (a) la contrainte principale en compression et (b) la contrainte de cisaillement maximale, calculées dans le cas 2 (voir Tab. 3.3), 100 ps après le dépôt d'énergie.

régions de contrainte en compression maximale, symétriques par rapport à l'axe central du dépôt d'énergie, sont induites (Fig. 3.19 (a)). Ces deux régions se situent dans les zones d'interaction des ondes de choc initiées par le pic central et le plateau du dépôt d'énergie. Les contraintes principales en compression produites y sont de l'ordre de 14 GPa, 100 ps après le dépôt d'énergie, dépassant alors la limite de résistance moyenne en compression L_c du matériau. La contrainte de cisaillement maximale est, elle aussi, plus importante dans la région d'interaction des ondes de choc (Fig. 3.19 (b)). Plus précisément, elle est maximale à la perpendiculaire des zones de compression maximale et dépasse 4 GPa. En effet, de la même manière que dans le cas des multiples cavités, la compression étant distribuée de manière inhomogène, le cisaillement augmente dans la direction perpendiculaire. De plus, des oscillations importantes, observées sur le dépôt d'énergie associé du cas 2 (Fig. 3.15) sont visibles de manière significative sur les profils spatiaux de la contrainte de cisaillement maximale. Cela s'explique par le fait que le cisaillement s'accumule autour de chaque oscillation du dépôt d'énergie, générant des modulations dans l'onde de choc cylindrique initiée, de la même manière qu'autour de plusieurs cavités voisines en formation, signe de la génération de sous-structures (formation d'un micro-canal inhomogène dans ce cas).

L'estimation des distributions de probabilité de fracture en compression et en cisaillement dans le cas 2 est présentée sur la Fig. 3.20. Il est à noter que les paramètres utilisés pour la loi de Weibull et résumés dans le Tab. 3.4 sont identiques à ceux utilisés dans le chapitre précédent sur la formation de cavités. Seules les surfaces S d'application de contraintes non nulles sont différentes en fonction des cas. Dans le cas 2, S est environ

Paramètres	Valeurs
Surface caractéristique S_0	$100 \mu m^2$
Surface d'application S	$30 \mu m^2$
Contrainte d'activation σ_0 en compression	10 GPa
Contrainte d'activation σ_0 en cisaillement	4 GPa
Module de Weibull m	7

TABEAU 3.4 – Tableau des paramètres utilisés dans la loi de Weibull appliquée au cas 2 (voir Tab. 3.3).

égale à $30 \mu m^2$. Celle-ci correspond à une surface de $10 \mu m$ le long de l'axe x et $3 \mu m$ le long de l'axe y. La probabilité d'activation d'un défaut dans le matériau, initiant alors

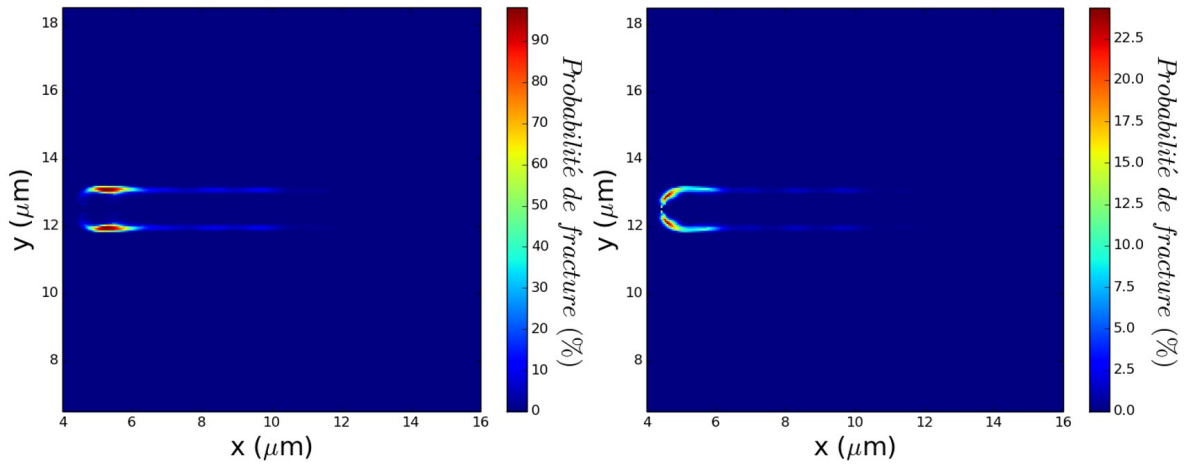


FIGURE 3.20 – Distribution spatiale de la probabilité de fracture (a) en compression et (b) en cisaillement, dans le cas 2 (voir Tab. 3.3), 100 ps après le dépôt d'énergie. Des fractures sont attendues dans des directions privilégiées, autour du pic central du dépôt d'énergie où les probabilités de fracture sont maximales en compression et en cisaillement.

une fracture, est maximale dans les deux régions où les ondes de choc ont interagi. Dans le cas de la compression (Fig. 3.20 (a)), celle-ci atteint plus de 90 % dans ces régions, tandis que dans le reste du matériau elle ne dépasse pas 10 %. Dans le cas du cisaillement (Fig. 3.20 (b)), la probabilité de fracture maximale atteint 23 % autour du pic central du dépôt d'énergie, tandis qu'elle est inférieure à 1 % dans le reste du matériau. Des fractures sont donc attendues dans des directions privilégiées autour du pic central du dépôt d'énergie.

Dans le troisième cas, seule une onde de choc quasi-sphérique a été initiée par le pic observé dans le dépôt d'énergie associé (Fig. 3.15(b)). L'amplitude de cette onde, en excédant la limite élastique du solide, a alors induit des déformations permanentes. L'onde cylindrique initiée par le plateau avait une amplitude inférieure à la limite élastique Y (onde acoustique) et n'a donc pas induit de déformations permanentes. Les cartes spatiales 2D de la distribution de densité finale (Fig. 3.21 (a)) et du profil transverse associé (Fig. 3.21 (b)) sont présentées. Une cavité, a été générée par le pic de température (Fig. 3.21 (a)). La densité dans la cavité est de l'ordre de 0.25 g/cm^3 , sa longueur de $1 \mu m$ et sa largeur de l'ordre de $0.4 \mu m$, tandis qu'une région surdense l'entoure avec une valeur maximale de densité de 2.4 g/cm^3 . Des variations de densité de l'ordre de 10 % sont

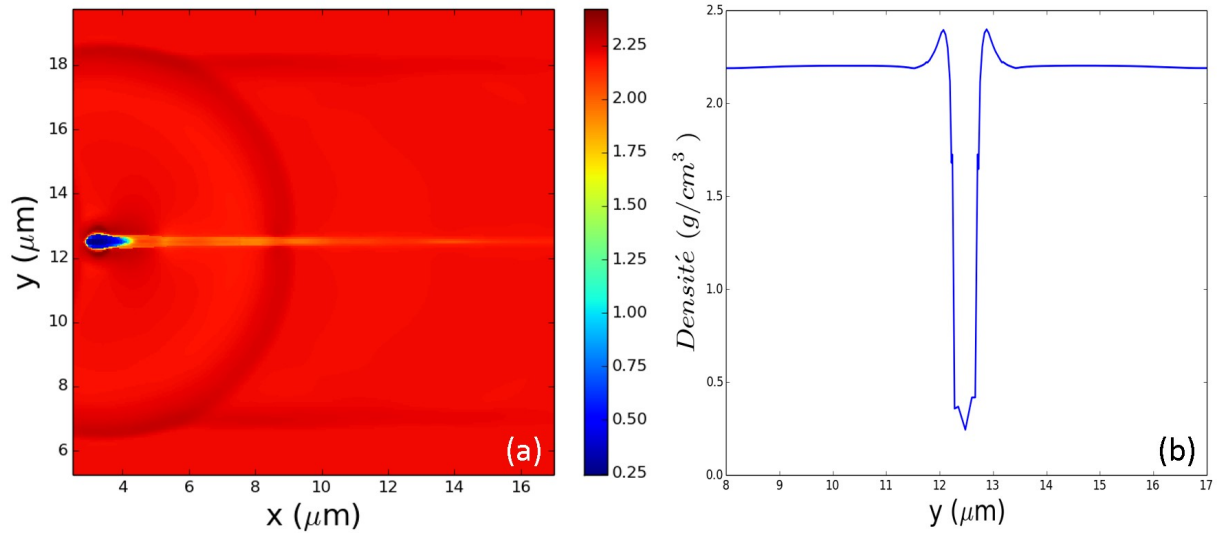


FIGURE 3.21 – (a) Carte 2D du profil final de densité et (b) profil transverse de densité associé, induits par le dépôts d’énergie dans le cas 3 (voir Tab. 3.3). Une cavité et un guide d’onde sont induits, respectivement, par le pic central et le plateau du dépôt d’énergie.

observées dans la zone du plateau de la distribution de température initiale, menant à des variations l’indice de réfraction du matériau du même ordre de grandeur. Le profil transverse final de densité de la cavité formée (Fig. 3.21 (b)) est similaire au profil de densité d’une cavité induite par l’interaction d’un faisceau gaussien fortement focalisé dans la silice et présenté dans la Sec. 2.3. Tout d’abord les dimensions de la cavité sont identiques. Sa largeur de $0.4 \mu\text{m}$ est deux fois moins importante que sa longueur de $1 \mu\text{m}$ dans la direction perpendiculaire. Sa forme est également assimilable à une larme telle qu’observée expérimentalement [16, 17]. De plus, les densités calculées au centre de la cavité et dans la région surdense autour sont similaires.

Dans les conditions physique du cas 3 (Tab. 3.3), une cavité comparable à celles générées par des faisceaux gaussiens fortement focalisés dans la silice a donc été induite par le pic central du dépôt d’énergie du faisceau de Bessel-Gauss tandis qu’un guide d’onde a été généré dans la région du plateau du dépôt d’énergie, où des variations de l’ordre de 10 % ont été calculées.

La Figure 3.22, montre les cartes spatiales de la contrainte principale en compression (Fig. 3.22 (a)) et du cisaillement maximal (Fig. 3.22 (b)), 100 ps après le dépôt d’énergie (temps pour lequel la contrainte en cisaillement est la plus importante) dans le cas 3.

100 ps après le dépôt d’énergie, la contrainte maximale en compression est de l’ordre de 14 GPa autour de la cavité en formation (Fig. 3.22 (a)), excédant la limite de résistance en compression L_c du matériau. De plus, elle est répartie de manière quasi-homogène, grossièrement de la même manière que dans le cas de la formation d’une cavité unique (voir Sec. 2.3). Le cisaillement dans ce cas est plus faible, comme le montre la distribution de la contrainte en cisaillement maximale. (Fig. 3.22 (b)). Celle-ci, répartie autour de la cavité, n’excède pas 3.7 GPa, 100 ps après le dépôt d’énergie. Puis le cisaillement diminue par la suite, restant donc inférieur à la limite de résistance en cisaillement du matériau $L_t/2$. Les probabilités de fracture estimées par la loi de Weibull (non montré) sont, comme dans le cas de la formation d’une cavité unique (Sec. 2.3), inférieures à 10 %. Aucune fracture n’est donc attendue dans les conditions physiques du cas 3 (Tab. 3.3). En augmentant encore l’énergie, le phénomène d’augmentation du pic central d’énergie

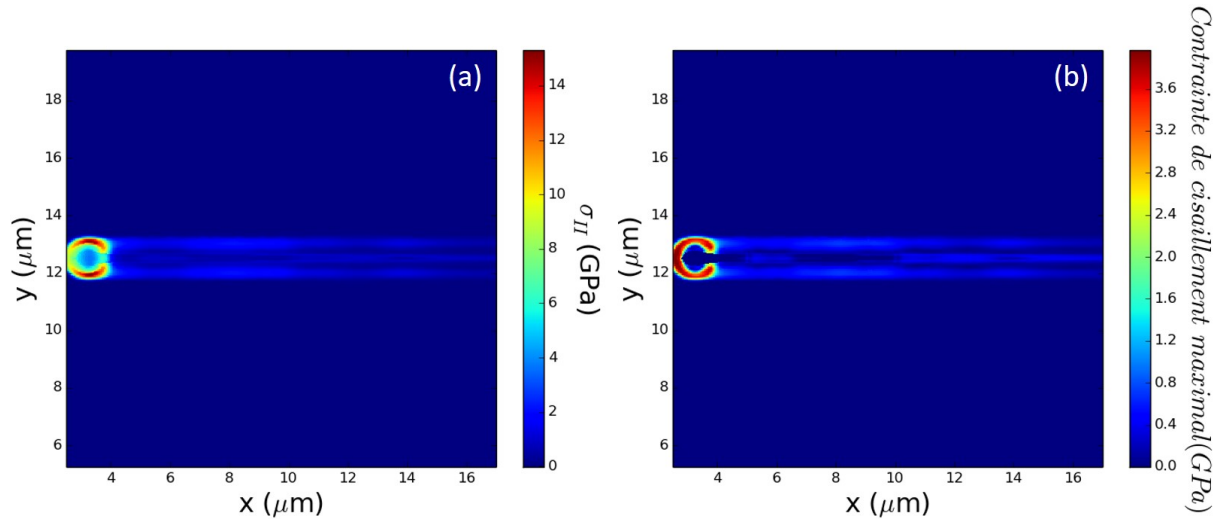


FIGURE 3.22 – Cartes 2D de (a) la contrainte principale en compression et (b) la contrainte de cisaillement maximale, calculées dans le cas 3 (voir Tab. 3.3), 100 ps après le dépôt d'énergie.

et de la diminution du plateau s'accroît. Une cavité de plus en plus homogène est donc attendue, avec une probabilité de fracture du même ordre de grandeur.

Ces simulations mettent donc en avant le caractère très sensible des paramètres lasers. Un intervalle d'intensité (ou d'énergie) très restreint permet d'obtenir une formation d'un micro-canal dans la silice avec une impulsion de 150 fs. Pour une intensité trop faible, peu d'énergie laser est absorbée et le matériau n'est pas assez chauffé pour qu'une déformation significative soit observée expérimentalement [123]. De même, pour une intensité trop forte, toute l'énergie laser est absorbée localement résultant en un pic de température. Une cavité se forme mais aucun micro-canal n'est observé là encore [123].

3.3.3 Cas 2D de la formation de structure dans la silice par une impulsion de 300 fs

Les simulations de la déformation d'un volume de silice par le dépôt d'énergie des cas 4 et 5 (voir Tab. 3.3) sont décrites dans cette section.

Dans le cas 4, les températures et pressions initient une onde de choc globalement cylindrique, le pic et le plateau dans le dépôt d'énergie (Fig. 3.15 (a)) étant moins différenciés dans ce cas. Il est à noter que des interactions peu importantes entre les deux chocs initiés par le pic et le plateau ont tout de même lieu. L'onde de choc a une amplitude suffisante pour excéder la limite élastique du solide et induire des déformations permanentes. La Figure 3.23 montre la carte spatiale 2D de la distribution de densité finale (Fig. 3.23 (a)) et du profil longitudinal associé (Fig. 3.23 (b)). Un micro-canal long d'environ 10 μm et large de 0.5 μm et entouré d'une région surdense (Fig. 3.23 (a)) est formé. La densité en son centre est en moyenne de 0.25 g/cm^3 tandis que dans la zone surdense la densité est en moyenne de 2.25 g/cm^3 . La région surdense est répartie de manière inhomogène autour du micro-canal. La taille de celle-ci diminue dans la direction des x croissants. Cela est dû aux oscillations de plus en plus faibles dans la distribution de température associée. Comme le montre le profil final longitudinal au centre du micro

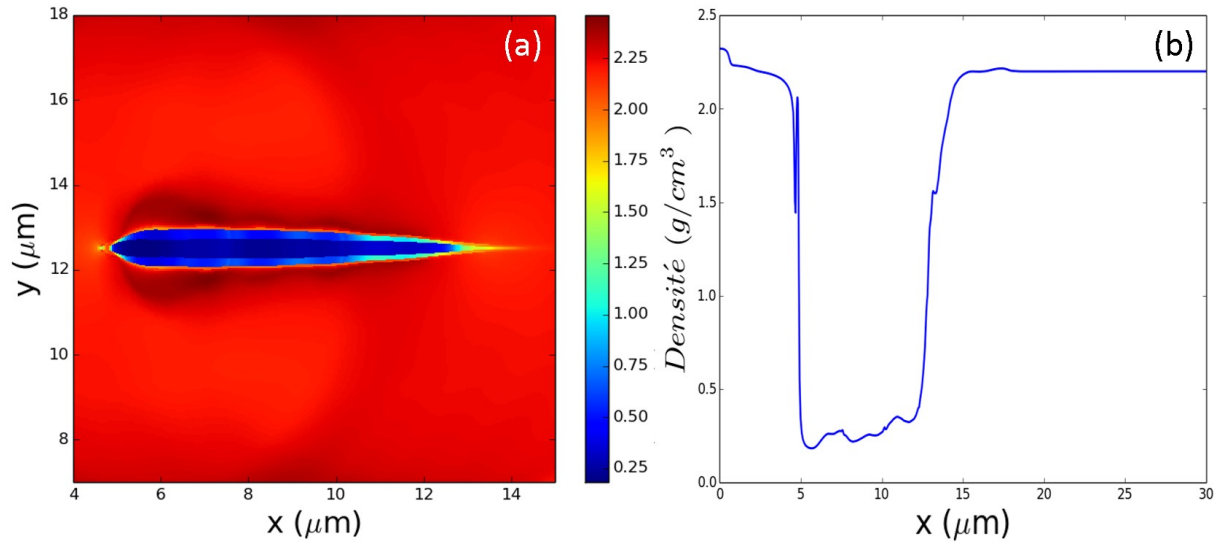


FIGURE 3.23 – (a) Carte 2D du profil final de densité et (b) profil final longitudinal de densité associés induits par le dépôt d'énergie dans le cas 4 (voir Tab. 3.3). Un micro-canal homogène est généré.

canal (Fig. 3.23 (b)), celui-ci est plus homogène que dans le cas 2, bien qu'il exhibe encore de légères variations de densités en son centre. Ceci vient du fait que les amplitudes des oscillations dans la distribution de température sont moins importantes. La forme du dépôt d'énergie étant en partie perdue lors des déformations du matériau, le micro-canal exhibe peut de variations en densité.

La Figure 3.24, montre les cartes spatiales de la contrainte principale en compression (Fig. 3.24 (a)) et du cisaillement maximal (Fig. 3.24 (b)), 200 ps après le dépôt d'énergie (temps pour lequel la contrainte en cisaillement est la plus importante) dans le cas 4. Les

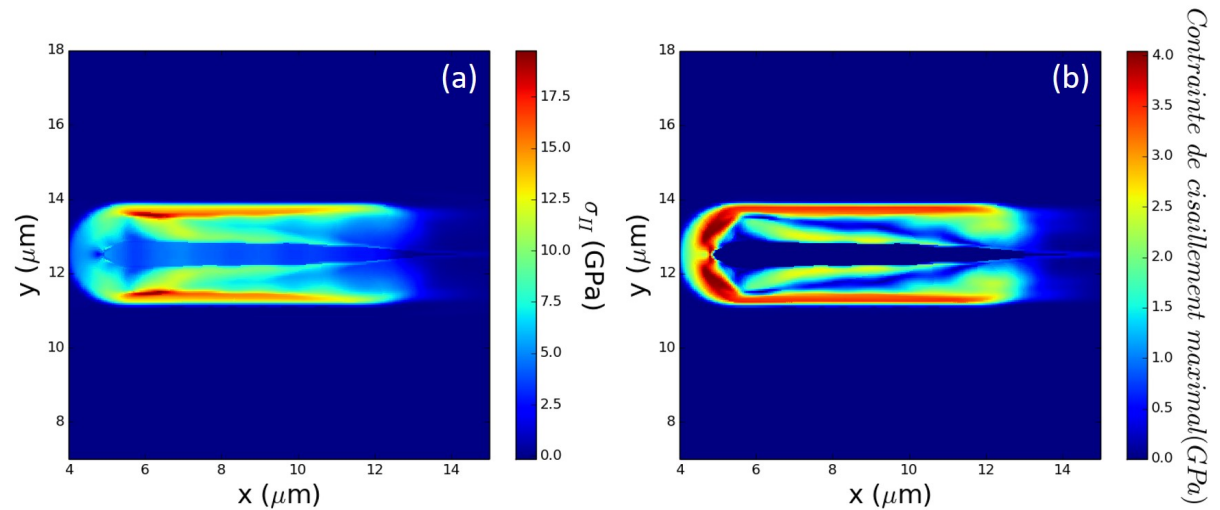


FIGURE 3.24 – Cartes 2D de (a) la contrainte principale en compression et (b) la contrainte de cisaillement maximale, calculées dans le cas 4 (voir Tab. 3.3), 200 ps après le dépôt d'énergie.

contraintes principales en compression induites par l'onde de choc sont réparties autour du micro-canal en formation et sont maximales au niveau du front de l'onde de choc (Fig. 3.24

(a)). Celles-ci atteignent 17-18 GPa, 200 ps après le dépôt d'énergie dans les deux régions où les ondes du pic central et du plateau du dépôt d'énergie interagissent. Elles dépassent donc largement la limite de résistance en compression du matériau. Elles sont sinon, en moyenne, plus faibles sur le reste du front de l'onde initiée par le plateau, de l'ordre de 13-14 GPa. Les contraintes de cisaillement maximales sont distribuées tout autour du micro-canal en formation et sont maximales autour du pic central de température (Fig. 3.24 (b)). Elles atteignent plus de 4 GPa de part et d'autre de l'entrée du micro-canal, puisque dans cette région, la matière est fortement cisailée par l'ouverture du canal. Elles restent inférieures à 3,6 GPa dans le reste du matériau. De plus, les oscillations observées dans la distribution de cisaillement dans le cas 2 ont disparues ici, puisque celles-ci sont plus faibles comme dit plus haut.

Les distributions de probabilité de fracture en compression et en cisaillement dans le cas 4, 200 ps après le dépôt d'énergie sont présentées sur la Fig. 3.25. Les paramètres utilisés pour la loi de Weibull sont identiques que dans le cas 2 (voir Tab. 3.4) La

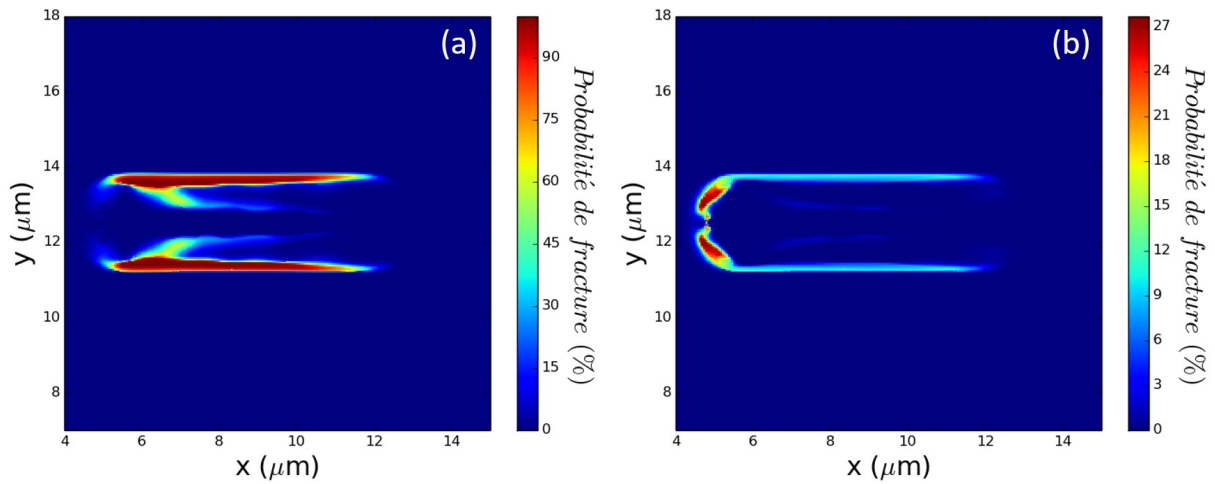


FIGURE 3.25 – Distribution spatiale de la probabilité de fracture (a) en compression et (b) en cisaillement, dans le cas 4 (voir Tab. 3.3), 200 ps après le dépôt d'énergie. Des fractures sont attendues dans des directions privilégiées, autour du pic central du dépôt d'énergie où les probabilités de fracture sont maximales en compression et en cisaillement.

probabilité de fracture dans le matériau, 200 ps après le dépôt d'énergie, est dans ce cas maximale autour du pic central de la distribution de température et le long du front de l'onde initiée par le plateau. Dans le cas de la compression (Fig. 3.25 (a)), celle-ci varie entre 60 et 90 % dans ces régions, tandis que dans le reste du matériau elle ne dépasse pas 10 %. Dans le cas du cisaillement (Fig. 3.25 (b)), la probabilité de fracture maximale atteint environ 27 % de part et d'autre de l'entrée du micro-canal, tandis qu'elle est inférieure à 10 % dans le reste du matériau. Des fractures sont donc attendues dans des directions privilégiées autour du pic central du dépôt d'énergie.

Dans le cas 5, le dépôt d'énergie initie une onde de choc sphérique (pic) et une onde de choc cylindrique (plateau) (Fig. 3.15 (b)). Celles-ci ont des amplitudes suffisamment élevées pour induire des contraintes excédant la limite élastique du matériau et générer des déformations significatives dans le matériau. La Figure 3.26 montre la carte spatiale 2D de la distribution de densité finale (Fig. 3.26 (a)) et du profil longitudinal associé (Fig. 3.26 (b)). Un micro-canal est généré, long d'environ 12 μm et large de 0.6 μm (Fig. 3.26 (a)). Celui-ci est entouré d'une région surdense localisée au niveau du pic de

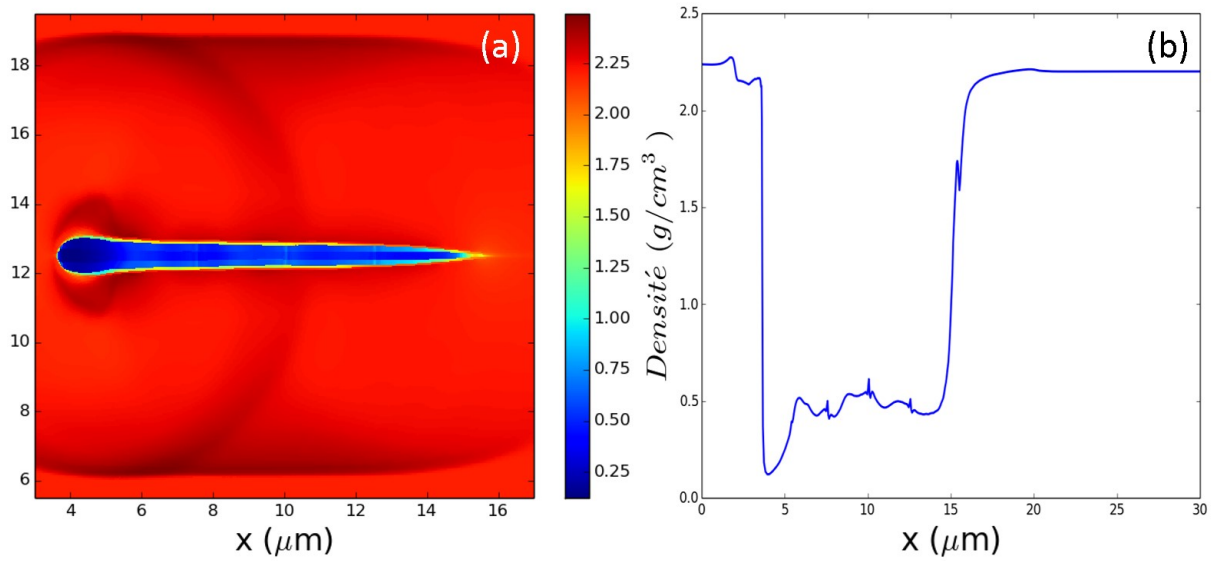


FIGURE 3.26 – (a) Carte 2D du profil final de densité et (b) profil final longitudinal de densité associés induits par le dépôt d'énergie dans le cas 5 (voir Tab. 3.3). Un micro-canal inhomogène est généré.

température initiale. La densité au centre du micro-canal est en moyenne de 0.25 g/cm^3 tandis que dans la zone surdense la densité est en moyenne de 2.25 g/cm^3 . Cependant ici, les déformations engendrées par le pic central de la distribution de température initiale sont plus importantes que celles engendrées par le plateau. Le canal s'élargit au niveau du pic à cause de l'onde de choc sphérique initiée d'amplitude plus importante et atteint un rayon de l'ordre de 0.8 μm . Le profil final longitudinal au centre du micro canal (Fig. 3.26 (b)), montre que le canal formé par le plateau est quasi-homogène, n'exhibant que peu de variations en densité (densité moyenne d'environ 0.5 g/cm^3). Cependant, le micro-canal total formé est inhomogène à cause de la différence de densité notable dans le pic, qui est inférieure à 0.25 g/cm^3 , soit deux fois moins que dans le plateau.

La Figure 3.27, montre les cartes spatiales de la contrainte principale en compression (Fig. 3.27 (a)) et du cisaillement maximal (Fig. 3.27 (b)), 600 ps après le dépôt d'énergie (temps pour lequel la contrainte en cisaillement est la plus importante) dans le cas 5. Les contraintes principales en compression induites par l'onde de choc sont réparties, ici aussi, autour du micro-canal en formation et sont maximales au niveau du front de l'onde de choc (Fig. 3.27 (a)). Celles-ci sont de l'ordre de 12 GPa, 600 ps après le dépôt d'énergie dans les deux régions, où les ondes initiées par le pic central et le plateau du dépôt d'énergie interagissent, dépassant alors la limite de résistance en compression du matériau. Sur le reste du front de l'onde initiée par le plateau, les contraintes principales en compression sont en moyenne, plus faibles, de l'ordre de 8-9 GPa. Les contraintes de cisaillement maximales sont distribuées autour de la région où le pic central de température a initié une onde de choc sphérique qui induit des déformations plus importantes que l'onde de choc cylindrique initiée par le plateau (Fig. 3.24 (b)). L'élargissement de l'entrée du micro-canal génère alors des contraintes en cisaillement importantes de part et d'autre de cette région. Elles atteignent donc plus de 4 GPa autour de l'entrée du micro-canal et restent bien inférieures dans le reste du matériau.

L'estimation des distributions de probabilité de fracture en compression et en cisaillement dans le cas 5, 600 ps après le dépôt d'énergie, est montrée sur la Fig. 3.28. Les

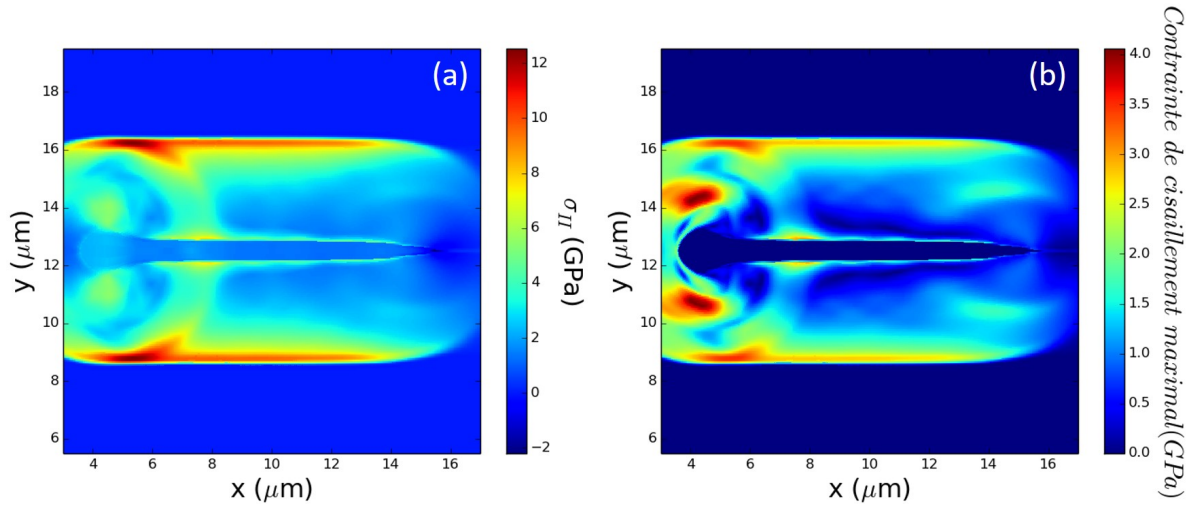


FIGURE 3.27 – Cartes 2D de (a) la contrainte principale en compression et (b) la contrainte de cisaillement maximale, calculées dans le cas 5 (voir Tab. 3.3), 600 ps après le dépôt d'énergie.

paramètres utilisés pour la loi de Weibull sont identiques ici aussi mis à part pour la surface S d'application de contraintes non nulles qui à ce temps est environ égale à $84 \mu\text{m}^2$. Elle correspond à une région de $12 \mu\text{m}$ le long de l'axe x et $7 \mu\text{m}$ le long de l'axe y . La probabilité de fracture dans le matériau est dans ce cas maximale autour du pic

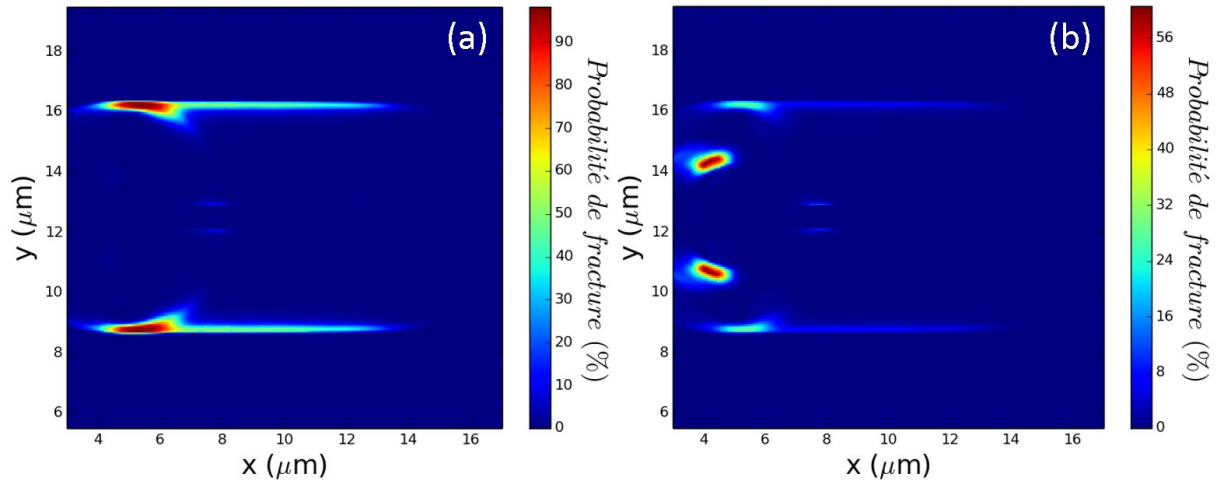


FIGURE 3.28 – Distribution spatiale de la probabilité de fracture (a) en compression et (b) en cisaillement, dans le cas 5 (voir Tab. 3.3), 600 ps après le dépôt d'énergie. Des fractures sont attendues dans des directions privilégiées, autour du pic central du dépôt d'énergie où les probabilités de fracture sont maximales en cisaillement, et dans la direction y sur le trajet de l'onde fille induites par les deux ondes de chocs du pic et du plateau.

central de la distribution de température et dans la direction y sur le trajet de l'onde fille induites par les deux ondes de chocs du pic et du plateau. Dans le cas de la compression (Fig. 3.28 (a)), celle-ci varie entre 80 et 90 % dans cette direction, tandis que dans le reste du matériau elle ne dépasse pas 10 %. Dans le cas du cisaillement (Fig. 3.28 (b)), la probabilité de fracture maximale a augmenté par rapport aux autres cas et atteint quasiment 60% de part et d'autre de l'entrée du micro-canal, tandis qu'elle est inférieure

à 10 % dans le reste du matériau. Des fractures sont donc attendues dans des directions privilégiées dans les régions de fortes probabilités.

Cas	Modifications observées
1	Faibles variations d'indice
2	Micro-canal inhomogène
3	Quasi-cavité (pic) et guide d'onde (plateau)
4	Micro-canal homogène
5	Micro-canal inhomogène

TABEAU 3.5 – Tableau résumant les différentes modifications observées dans la silice en fonction des différents cas étudiés.

Ainsi, il a été montré dans ce chapitre qu'un faisceau de Bessel-Gauss avec une impulsion de 150 fs peut former un micro-canal d'une dizaine de microns de long et de $0.4 \mu\text{m}$ de large à condition de régler précisément l'énergie du laser pour une géométrie donnée. Les différentes modifications observées en fonction des cas présentés sont résumées sur le Tab. 3.5. Pour des impulsions avec des énergies trop faibles, seules des petites variations de densité sont induites conduisant expérimentalement à l'observation de variation de l'indice de réfraction [123]. De même, pour des énergies trop fortes, l'énergie laser ne peut être absorbée de manière efficace sur des distances aussi longues. Une modification du matériau apparaît donc de manière très locale, avec la formation d'une cavité. Les températures induites par le dépôt d'énergie sont, sur le reste de l'axe de propagation du laser, trop faibles. Celles-ci n'induisent que de faibles variations de densité, conduisant expérimentalement à l'observation de variation de l'indice de réfraction [123]. De plus, les micro-canaux générés ne semblent pas homogènes du fait de variations de température importantes dans le dépôt d'énergie. En augmentant la durée d'impulsion, dans cette étude jusqu'à 300 fs, il a été estimé que les dépôts d'énergie étaient plus stables, exhibant des variations moins importantes. Des micro-canaux plus homogènes et plus importants en taille ont été obtenus. Le paramètre énergétique du laser semble également moins sensible ce qui est en bon accord avec les expériences [123]. Cependant, en augmentant trop l'énergie, les entrées des micro-canaux peuvent s'élargir en raison des pics de densité d'énergie là aussi observés dans les dépôts d'énergie, les rendant alors inhomogènes.

Ainsi, il a été mis en évidence ici, notamment au travers de la capacité d'auto-reconstruction des faisceaux de Bessel-Gauss, que la stabilité du faisceau dépend très sensiblement de l'intensité du laser et est limitée pour une durée d'impulsion et une géométrie du faisceau données. L'augmentation de la durée d'impulsion du laser, principalement, stabilise les faisceaux et permettent de former dans la silice des micro-canaux plus homogènes, tels qu'observée expérimentalement [12, 123, 129].

Conclusion et perspectives

« Difficile à voir. Toujours en mouvement est l'avenir »

Maître Yoda

Mon travail de thèse mené durant trois ans au laboratoire du CELIA entre 2015 et 2018 a été présenté dans ce manuscrit. Ce travail portait, de manière générale, sur l'étude théorique de l'interaction d'un laser femtoseconde avec des matériaux solides transparents (diélectriques). Plus spécifiquement, il s'est axé sur l'étude de la structuration d'un volume de silice fondue (amorphe), irradié par une seule impulsion laser femtoseconde. Le but principal était de comprendre les différents mécanismes en jeu lors de l'interaction laser-diélectrique et de prédire la formation de diverses structures dans le matériau. Pour cela, une modélisation de l'ensemble de la séquence des processus physiques a été menée. La résolution de la propagation de l'impulsion laser dans le matériau, via les équations de Maxwell et couplées à un modèle de dynamique électronique tenant compte des différents processus d'ionisation du solide, a permis de prédire le dépôt d'énergie par laser. Puis, ce dernier a été introduit dans un code de simulation hydrodynamique, où un modèle de thermo-élasto-plasticité a été développé, permettant de calculer les déformations et les contraintes induites. Un modèle de prédiction de rupture du matériau a également été proposé, donnant accès à la probabilité d'initiation de fracture, notamment au travers de l'utilisation d'une loi de Weibull. L'étude de la formation, dans la silice, de micro-cavités générées par un faisceau gaussien fortement focalisé, ainsi que la formation de micro-canaux induits par des faisceau de Bessel-Gauss, a ainsi pu être menée.

Dans le premier chapitre, les différents modèles utilisés ainsi que leurs hypothèses ont été présentés. Dans un premier temps, la modélisation de l'interaction laser-matériau diélectrique a été développée. La propagation de l'impulsion laser dans le solide diélectrique est traitée par la résolution des équations de Maxwell. Celles-ci sont formulées dans le cadre de la propagation du laser dans un milieu solide où un champ électrique de déplacement et des densités de courant, dépendantes des densités électroniques, sont considérés. Les équations de Maxwell, dépendantes des densités et des vitesses des électrons dans le matériau, sont ensuite couplées à un modèle de dynamique électronique. En considérant l'ensemble des électrons comme un gaz, un modèle fluide (équations d'Euler) est utilisé pour prédire la dynamique des électrons. Les différents paramètres et termes sont discutés, tels que les fréquences de collision des électrons. Puis, afin de prédire les évolutions de densité d'électrons en bande de conduction, les différents mécanismes d'ionisation et de recombinaison du matériau et leurs modélisations sont présentés. Les expressions des taux d'ionisation, associées à l'ionisation multiphotonique, l'ionisation par effet tunnel et l'ionisation par impact, sont notamment exposées. Enfin, un modèle de chauffage du réseau ionique par les électrons de conduction, supposés contenir la totalité de l'énergie

laser absorbée, a été présenté dans le cadre du modèle à deux températures.

Dans un deuxième temps, la rhéologie des matériaux, c'est à dire, les réponses hydrodynamique et mécanique de la matière, ont été introduites. Tout d'abord, les différents types d'ondes mécaniques pouvant se propager dans le matériau ont été détaillés. Celles-ci induisent des contraintes dans le solide et en fonction de la réponse de celui-ci, de son comportement rhéologique, les déformations engendrées peuvent varier. Le comportement général visco-élasto-plastique d'un solide a alors été exposé. Puis le comportement élasto-plastique d'un solide idéal, pour lequel la viscosité peut-être négligée, a été décrit. Ensuite, le modèle hydrodynamique décrivant la dynamique de déformation du matériau, constitué des équations de conservation d'Euler sous forme lagrangienne, a été détaillé. Notamment, il a été mis en avant la généralisation de la pression thermodynamique P par un tenseur des contraintes de Cauchy $\bar{\sigma}$. Le critère de plasticité choisi dans le cadre de cette étude est le critère de von Mises. Celui-ci a été justifié et d'autres critères ont été présentés. De plus, l'hypothèse d'un comportement plastique parfait du solide a été faite, pour laquelle la limite d'élasticité du matériau est supposée rester constante quelque soit la contrainte appliquée lui étant supérieure. Afin d'assurer numériquement des changements de phases sans discontinuité, un modèle de ramollissement a également été introduit et les différents changements de phase (solide-solide et solide-liquide) ont été discutés. Enfin, un modèle de prédiction de rupture du matériau a été proposé au travers de l'analyse des contraintes et de l'établissement des contraintes principales et du cisaillement maximal. Deux critères ont été mis en avant dans le cas des matériaux fragiles telle que la silice. Tout d'abord le critère de Mohr a été exposé, pour lequel une rupture intervient dès lors que les contraintes calculées dépassent les limites de résistance du matériau. Puis, un critère probabiliste a été présenté, suivant une loi de Weibull, donnant accès à une prédiction des distributions de probabilité de fracture en fonction de la contrainte appliquée et tenant compte de la densité et la taille des défauts présents dans le matériau.

Le but du deuxième chapitre était de décrire et de comprendre la déformation d'un volume de matériau chauffé par une impulsion laser femtoseconde fortement focalisée et confinée dans le matériau solide froid. Plus précisément, ce chapitre portait sur la description de la formation de cavités dans un volume de silice. Dans un premier temps, un état de l'art expérimental et théorique a été dressé et les hypothèses considérées pour la simulation thermo-élasto-plastique ont été justifiées, notamment à propos de la géométrie de la simulation ou encore à propos de la non prise en compte de la viscosité dans ce cas.

Dans un deuxième temps, la simulation de la génération d'une cavité unique par laser femtoseconde dans la silice a été décrite. Tout d'abord, le modèle élasto-plastique a été comparé au modèle fluide dans une géométrie 1D. La formation d'une région surdense a été observée mais les dynamiques de formation des cavités étaient similaires. La nécessité de la prise en compte d'une géométrie 2D, où les contraintes en cisaillement n'étaient pas négligeables entre autres, a donc été mise en évidence. La simulation thermo-élasto-plastique a alors ensuite été détaillée. Il a notamment été montré la dépendance de la dynamique de formation de la cavité quant aux comportements élasto-plastique du solide. L'évolution du rayon de cavité exhibe en effet une dynamique en trois étapes reliées tout d'abord à la déformation élasto-plastique de la matière soumise à de fortes contraintes par l'onde de choc initiée. L'accumulation des contraintes en cisaillement autour de la cavité a également mis en évidence leur importance dans l'arrêt de son expansion. Puis, une deuxième étape de fermeture, due à la relaxation des déformations élastiques (réversibles) précédemment induites et une troisième étape de stabilisation de la cavité, à cause des déformations permanentes générées, ont été observées, conduisant à une taille finie, mesu-

nable expérimentalement. Une prédictions de fractures potentielles a également été menée, indiquant une absence de fracture autour de la cavité. Une comparaison des résultats aux observations expérimentales a été faite et un bon accord entre simulation et expérience a été mis en avant.

Dans un troisième temps, les simulations thermo-élasto-plastiques de la formation de multiples cavités induites par des impulsions femtoseconde dans la silice ont été décrites. Tout d'abord le cas simplifié de la formation de deux cavités voisines a été présenté. L'interaction des ondes de choc initiées par chacun des deux dépôts d'énergie a notamment été détaillée. Les générations d'une onde mère et de deux ondes filles, l'une d'amplitude plus importante et l'autre d'amplitude moindre, ont été mises en évidence. Leur direction de propagation étant perpendiculaire, les distributions de compression induites dans le matériau sont inhomogènes. Il a donc été montré une elongation des deux cavités formées et une augmentation du cisaillement de part et d'autre des cavités. De plus, une région surdense inhomogène autour des deux cavités est observée, due aux amplitudes variables des ondes de compression et donc des déformations induites dans le solide. Puis, l'analyse des contraintes a mené à la prédiction de deux régions symétriques de fractures potentielles selon des directions privilégiées où le cisaillement était maximal, en fonction de la distance entre les deux cavités. Ce cas a ensuite été généralisé à la formation simultanée, puis successive, de multiples cavités dans la silice. Dans le premier cas, de la même manière que dans le cas de la double cavité, des cavités allongées (elliptiques) sont formées à cause de la génération d'ondes filles d'amplitude plus importante lors de l'interaction des divers chocs. Une région surdense inhomogène est induite et une augmentation du cisaillement est observée. Deux régions symétriques de fractures potentielles ont là aussi été mises en évidence. Puis, dans le deuxième cas, des cavités allongées sont également formées mais en raison de l'interaction des ondes de choc initiées de manière successive, une accumulation de contraintes en compression est observée dans le sens de déplacement du laser. Des régions de fractures potentielles sont alors situées dans des directions privilégiées opposées au cas précédent. Ces simulations ont donc mis en avant la possibilité de contrôle de la formation et de l'interaction des différentes cavités afin d'obtenir les structures ou les processus désirés. De plus, les simulations ont ici aussi été comparées aux observations expérimentales et sont en bon accord.

Le chapitre 3 traitait de la structuration en volume de la silice par des faisceaux de Bessel-Gauss femtoseconde. Le but principal de ce chapitre était de simuler l'ensemble de l'interaction d'un tel faisceau avec le solide, en calculant le dépôt d'énergie induit et de l'inclure dans la simulation thermo-élasto-plastique. Dans un premier temps, un état de l'art expérimental et théorique sur la formation et l'interaction de tels faisceaux avec des matériaux diélectriques a été réalisé.

Dans un deuxième temps, les simulations du dépôt d'énergie induit par un faisceau de Bessel-Gauss dans la silice ont été présentées. Des impulsions dont la durée était de 150 fs ont d'abord été considérées, pour différentes intensités. Les simulations ont mis en évidence des distributions de densité électronique particulières, formées d'un pic et d'un plateau en densité et variables en fonction de l'intensité initiale de l'impulsion. Ce pic et ce plateau sont dus aux phénomènes d'ionisation lors de l'interaction laser diélectrique. Le matériau est d'abord photoionisé et des densités proches de la valeur critique sont atteintes localement autour de la valeur d'intensité maximale du profil longitudinal du faisceau de Bessel-Gauss. À ce moment, les rayons convergeants provenant de l'axicon et formant le faisceau de Bessel-Gauss sont réfléchis localement par la région de densité surcritique. Le faisceau de Bessel-Gauss est donc diffracté, mais en vertu de son caractère

non-diffractant, son profil longitudinal est alors reconstruit plus loin derrière la région de densité surcritique. Les phénomènes d'auto-reconstruction mis en jeu derrière cette région diffractante ont montré l'établissement d'oscillations visibles dans le profil longitudinal. Puis, le laser continuant de chauffer les électrons en bande de conduction, l'ionisation par impact contribue à son tour à l'augmentation des densités électroniques. Cependant, puisque la distribution de densité d'électrons (précurseurs) en bande de conduction est inhomogène, plus importante autour du pic d'intensité et diminuée derrière à cause d'intensités plus faibles avec l'élargissement du faisceau, l'ionisation par impact n'est pas aussi efficace sur la totalité de l'axe de propagation de l'impulsion. Elle est notamment importante autour du pic d'intensité et un phénomène d'avalanche électronique apparaît alors plus tôt dans cette région. Le pic de densité et le plateau formés proviennent de ce phénomène et en fonction de l'intensité du laser et donc du moment où les phénomènes d'ionisation par impact apparaissent, le pic de densité peut se former plus tôt dans l'interaction et diminuer alors les densités dans le plateau, jusqu'à sa disparition totale lorsque les phénomènes d'auto-reconstruction du faisceau de Bessel-Gauss sont insuffisants. Les distributions inhomogènes de densité d'électrons de conduction, absorbant l'énergie du laser, sont alors retrouvées dans les profils de densité d'énergie menant aux dépôts d'énergie dans le matériau. Des impulsions avec une durée de 300 fs ont été ensuite considérées. Les durées plus importantes de ces impulsions retardent principalement les effets de l'ionisation par impact et donc permettent une augmentation des densités électroniques sur l'ensemble de l'axe de propagation du laser. Une augmentation de l'énergie laser absorbée a alors été observée et l'établissement de dépôts d'énergie plus homogènes, bien que toujours constitués d'un pic et d'un plateau, ont été mis en évidence. De manière générale, la stabilité du faisceau de Bessel-Gauss a été améliorée avec l'augmentation de la durée d'impulsion.

Dans un troisième temps, les dépôts d'énergie prédits ont été introduits dans la simulation thermo-élasto-plastique. Dans le cas des impulsions de durée de 150 fs, pour des intensités initiales trop faibles, seules de légères variations de densité du matériau et donc de son indice de réfraction, ont été observées. Pour une intensité intermédiaire, la formation d'un micro-canal inhomogène a été simulé, exhibant des variations de densités importantes dues aux oscillations observées dans le dépôt d'énergie et à la différence importante de température induite entre le pic central d'énergie et le plateau. Pour des intensités supérieures, seule une micro-cavité est induite par le pic central de température ; le plateau quant à lui génère des variations de l'indice de réfraction menant alors à la formation d'un guide d'onde. Enfin, pour des impulsions avec des durées de 300 fs, la formation d'un micro-canal homogène est observée dans le cas d'intensités pas trop élevées. La différence de températures induite entre le pic et le plateau ainsi que les variations de températures dans le plateau dues aux oscillations observées dans le dépôt d'énergie calculé, sont en effet en partie perdues lors des déformations du matériau. Pour des intensités plus importantes, un micro-canal inhomogène est généré à cause de l'augmentation de l'énergie dans le pic du dépôt. Ainsi, la taille de l'entrée du canal s'élargit tandis que le reste du canal reste homogène. Là encore, les résultats ont été comparés à l'expérience et sont en bon accord.

Ainsi, durant cette thèse, une modélisation d'un certain nombre de processus physiques, permettant de prédire notamment les dépôts d'énergie d'impulsions laser femto-secondes et de calculer les contraintes et les déformations induites dans les matériaux diélectriques, a été menée. Notamment, un modèle de thermo-élasto-plasticité 2D a été développé et introduit dans le code hydrodynamique CHIC, contribuant à son évolution.

Puis les dépôts d'énergie calculés via le code ARCTIC ont été introduits dans CHIC afin d'obtenir des prédictions plus réalistes de l'interaction laser-diélectrique. Cette modélisation fut appuyée par différentes études de la structuration de la matière dans les cas de la génération de nano-cavités et de micro-canaux dans la silice fondue, en bon accord avec les observations expérimentales, afin de comprendre et de décrire la formation de telles structures.

En perspective de ce travail, un effort devrait tout d'abord être porté sur le développement d'une simulation numérique thermo-élasto-plastique dans une géométrie 3D, ou au moins axi-symétrique. De cette manière, l'ensemble des contraintes du tenseur de Cauchy seraient considérées afin de prédire et quantifier d'une manière plus réaliste les déformations induites par un laser femtoseconde dans les matériaux. Également, différents critères de plasticité devraient être pris en compte en fonction des cas considérés. Par exemple, des critères de plasticité dépendant de la pression thermodynamique pourraient être utilisés afin de rendre compte des phénomènes de densification de la silice. De plus, des études en régime mutli-impulsionnel pourraient être menées ainsi que des études sur la formation et l'interaction de structures induites par plusieurs faisceaux de Bessel-Gauss. La prise en compte des propriétés physiques du matériau en fonction de la direction dans l'espace (plans cristallographiques) pourrait être aussi une bonne perspective afin d'étudier la déformation de matériaux cristallins anisotropes, tels que le saphir. Enfin, une généralisation du modèle d'élasto-plasticité vers un modèle de visco-élasto-plasticité pourrait être envisagée afin d'étudier des cas d'interaction laser-diélectrique où la viscosité du matériau ne peut-être négligée et ainsi rendre compte de phénomène particulier. Par exemple, la déformation de la silice par un laser non fortement focalisé, induisant des gradients de température moins importants dans le solide, devrait tenir compte de la viscosité du matériau.

Annexe A

Fonctions spéciales

Intégrales elliptiques

L'intégrale elliptique complète de première espèce s'écrit [137] :

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} d\theta \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} = \int_0^1 dx \frac{1}{\sqrt{(1 - x^2)(1 - k^2 x^2)}} \quad (\text{A.1})$$

L'intégrale elliptique complète de seconde espèce s'écrit [137] :

$$E(k) = \int_0^{\pi/2} d\theta \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta} = \int_0^1 dx \frac{\sqrt{1 - k^2 x^2}}{\sqrt{1 - x^2}} \quad (\text{A.2})$$

Fonction de Dawson

La fonction (ou intégrale) de Dawson s'exprime de la manière suivante :

$$\Phi(x) = \int_0^x dt \exp(t^2 - x^2) \quad (\text{A.3})$$

Fonction erreur complémentaire

La fonction erreur complémentaire est de la forme :

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dt \exp(-t^2) \quad (\text{A.4})$$

Annexe B

Modèles de viscoélasticité linéaire

Modèle de Maxwell

Le modèle de Maxwell modélise le comportement linéaire d'un fluide viscoélastique [70]. Il peut être représenté par l'association en série d'un ressort et d'un amortisseur (Fig. B.1). L'équation rhéologique s'écrit dans ce cas :

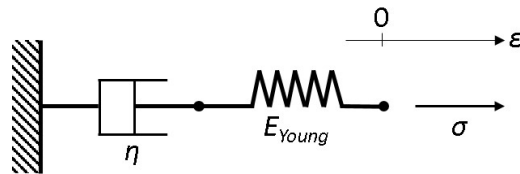


FIGURE B.1 – Schéma du modèle de Maxwell

$$\sigma(t) + \frac{\eta}{E_{Young}} \frac{d\sigma(t)}{dt} = \eta \frac{d\varepsilon(t)}{dt} \quad (\text{B.1})$$

En posant tout d'abord $\sigma(t) = \sigma_0$, on en déduit l'expression de la souplesse de fluage :

$$F(t) = \frac{t}{\eta} + \frac{1}{E_{Young}} \quad (\text{B.2})$$

Puis en posant $\varepsilon(t) = \varepsilon_0$ on en déduit l'expression de la rigidité de fluage :

$$R(t) = E_{Young} e^{-\frac{t}{T_M}} \quad (\text{B.3})$$

où $T_M = \frac{\eta}{E_{Young}}$ est le temps caractéristique du modèle.

Modèle de Kelvin-Voigt

Le modèle de Kelvin-Voigt modélise le comportement linéaire d'un solide viscoélastique [70]. Il peut être représenté par l'association en parallèle d'un ressort et d'un amortisseur (Fig. B.2). L'équation rhéologique s'écrit dans ce cas :

$$\sigma(t) = E_{Young} \varepsilon(t) + \eta \frac{d\varepsilon(t)}{dt} \quad (\text{B.4})$$

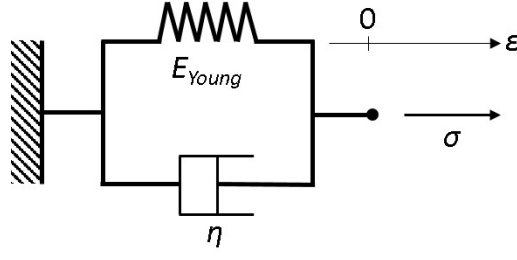


FIGURE B.2 – Schéma du modèle de Kelvin-Voigt

Dans ce modèle, l'expression de la souplesse de fluage est :

$$F(t) = \frac{1}{E_{Young}} \left[1 - e^{-\frac{t}{T_K}} \right] \quad (B.5)$$

où $T_K = \frac{\eta}{E_{Young}}$ est le temps caractéristique du modèle. La rigidité de fluage est quant à elle une constante :

$$R(t) = E_{Young} \quad (B.6)$$

Modèle de Burger

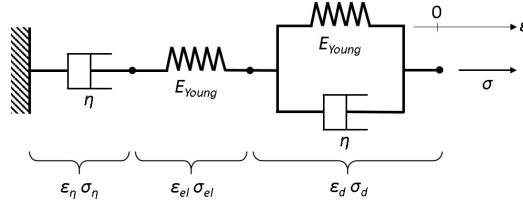


FIGURE B.3 – Schéma du modèle de Burger ; contraintes et déformations de chaque module

En supposant, dans un souci de simplicité, les raideurs de chaque ressort et les viscosités de chaque amortisseur respectivement égales à E_{Young} et η (Fig. B.3), les lois de comportement de chaque module du modèle de Burger [70] sont les suivantes :

$$\sigma_{el} = E_{Young} \varepsilon_{el} \quad (B.7)$$

$$\sigma_{\eta} = \eta \dot{\varepsilon}_{\eta} \quad (B.8)$$

$$\sigma_d = E_{Young} \varepsilon_d + \eta \dot{\varepsilon}_d \quad (B.9)$$

Ces différents modules étant associés en série, la déformation totale et la contrainte totale du système s'écrivent :

$$\varepsilon = \varepsilon_{el} + \varepsilon_{\eta} + \varepsilon_d \quad (B.10)$$

$$\sigma = \sigma_{el} = \sigma_{\eta} = \sigma_d \quad (B.11)$$

Le calcul de la souplesse de fluage dans un premier temps s'obtient en posant $\sigma = \sigma_0$. Dans ce cas on obtient :

$$\varepsilon(t) = \frac{\sigma_0}{E_{Young}} + \frac{\sigma_0}{\eta} t + \frac{\sigma_0}{E_{Young}} \left[1 - e^{-\frac{E_{Young}}{\eta} t} \right] \quad (B.12)$$

et on en déduit $F(t)$.

Dans un deuxième temps le calcul de la rigidité de fluage est moins rapide. En dérivant l'Eq. (B.10) et en y injectant les Eqs. (B.7, B.8 et B.9) on obtient :

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\sigma}{\eta} + 2 \frac{\dot{\sigma}}{E_{Young}} - \frac{\eta}{E_{Young}} \ddot{\varepsilon}_d \quad (\text{B.13})$$

En dérivant deux fois l'Eq. (B.7) et l'Eq. (B.8) et en remplaçant dans l'Eq. (B.10) également dérivée deux fois, on obtient :

$$\ddot{\varepsilon}_d = \ddot{\varepsilon} - \frac{\ddot{\sigma}}{E_{Young}} - \frac{\dot{\sigma}}{\eta} \quad (\text{B.14})$$

En remplaçant $\ddot{\varepsilon}_d$ dans l'Eq. (B.13) par la relation précédente, on en déduit l'équation rhéologique du modèle :

$$\frac{d}{dt} \left[\varepsilon + \frac{\eta}{E_{Young}} \dot{\varepsilon} \right] = \frac{\sigma}{\eta} + 3 \frac{\dot{\sigma}}{E_{Young}} + \frac{\eta}{E_{Young}^2} \ddot{\sigma} \quad (\text{B.15})$$

Pour $\varepsilon(t) = \varepsilon_0$ on obtient l'équation différentielle du second ordre suivante :

$$\ddot{\sigma} + 3 \frac{E_{Young}}{\eta} \dot{\sigma} + \frac{E_{Young}^2}{\eta^2} \sigma = 0 \quad (\text{B.16})$$

En posant les conditions $\sigma(0) = \sigma_0$ et $\dot{\sigma}(0) = \frac{E_{Young}}{\eta} \sigma_0$ on obtient la solution :

$$\sigma(t) = \frac{\sigma_0}{a-b} \left[\left(a - \frac{E_{Young}}{\eta} \right) e^{bt} - \left(b - \frac{E_{Young}}{\eta} \right) e^{at} \right] \quad (\text{B.17})$$

où a et b sont les racines de l'équation :

$$x^2 + 3 \frac{E_{Young}}{\eta} x + \frac{E_{Young}^2}{\eta^2} = 0 \quad (\text{B.18})$$

$$a = -\frac{1}{2} (3 + \sqrt{5}) \frac{E_{Young}}{\eta} \quad (\text{B.19})$$

et

$$b = -\frac{1}{2} (3 - \sqrt{5}) \frac{E_{Young}}{\eta} \quad (\text{B.20})$$

Annexe C

Critères de plasticité

Critères de plasticité indépendants de la pression hydrodynamique

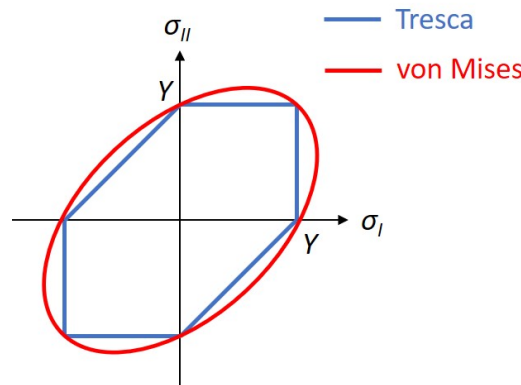


FIGURE C.1 – Domaines d'élasticité dans l'espace des contraintes principales selon les critères de Tresca et de von Mises.

Critère de Tresca

Le critère de Tresca [138], ou critère de la contrainte de cisaillement maximale, est un critère de plasticité purement mécanique. Il traite de la résistance des matériaux aux efforts en cisaillement au travers de l'utilisation du cercle de Mohr et des contraintes principales (voir section 1.2.6). En sachant que la contrainte de cisaillement maximale peut être exprimée dans le cadre des contraintes planes comme $\tau_{max} = \frac{1}{2}(\sigma_I - \sigma_{II})$, les conditions de déformation élastique s'écrivent dans ce cas : $|\sigma_I| \leq Y$ et $|\sigma_{II}| \leq Y$ si σ_I et σ_{II} sont de même signes ; ou $|\sigma_I - \sigma_{II}| \leq Y$ si σ_I et σ_{II} sont de signes opposés.

Critère de von Mises

Le critère de von Mises, ou critère de l'énergie de déformation élastique, est un critère énergétique. Un solide, lorsqu'il est déformé par une sollicitation extérieure, tend à stocker de l'énergie interne, tel un ressort (modèle d'élasticité linéaire 1.2.2). Cette énergie peut s'écrire de manière générale $U_{el} = \frac{1}{2}\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}$ dans la convention de sommation d'Einstein

($U_{el} = \frac{1}{2}\sigma\varepsilon$ en traction-compression et $U_{el} = \frac{1}{2}\tau\gamma$ en cisaillement) et peut être séparée en deux termes, de la même manière que le tenseur des contraintes :

$$U_{el} = U_{volume} + U_{deformation} \quad (C.1)$$

où U_{volume} est l'énergie de variation du volume sans déformation et $U_{deformation}$ est l'énergie de déformation élastique sans changement de volume. Dans le cas de milieux isotropes pour lesquels la pression P est supposée ne pas induire de déformations plastiques, le critère de plasticité ne porte que sur $U_{deformation}$ qui peut s'écrire :

$$U_{deformation} = \frac{1}{2\mu} Tr(\bar{\bar{S}}.\bar{\bar{S}}) \quad (C.2)$$

ou encore en fonction des contraintes principales :

$$U_{deformation} = \frac{1}{12\mu} [(\sigma_I - \sigma_{II})^2 + (\sigma_{II} - \sigma_{III})^2 + (\sigma_{III} - \sigma_I)^2] \quad (C.3)$$

La déformation est élastique dans le cas où cette énergie ne dépasse pas une certaine énergie limite. En prenant comme sollicitation de référence la traction uniaxiale avec $\sigma_I = Y$, $\sigma_{II} = \sigma_{III} = 0$, tout en restant général, on obtient la valeur de cette énergie limite :

$$U_{deformation}^{limite} = \frac{1}{6\mu} Y^2 \quad (C.4)$$

Finalement, on obtient comme critère de plasticité :

$$\sqrt{\frac{3}{2} Tr(\bar{\bar{S}}.\bar{\bar{S}})} \leq Y \quad (C.5)$$

Les domaines d'élasticités dans l'espace des contraintes principale selon ces deux critères sont représenté sur la Fig. C.1.

Critères de plasticité dépendants de la pression hydrodynamique

Des observations de la silice fondue (amorphe), après sollicitation, ont montré un phénomène de densification permanente [139], *i.e.* un changement de volume permanent dû au régime de plasticité particulier de ce matériau. Ainsi, en plus de la déformation plastique due au cisaillement, il semblerait que la pression hydrostatique P dans le matériau puisse également induire un régime de plasticité. Afin de prendre en compte ce phénomène, une extension du critère de plasticité de von Mises a été proposé par G. Kermouche [77, 140]. Pour une sollicitation en compression (pression positive), la fonction de plasticité s'écrit :

$$f = \left(\frac{\sigma_{eq}}{Y}\right) + \left(\frac{P}{P_{lim}}\right) - 1 \quad (C.6)$$

où P_{lim} est la limite plastique hydrostatique. Pour une sollicitation en traction (pression négative), la fonction de plasticité du critère de von Mises est assumée :

$$f = \sigma_{eq} - Y \quad (C.7)$$

Annexe D

Validation de la diffusion de la chaleur monotempérature

Dans cette annexe est présenté le schéma numérique de la prédiction de la diffusion de la chaleur et sa validation. L'équation de la chaleur à une température (température du matériau) peut s'écrire de manière générale de la forme suivante :

$$\rho c_V \frac{dT}{dt} = \Delta (\lambda_{th} T) \quad (D.1)$$

En notant x et y les coordonnées cartésiennes avec i et j les numéros de maille associés à chaque direction de l'espace, et en supposant la conductivité thermique λ_{th} constante (voir Sec. 2.2), le schéma numérique explicite utilisé dans le code de simulation pour la résolution de cette équation, s'écrit :

$$\rho c_V \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{\lambda_{th}}{\rho c_V} \left[\frac{T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right] \quad (D.2)$$

avec $\Delta x = \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2}$ et $\Delta y = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2}$

Ce schéma a été validé dans le cas où aucun processus hydrodynamique n'était en jeu, en comparant les résultats obtenus avec une solution analytique. Ce cas correspond à la diffusion de la chaleur dans un solide à partir d'une source placée au centre d'un domaine 2D de $100 \mu\text{m}$ de côté (100×100 mailles), initialement de forme gaussienne. Celle-ci a une température initiale maximale T_{max} de 5.10^5 K (amplitude de la gaussienne) avec une largeur initiale à mi-hauteur de $20 \mu\text{m}$ (soit $r_0 = 10 \mu\text{m}$ le rayon initial). Une solution analytique à ce problème est de la forme [100] :

$$T(r, t) = \frac{T_{max}}{2} \left[\text{erf} \left(\frac{r_0 - r}{2\sqrt{\kappa t}} \right) + \text{erf} \left(\frac{r_0 + r}{2\sqrt{\kappa t}} \right) \right] + T_{lim} \quad (D.3)$$

où erf est la fonction erreur, t correspond au temps, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ est la coordonnée radiale 2D, $\kappa = \frac{\lambda_{th}}{\rho c_V}$ est la diffusivité thermique et T_{lim} est une condition limite ici égale à la température ambiante du matériau, soit 300 K.

L'évolution temporelle du profil radial de température comparée à la solution analytique est présentée sur la Fig. D.1 Le profil de température diminue de 5.10^5 K à moins de 8.10^4 K et la chaleur se diffuse dans le matériau sur une longueur de diffusion de $2.5 \mu\text{m}$, en $10 \mu\text{s}$. Les résultats de la simulation sont en bon accord avec la solution analytique. Les erreurs relatives moyennes ont été calculées (non-montrées ici). Celles-ci

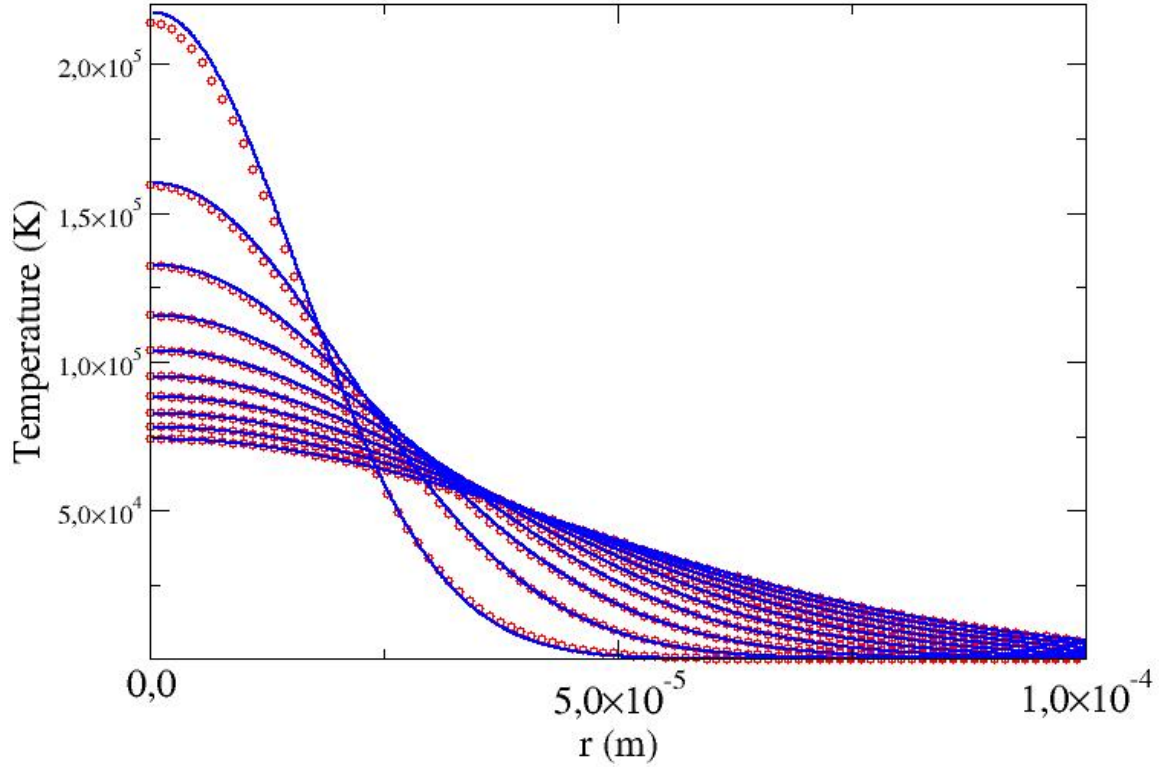


FIGURE D.1 – Evolution temporelle du profil radial de température prédit par le schéma numérique explicite de diffusion de la chaleur (traits bleus) et solutions analytiques (cercles rouges) de 1 à 10 μs . Les erreurs relatives moyennes calculées (non montrées) diminuent au cours du temps et sont de l'ordre de 10^{-1} à 10^{-3} %. De plus, elles diminuent lorsque le nombre de mailles augmente, les rendant négligeables. Ceci valide donc le schéma numérique développé et inclu dans la simulation.

sont de l'ordre de 10^{-1} % à $t = 1 \mu\text{s}$ et diminuent au cours du temps jusqu'à 10^{-3} % à $t = 10 \mu\text{s}$. De plus, l'erreur relative diminue avec le nombre de mailles. Pour un domaine avec 500×500 mailles, l'erreur relative moyenne est de l'ordre de 10^{-2} % à $t = 1 \mu\text{s}$ et diminuent au cours du temps jusqu'à 10^{-4} % à $t = 10 \mu\text{s}$, puisque au départ les gradients de températures sont important et la distribution est répartie sur quelques mailles. Avec le temps, la distribution de température s'étale sur un plus grand nombre de maille rendant alors plus précise la résolution de l'équation de la chaleur. Les erreurs relatives moyennes étant négligeables, le schéma numérique développé et inclu dans la simulation est donc bien validé.

Le couplage de la diffusion de la chaleur au modèle élasto-plastique a été validé également par l'utilisation du code ESTHER [80–84] fournissant les mêmes résultats pour des cas identiques.

Annexe E

Modèle de prédiction du rayon de cavité final

Dans cette annexe, un modèle simple de prédiction du rayon final d'une cavité formée par un laser femtoseconde est proposé. Une section radiale du volume de matériau solide

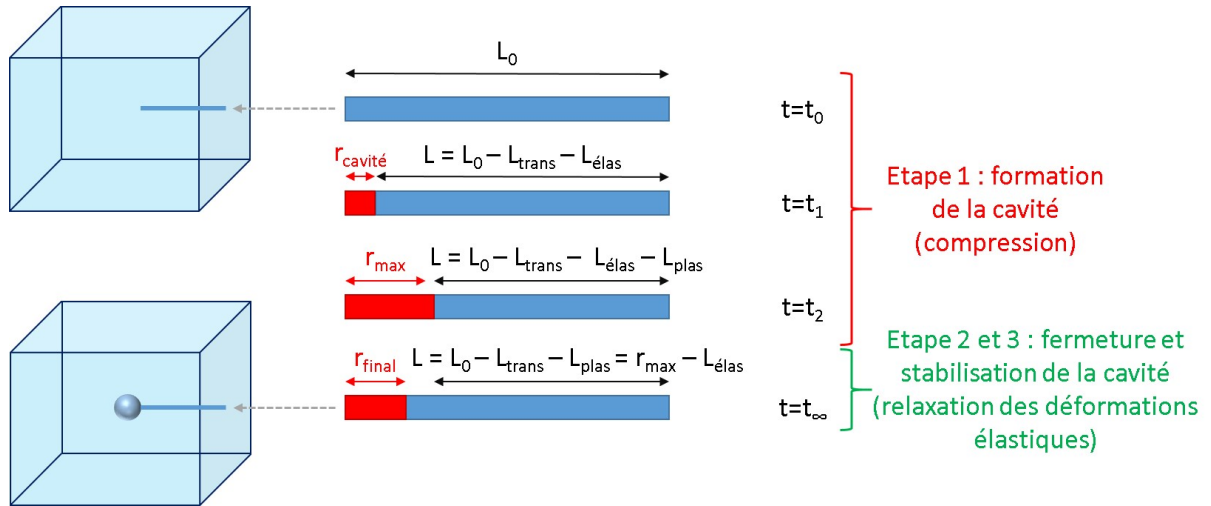


FIGURE E.1 – Illustration du modèle de prédiction du rayon de cavité final en fonction de la valeur du rayon maximal de cavité et des déformations élastiques totale calculés pendant la simulation. Ce modèle valide les arguments avancés dans la description de la dynamique de formation de la cavité et permet un gain de temps de calcul.

est considéré dans ce modèle, sous l'hypothèse que les phénomènes décrits soient les mêmes dans toute les directions (déformations homogènes). Cette section solide a une longueur initiale L_0 à $t = t_0$. À $t = t_1$ la section est comprimée par l'onde de choc durant la phase d'expansion de la cavité en formation (étape 1). Le matériau subit des déformations tout d'abord élastiques ainsi que des changements de phase. La section a donc à cette instant une longueur (de matériau solide) $L = L_0 - L_{trans} - L_{élas}$ où L_{trans} est la longueur de matériau solide ayant subit un changement de phase et $L_{élas}$ est la longueur totale de déformation élastique. À $t = t_2$, le matériau subit en plus des déformations plastiques et dans ce cas $L = L_0 - L_{trans} - L_{élas} - L_{plas}$ où L_{plas} est la longueur totale de déformation plastique. À $t = t_3$, l'onde n'induit plus de déformations permanentes autour de la cavité et devient une onde élastique. Le rayon de cavité maximal est donc atteint et vaut $r_{max} = L_{trans} + L_{élas} + L_{plas}$. Enfin, après l'étape de fermeture de la cavité où les déformations

élastiques sont relaxées (étape 2), la cavité se stabilise (étape 3) avec un rayon final $r_{final} = r_{max} - L_{elas}$. De cette manière, une estimation de la taille finale des cavités est calculée en fonction du rayon final atteint et des déformations élastiques induites.

Bibliographie

- [1] A. Einstein. *Verh. Deutsch. Phys. Gesell.*, 18 :318–323, 1916. [9](#)
- [2] A. Einstein. *Phys. Z.*, 18 :121, 1917. [9](#)
- [3] J. P. Gordon, H. J. Zeiger, and C. H. Townes. *Phys. Rev.*, 99 :1264, 1955. [9](#)
- [4] T. H. Maiman. *Nature*, 187 :493–494, 1960. [9](#)
- [5] R. M. White. *J. Appl. Phys.*, 34 :3359, 1963. [9](#)
- [6] L.E. Hargrove, R. L. Fork, and M. A. Pollak. *Appl. Phys. Lett.*, 5 :4, 1964. [9](#)
- [7] W. M. Steen and J. Mazumder. *Laser Material Processing*. Springer London, 2010. [9](#)
- [8] R.L. Fork, B.I. Green, and C. V. Shank. *Appl. Phys. Lett.*, 38 :671, 1981. [9](#)
- [9] D. Strickland and G. Mourou. *Opt. Comm.*, 56 :219, 1985. [9](#)
- [10] S. Haroche and J. M. Raimond. *Exploring the Quantum : Atoms, Cavities, and photons*. Oxford University Press, 2006. [10](#)
- [11] B. C. Barish and R. Weiss. *Physics Today*, 52 :44, 1999. [10](#)
- [12] F. Courvoisier, J. Zhang, M. K. Bhuyan, M. Jacquot, and J. M. Dudley. *Appl. Phys. A*, 112 :29–34, 2013. [10](#), [90](#), [91](#), [92](#), [93](#), [120](#)
- [13] A. Courvoisier, M. J. Booth, and P. S. Salter. *Appl. Phys. Lett.*, 109 :031109, 2016. [10](#)
- [14] Y. Bellouard, A. Champion, B. McMillen, S. Mukherjee, R. R. Thomson, C. Pépin, P. Gillet, and Y. Cheng. *Optica*, 3 :1285, 2016. [10](#), [51](#)
- [15] E. N. Glezer and E. Mazur. *Appl. Phys. Lett.*, 71 :882, 1997. [10](#), [50](#), [51](#), [55](#), [73](#), [74](#)
- [16] S. Juodkazis, K. Nishimura, S. Tanaka, H. Misawa, E. Gamaly, B. Luther-Davies, L. Hallo, Ph. Nicolaï, and V. T. Tikhonchuk. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :166101, 2006. [10](#), [11](#), [50](#), [51](#), [52](#), [53](#), [55](#), [56](#), [57](#), [61](#), [64](#), [66](#), [72](#), [114](#)
- [17] E. G. Gamaly, S. Juodkazis, K. Nishimura, H. Misawa, B. Luther-Davies, L. Hallo, P. Nicolai, and V. T. Tikhonchuk. *Phys. Rev. B*, 73 :214101, 2006. [10](#), [11](#), [12](#), [50](#), [51](#), [52](#), [53](#), [55](#), [57](#), [61](#), [64](#), [66](#), [69](#), [72](#), [114](#)
- [18] L. Hallo, A. Bourgeade, V. T. Tikhonchuk, C. Mézel, and J. Breil. *Phys. Rev. B*, 76 :024101, 2007. [10](#), [12](#), [53](#)
- [19] C. Mézel, L. Hallo, A. Bourgeade, D. Hébert, V. T. Tikhonchuk, B. Chimier, B. Nkonga, G. Schurtz, and G. Travaillé. *Phys. Plasmas*, 15 :093504, 2008. [10](#), [12](#), [53](#)
- [20] A. Vailionis, E. G. Gamaly, V. Mizeikis, W. Yang, A. V. Rode, and S. Juodkazis. *Nature communication*, 2 :445, 2011. [10](#), [50](#), [51](#), [52](#), [61](#), [64](#), [66](#)
- [21] K. M. Davis, K. Miura, N. Sugimoto, and K. Hirao. *Opt. Lett.*, 21 :1729, 1996. [10](#)

- [22] Y. Shimotsuma, P. G. Kazansky, J. Qiu, and K. Hirao. *Phys. Rev. Lett.*, 91 :247405, 2003. [10](#)
- [23] S. Juodkazis, A. V. Rode, E. G. Gamaly, S. Matsuo, and H. Misawa. *Appl. Phys. B*, 77 :361, 2003. [10](#)
- [24] R. R. Gattass and E. Mazur. *Nat. Photonics*, 2 :219, 2008. [10](#)
- [25] J. Gottmann, D. Wortmann, and M. Hörstmann-Jungemann. *Appl. Surf. Sci.*, 255 :5641, 2009. [10](#)
- [26] G. Cheng, K. Mishchik, C. Mauchair, E. Audouard, and R. Stoian. *Opt. Express*, 17 :9515, 2009. [10](#)
- [27] K. Mishchik, G. Cheng, G. Huo, I. M. Burakov, C. Mauchair, A. Mermillod-Blondin, A. Rosenfeld, Y. Ouerdane, A. Boukenter, O. Parriaux, and R. Stoian. *Opt. Exp.*, 24809 :18, 2010. [10](#)
- [28] J. Bonse, J. Krüger, S. Höhm, and A. Rosenfeld. *J. Laser Appl.*, 24 :042006, 2012. [10](#)
- [29] S. Richter, A. Plech, M. Steinert, M. Heinrich, S. Döring, F. Zimmermann, U. Peschel, E. B. Kley, A. Tünnermann, and S. Nolte. *Laser Photon. Rev.*, 6 :787, 2012. [10](#)
- [30] M. Kumkar, L. Bauer, S. Russ, M. Wendel, J. Kleiner, D. Grossman, and K. Bergner S. Nolte. *Proc. SPIE*, 8972 :897214, 2014. [10](#)
- [31] R. Buividas, M. Mikutis, and S. Juodkazis. *Prog. Quantum Electron.*, 38 :119, 2014. [10](#)
- [32] Y. Liao, J. Ni, L. Qiao, M. Huang, Y. Bellouard, K. Sugioka, and Y. Cheng. *Optica*, 2 :329, 2015. [10](#)
- [33] F. Zimmermann, A. Plech, S. Richter, A. Tünnermann, and S. Nolte. *Laser Photon. Rev.*, 10 :327, 2016. [10](#), [51](#), [72](#), [73](#), [74](#), [79](#), [84](#), [85](#), [86](#)
- [34] F. Hendricks, V.V. Matyilitsky, M. Domke, and H. P. Huber. *Proc. SPIE*, 9740 :97401A, 2016. [10](#)
- [35] M. K. Bhuyan, M. Somayaji, A. Mermillod-Blondin, F. Bourquard, J. P. Colombier, and R. Stoian. *Optica*, 4 :951, 2017. [10](#)
- [36] M. Sakakura and M. Terazima. *Phys. Rev. B*, 71 :024113, 2005. [12](#), [54](#)
- [37] M. Sakakura, M. Terazima, Y. Shimotsuma, K. Miura, and K. Hirao. *Opt. Express*, 15 :5674, 2007. [12](#), [54](#)
- [38] D. Hébert, L. Hallo, L. Voisin, T. Desanlis, A. Galtié, B. Birel, C. Maunier, P. Mercier, and G. Duchateau. *J. Appl. Phys.*, 109 :123527, 2011. [12](#), [54](#)
- [39] N. M. Bulgakova, V. P. Zhukov, S. V. Sonina, and Y. P. Meshcheryakov. *J. Appl. Phys.*, 118 :233108, 2015. [12](#), [54](#)
- [40] S. Najafi, R. Massudi, A. Ajami, C. S. R. Nathala, W. Husinsky, and A. S. Arabanian. *J. Appl. Phys.*, 120 :153102, 2016. [12](#), [54](#)
- [41] S. Najafi, A. S. Arabanian, and R. Massudi. *J. Phys. D : Appl. Phys.*, 49 :255101, 2016. [12](#), [54](#)
- [42] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College Publishing, 1976. [18](#)
- [43] E. G. Gamaly. *Phys. Rep.*, 508 :91–243, 2011. [19](#), [29](#), [53](#)

- [44] R. Beuton, B. Chimier, J. Breil, D. Hébert, P. H. Maire, and G. Duchateau. *J. Appl. Phys.*, 122 :203104, 2017. [20](#)
- [45] R. Beuton, B. Chimier, J. Breil, D. Hébert, K. Mishchik, J. Lopez, P. H. Maire, and G. Duchateau. *Appl. Phys. A*, 124 :324, 2018. [20](#)
- [46] J. R. Peñano, P. Sprangle, B. Hafizi, W. Manheimer, and A. Zigler. *Phys. Rev. E*, 72 :036412, 2005. [21](#), [22](#), [27](#)
- [47] R. W. Boyd. *Nonlinear Optics*. Academic Press, 2008. [22](#)
- [48] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Fluid Mechanics*. Pergamon Press, Oxford, 1987. [22](#)
- [49] G. K. Batchelor. *An Introduction to Fluid Mechanics*. Cambridge University Press, 2000. [22](#)
- [50] E. G. Gamaly and A. V. Rode. *J. Opt. Soc. Am. B*, 31 :36–43, 2014. [23](#)
- [51] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii. *Electrodynamics of Continuous Media*. Pergamon Press, Oxford, 1984. [23](#)
- [52] D. Arnold, E. Cartier, and D. J. DiMaria. *Phys. Rev. B*, 45 :1477–1480, 1992. [25](#), [94](#)
- [53] B. C. Stuart, M. D. Feit, S. Herman, A. M. Rubenchik, B. W. Shore, and M. D. Perry. *Phys. Rev. B*, 53 :1749–1761, 1996. [25](#), [94](#)
- [54] M. Li, S. Menon, J. P. Nibarger, and G. N. Gibson. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :2394–2397, 1999. [25](#), [94](#)
- [55] L. Sudrie, A. Couairon, M. Franco, B. Lamouroux, B. Prade, S. Tzortzakis, and A. Mysyrowicz. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :186601, 2002. [25](#), [94](#)
- [56] W. Franz. *Z. Naturforsch.*, 13a :484–489, 1958. [25](#)
- [57] L. V. Keldysh. *Soviet Phys. JETP*, 788-790 :186601, 1958. [25](#)
- [58] M. Gertszov, M. Spanner, D. M. Rayner, and P. B. Corkum. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, 43 :131002, 2010. [25](#)
- [59] A. V. Mitrofanov, A. J. Verhoef, E. E. Serebryannikov, J. Lumeau, L. Glebov, A. M. Zheltikov, and A. Baltuska. *Phys. Rev. Lett.*, 106 :147401, 2011. [25](#)
- [60] L.V. Keldysh. *Sov. Phys. JETP*, 20 :1307, 1965. [25](#)
- [61] S. Leyder. *Ionisation nonlinéaire dans les matériaux diélectriques et semiconducteurs par laser femtoseconde accordable dans le proche infrarouge*. PhD thesis, Université Aix-Marseille, 2013. [26](#)
- [62] A. C. Tien, S. Backus, H. Kapteyn, M. Murnane, and G. Mourou. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :3883, 1999. [26](#)
- [63] A. Kaiser, B. Rethfeld, M. Vicanek, and G. Simon. *Phys. Rev. B*, 61 :11437, 2000. [27](#)
- [64] B. Rethfeld. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :209901, 2004. [27](#)
- [65] D. Arnold and E. Cartier. *Phys. Rev. B*, 46 :15102, 1992. [27](#)
- [66] W. Shockley and W. T. Read. *Phys. Rev.*, 87 :835–842, 1952. [28](#)
- [67] R. T. Williams and K. S. Song. *J. Phys. Chem. Solids*, 51 :679–716, 1990. [28](#)
- [68] Lord Rayleigh. *Proc. Lon. Math. Soc.*, 17 :4–11, 1885. [31](#)

- [69] A. E. H. Love. *Some Problems of Geodynamics*. Cambridge University Press, 1911. [31](#)
- [70] M.A. Meyers and K. K. Chawla. *Mechanical Behavior of Materials*. Cambridge University Press, 2008. [32](#), [131](#), [132](#)
- [71] E. B. Shand. *Modern Materials*, 6 :247–317, 1968. [34](#)
- [72] M. L. Wilkins. *Methods in Computational Physics, volume 3, chapter Calculation of Elastic-Plastic Flow, pages 211-263*. Academic Press, 1964. [35](#)
- [73] F. Irgens. *Continuum Mechanics*. Springer, 2008. [35](#), [37](#)
- [74] P. H. Maire, R. Abgrall, J. Breil, R. Loubere, and B. Rebourcet. *J. Comput. Phys.*, 235 :626, 2013. [35](#), [36](#), [55](#)
- [75] J. L. Fanchon. *Guide de mecanique : Sciences et technologies industrielles*. Nathan, 2001. [37](#), [41](#), [42](#)
- [76] R. von Mises. *Math. Phys.*, 1 :582, 1913. [38](#)
- [77] G. Kermouche, E. Barthel, D. Vandembroucq, and Ph. Dubujet. *Acta Mater.*, 56 :3222, 2008. [38](#), [136](#)
- [78] Y. Michel, J-M. Chevalier, C. Durin, C. Espinosa, F. Malaise, and J-J. Barrau. *J. Phys. IV France*, 134 :1077, 2006. [38](#)
- [79] A. E. Gleason, C. A. Bolme, H. J. Lee, B. Nagler E. Galtier, D. Milathianaki, J. Hawreliak, R. G. Kraus, J. H. Eggert, D. E. Fratanduono, G. W. Collins, R. Sandberg, W. Yang, and W. L. Mao. *Nat. Commun.*, 6 :8191, 2015. [38](#)
- [80] J. P. Colombier, P. Combis, F. Bonneau, R. Le Harzic, and E. Audouard. *Phys. Rev. B*, 71 :165406, 2005. [38](#), [55](#), [138](#)
- [81] P. M. Leguay, A. Lévy, B. Chimier, F. Deneuville, D. Descamps, C. Fourment, C. Goyon, S. Hulin, S. Petit, O. Peyrusse, J. J. Santos, P. Combis, B. Holst, V. Recoules, P. Renaudin, L. Videau, and F. Dorchie. *Phys. Rev. Lett.*, 111 :245004, 2013. [38](#), [55](#), [138](#)
- [82] S. Laffite, S. D. Baton, P. Combis, J. Clerouin, M. Koenig, V. Recoules, C. Rousseaux, and L. Videau. *Phys. Plasmas*, 21 :082705, 2014. [38](#), [55](#), [138](#)
- [83] G. Seisson, D. Hébert, I. Berton, J. M. Chevalier, L. Hallo, E. Lescoute, L. Videau, P. Combis, F. Guillet, M. Boustie, and L. Berthe. *Int. J. Impact Eng.*, 63 :18–28, 2014. [38](#), [55](#), [138](#)
- [84] Simon Bardy, B. Aubert, L. Berthe, P. Combis, D. Hébert, E. Lescoute, J. L. Rullier, and L. Videau. *Opt. Eng, SPIE*, 56 :011014, 2017. [38](#), [55](#), [138](#)
- [85] F. S. El’kin, V. V. Brazhkin, L.G. Khvostantsev, O.B. Tsiok, and A. G. Lyapin. *JETP Letters*, 75 :342, 2002. [39](#)
- [86] H. Mao, B. Sundman, Z. Wang, and S. K. Saxena. *J. Alloys Comp.*, 327 :253, 2001. [39](#)
- [87] Y. P. Meshcheryakov, M. V. Shugaev, T. Mattle, T. Lippert, and N. M. Bulgakova. *Appl. Phys. A*, 113 :521, 2013. [39](#)
- [88] A. A. Griffith. *Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A*, 221 :163, 1921. [40](#)
- [89] R. H. G. Parry. *Mohr circles, stress paths and geotechnics (2 ed.)*. Taylor & Francis, 2004. [42](#)
- [90] D. Spenlé and R. Gourhant. *Guide du calcul en mécanique*. 2003. [43](#), [76](#)

- [91] H. Rinne. *The Weibull distribution : A handbook*. CRC Press, 2008. [43](#), [44](#), [71](#)
- [92] W. Weibull. *J. Appl. Mech., Trans. ASME*, 163 :293–297, 1951. [43](#)
- [93] T. L. Anderson. *Fracture Mechanics - Fundamentals and Applications*. Taylor & Francis, 2005. [44](#)
- [94] C. A. Klein. *Opt. Engineering*, 48 :113401, 2009. [45](#)
- [95] T. Namazu, Y. Isono, and T. Tanaka. *J. Microelectromech. Syst.*, 9 :450–459, 2000. [45](#), [71](#)
- [96] E. N. Glezer, M. Milosavljevic, L. Huang, R. J. Finlay, T.-H. Her, J. P. Callan, and E. Mazur. *Opt. Lett.*, 21 :2023–2025, 1996. [51](#), [52](#), [73](#), [79](#), [85](#)
- [97] R. W. Hopper and D. R. Uhlmann. *J. Appl. Phys.*, 41 :4023, 1970. [51](#)
- [98] J. R. Asay and M. Shahinpoor. *High Pressure Shock Compression of Solids*. Springer, 1993. [53](#)
- [99] J. Breil, S. Galera, and P. H. Maire. *Comput. Fluids*, 46 :161, 2011. [54](#), [55](#)
- [100] H. S. Carslaw and J. C. Jaeger. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford Science Publications, 1959. [55](#), [137](#)
- [101] Z. Rosenberg. *J. Appl. Phys.*, 74 :752, 1993. [60](#)
- [102] A. Pedone, M. C. Menziani, and A. N. Cormack. *J. Phys. Chem. C*, 119 :25499, 2015. [70](#)
- [103] S. Reyn , G. Duchateau, L. Hallo, J. Y. Natoli, and L. Lamaign re. *Appl. Phys. A*, 119 :1317, 2015. [72](#)
- [104] K. Itoh, W. Watanabe, S. Nolte, and C. B. Schaffer. *MRS Bulletin*, 31 :620–625, 2006. [73](#)
- [105] R. R. Gattass and E. Mazur. *Nat. Photon.*, 2008 :219–225, 2008. [73](#)
- [106] J. Lopez, K. Mishchik, B. Chassagne, C. Javaux-Leger, C. Honninger, E. Mottay, and R. Kling. *in Proceedings of ICALEO*, pages 60–69, 2015. [73](#), [90](#)
- [107] W. Watanabe, T. Toma, K. Yamada, J. Nishii, K. Hayashi, and K. Itoh. *Opt. Lett.*, 25 :1669–1671, 2000. [73](#), [77](#)
- [108] F. Ahmed, M. S. Lee, H. Sekita, T. Sumiyoshi, and M. Kamata. *Appl. Phys. A*, 93 :189–192, 2008. [90](#)
- [109] J. Durnin. *J. Opt. Soc. Am. A*, 4 :651–654, 1987. [90](#)
- [110] J. Durnin, Jr J. J. Miceli, and J. H. Eberly. *Phys. Rev. Lett.*, 58 :1499–1501, 1987. [90](#)
- [111] J. Turunen, A. Vasara, and A. T. Friberg. *Appl. Opt.*, 27 :3959–3962, 1988. [90](#)
- [112] A. Vasara, J. Turunen, and A. T. Friberg. *J. Opt. Soc. Am. A*, 6 :1748–1754, 1989. [90](#)
- [113] C. Paterson and R. Smith. *Opt. Comm.*, 124 :121–130, 1996. [90](#)
- [114] M. K. Bhuyan, F. Courvoisier, P. A. Lacourt, M. Jacquot, R. Salut, L. Furfaro, and J. M. Dudley. *Appl. Phys. Lett.*, 97 :081102, 2010. [90](#), [91](#), [93](#)
- [115] L. Froehly, M. Jacquot, P. A. Lacourt, J. M. Dudley, and F. Courvoisier. *J. Opt. Soc. Am. A*, 31 :790–793, 2014. [90](#)
- [116] L. Rapp, R. Meyer, R. Giust, L. Furfaro, M. Jacquot, P. A. Lacourt, J. M. Dudley, and F. Courvoisier. *Sci. Rep*, 6 :34286, 2016. [90](#), [91](#), [93](#), [94](#)

- [117] J. Artl and K. Dholakia. *Opt. Comm.*, 177 :297–301, 2000. [90](#)
- [118] V. Jarutis, R. Paskauskas, and A. Stabinis. *Opt. Comm.*, 184 :105–112, 2000. [90](#)
- [119] O. Brzobohaty, T. Cizmar, and P. Zemanek. *Opt. Exp.*, 16 :12689, 2008. [90](#), [95](#), [97](#)
- [120] E. Stankevicius, M. Garliauskas, M. Gedvilas, and G. Raciukaitis. *Opt. Express*, 23 :28557, 2015. [90](#)
- [121] X. Liu, N. Sanner, M. Sentis, R. Stoian, W. Zhao, G. Cheng, and O. Utéza. *Appl. Phys. A*, 124 :206, 2018. [90](#), [91](#), [92](#)
- [122] M. Duocastella and C. B. Arnold. *Laser Photonics Rev.*, 6 :607–621, 2012. [90](#)
- [123] M. K. Bhuyan, P. K. Velpula, J. P. Colombier, T. Olivier, N. Faure, and R. Stoian. *Appl. Phys. Lett.*, 104 :021107, 2014. [90](#), [92](#), [93](#), [94](#), [115](#), [120](#)
- [124] M. Kumkar, L. Bauer, S. Russ, M. Wendel, J. Kleiner, D. Grossmann, K. Bergner, and S. Nolte. *Proc. SPIE*, 8972 :897214, 2014. [90](#)
- [125] M. K. Bhuyan, O. Jedrkiewicz, V. Sabonis, M. Mikutis, S. Recchia, A. Aprea, M. Bollani, and P. Di Trapani. *Appl. Phys. A*, 120 :443–446, 2015. [90](#)
- [126] R. Meyer, M. Jacquot, R. Giust, J. Safioui, L. Rapp, L. Furfaro, P. A. Lacourt, J. M. Dudley, and F. Courvoisier. *Opt. Lett.*, 42 :4307–4310, 2017. [90](#)
- [127] R. Meyer, R. Giust, M. Jacquot, J. M. Dudley, and F. Courvoisier. *Appl. Phys. Lett.*, 111 :231108, 2017. [90](#)
- [128] J. Dudutis, R. Stonys, G. Raciukaitis, and P. Gecys. *Opt. Express*, 26 :3627–3637, 2018. [90](#)
- [129] P. Polesana, M. Franco, A. Couairon, D. Faccio, and P. Di Trapani. *Phys. Rev. A*, 77 :043814, 2008. [90](#), [92](#), [120](#)
- [130] P. K. Velpula, M. K. Bhuyan, C. Mauchair, J. P. Colombier, and R. Stoian. *Opt. Engineering*, 53 :076108, 2014. [91](#), [94](#)
- [131] R. P. MacDonald, S. A. Boothroyd, T. Okamoto, J. Chrostowski, and B. A. Syrett. *Opt. Comm.*, 122 :169–177, 1996. [91](#), [96](#)
- [132] Z. Bouchal, J. Wagner, and M. Chlup. *Opt. Comm.*, 151 :207–211, 1998. [91](#), [96](#), [97](#), [98](#)
- [133] I. A. Litvin, M. G. McLaren, and A. Forbes. *Opt. Comm.*, 282 :1078–1082, 2009. [91](#), [96](#)
- [134] T. Ersoy, B. Yalizay, and S. Akturk. *J. Quantum Spec. Rad. Trans.*, 113 :2470–2475, 2012. [91](#), [96](#)
- [135] G. Wu and C. Tao. *Opt. Comm.*, 424 :86–90, 2018. [91](#), [96](#)
- [136] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*. Pergamon Press, New York, 1980. [97](#), [98](#)
- [137] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik. *Table of integrals, series, and products*. Academic Press, 1980. [129](#)
- [138] H. Tresca. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 59 :754, 1864. [135](#)
- [139] T. Yamadaya H. Sugiura. *J. Non-Cryst. Solids*, 144 :151, 1992. [136](#)
- [140] G. Kermouche, G. Guillonnet, J. Michler, J. Teisseire, and E. Barthel. *Acta Mater.*, 114 :146, 2016. [136](#)

Listes des communications

« Je comprends plus de 6 millions de formes de communications. »

C-3PO

Articles publiés et en préparation

R. Beuton, B. Chimier, J. Breil, D. Hébert, P. H. Maire et G. Duchateau, "Thermo-elasto-plastic simulations of femtosecond laser-induced structural modifications : Application to cavity formation in fused silica", *Journal of Applied Physics* **122**, 203104 (2017)

R. Beuton, B. Chimier, J. Breil, D. Hébert, K. Mishchik, J. Lopez, P. H. Maire et G. Duchateau, "Thermo-elasto-plastic simulations of femtosecond laser-induced multiple-cavity in fused silica", *Applied Physics A* **124**, 324 (2018)

R. Beuton *et al.*, "Multiscale modeling of laser induced material modifications by femtosecond Bessel beams", en préparation.

K. Mishchik, R. Beuton, O. Dematteo Caulier, S. Skupin, B. Chimier, G. Duchateau, B. Chassagne, R. Kling, C. Hönninger, E. Mottay, et J. Lopez, "Improved laser glass cutting by spatio-temporal control of energy deposition using bursts of femtosecond pulses", *Optics Express* **25**, 33271-33282 (2017)

Conférences internationales

COLA 2017 à Marseilles, FRANCE : Présentation orale "Thermo-elasto-plastic modeling of femtosecond laser-induced cavity in fused silica".

HPLA 2018 à Santa Fe, USA : Présentation orale "Thermo-elasto-plastic modeling of femtosecond laser-induced micro-structures in fused silica". Présentation d'un poster "Numerical simulation of femtosecond laser pulse propagation in dielectrics materials : evaluation of the energy deposition".

Conférences nationales

Laser'ApE 2017 (école thématique) à Nouan-le-Fuzelier, FRANCE : Présentation orale invité "Thermo-elasto-plastic modeling of femtosecond laser-induced cavity in fused silica".

ALPHA-RLH 2017 (journée du pôle de compétitivité) à Bordeaux, FRANCE : Présentation orale "Simulations thermo-élasto-plastiques de la formation de cavités multiples dans la silice induites par des impulsions lasers femtosecondes".

Écoles d'été

SLIMS 2016 à Venise, Italie : Présentation orale et poster : "Femtosecond laser-induced cavity in bulk silica : thermo-elasto-plastic simulations"

Résumé

Les lasers femtosecondes sont un outil efficace pour induire des modifications structurales localisées en volume dans les matériaux diélectriques. Initialement transparents, les diélectriques ne commencent à absorber efficacement l'énergie laser que lorsque l'intensité excède le seuil de claquage optique du matériau. Cette propriété, couplée à une durée d'impulsion femtoseconde plus courte que les temps caractéristiques de relaxation de la matière, permet d'obtenir un dépôt d'énergie précis et localisé dans le volume irradié. Pour modéliser la formation de telles structures, un modèle thermo-élasto-plastique en géométrie 2D plane, incluant la transition solide-liquide via un modèle de ramollissement, a été implémenté dans un code hydrodynamique lagrangien. Des études de la formation d'une cavité et de l'interaction de multiple cavités ont tout d'abord été réalisées en supposant un dépôt instantané d'énergie laser dans le volume d'une cible de silice fondue. La relaxation de la matière chauffée, portée à l'état de plasma dense, induit alors la propagation d'ondes de choc dans le solide froid environnant. Des déformations permanentes peuvent apparaître dans le matériau si la contrainte, induite par ces ondes, excède la limite élastique. Ces premières études ont notamment permis de comprendre et de décrire les différentes étapes de la formation de micro-structures, fortement corrélées au comportement élasto-plastique du solide environnant. De plus, en utilisant une loi de Weibull, tenant compte de la densité de défauts dans la matière, des probabilités de fractures dans le matériau ont été calculées. Dans un second temps, la structuration de la silice fondue par un faisceau de Bessel a été considérée. Un solveur de Maxwell 3D, couplé à une description fluide de la dynamique électronique, a été utilisé pour modéliser le dépôt d'énergie laser. Les résultats ont permis de comprendre comment s'établit le dépôt d'énergie et rendent compte des effets des différents processus d'ionisation sur les évolutions des profils de densité et d'énergie électronique. Des simulations thermo-élasto-plastiques ont ensuite été réalisées en utilisant le dépôt d'énergie calculé. Différents types de déformations induites dans la silice ont pu être mis en évidence en fonction de l'énergie et de la durée de l'impulsion incidente, en accord avec les observations expérimentales.

Abstract

Femtosecond laser pulses are an efficient tool to induce localized structural modifications in the bulk of dielectrics materials. The dielectrics, initially transparent, start to efficiently absorb the energy when the laser intensity exceeds the optical breakdown threshold of the material. This property, coupled to a femtosecond pulse duration smaller than the characteristic relaxation times of matter, allows to induce a localized and accurate energy deposition in the irradiated volume. In order to model the formation of such structures, a 2D thermo-elasto-plastic model, including solid-liquid transitions through a softening model, has been implemented in a lagrangian hydrodynamic code. Studies on the formation of a single cavity and several interacting cavities have been firstly performed, assuming an instantaneous energy deposition in the bulk of fused silica. The relaxation of the heated matter, transformed to a warm dense plasma, induces shock waves in the surrounding cold solid. Permanent deformations may appear if the stress, induced by the waves, exceeds the yield strength of the material. This first study allowed to understand and describe the various steps of the micro-structures formation, which are strongly correlated to the elasto-plastic behavior of the surrounding solid. Furthermore, by using a Weibull's law, accounting for defects density in the material, cracks probabilities have been predicted. Secondly, the structuration of fused silica by a Bessel beam has been considered. For that purpose, a 3D Maxwell solver coupled to a fluid description of the electron dynamics has been used to model the laser energy deposition. Results allow to understand how the energy deposition establishes and show the effects of the different ionization processes on the electron density and energy profiles. Then, thermo-elasto-plastic simulations have been carried out including the calculated energy deposition. Various kinds of induced deformations in fused silica have been obtained depending on the incident pulse energy and duration, which is in agreement with experimental observations.