

# Simulación numérica por elementos finitos de un proceso de microfabricación mediante láser de pulsos ultracortos

D. Sánchez-García<sup>1</sup>, C.M. Quan-Jo<sup>1</sup>, J.R. Vázquez-De-Aldana<sup>2</sup>, A.R. Giménez-El-Amrani<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad de Salamanca, <u>dasaga@usal.es</u>, <u>id00833748@usal.es</u> <sup>2</sup>Departamento de Física Aplicada, Universidad de Salamanca, <u>jrval@usal.es</u>

<sup>3</sup> Laboratorio de Ingeniería Biomédica y Tisular (BTELab), Fundación de Investigación Hospital General Universitario de Valencia (FIHGUV), <u>gimenez\_anu@fihguv.es</u>

En el ámbito de la investigación en biomedicina, las técnicas de microfabricación son utilizadas mayoritariamente para crear dispositivos miniaturizados denominados "Organ-on-a-Chip" (OoC). Un OoC es un dispositivo microfluídico que contiene canales, cámaras o membranas de pequeñas dimensiones, que, junto con células vivas, permite simular el entorno de ciertos tejidos humanos e incluso su comportamiento o funcionalidad. Tradicionalmente, la fabricación de las piezas que los componen se realiza en materiales poliméricos de buenas propiedades ópticas, mediante tecnologías consolidadas como el moldeo por réplica y el grabado en seco. Sin embargo, estos métodos presentan limitaciones significativas, presentándose el micromecanizado mediante láser de pulsos ultracortos como una alternativa potencial, basada en la ablación inducida por la exposición a la radiación láser.

En este trabajo se desarrolla un modelo matemático basado en el método de los elementos finitos (MEF) para simular el proceso de ablación láser en materiales transparentes. La simulación ha sido implementada en el software COMSOL Multiphysics, a través de un modelo en dos dimensiones. La distribución de la intensidad del láser ha sido caracterizada mediante una función gaussiana en el espacio y como un pulso gaussiano en el dominio del tiempo. La absorción de la energía del láser se modela desde un enfoque microscópico, en el cual los electrones son excitados por procesos de ionización multifotónica y avalancha electrónica, produciendo un plasma que actúa de filtro y pantalla de la intensidad a través del material.

Los resultados muestran que la simulación presenta similitudes con el proceso real. El modelo MEF permite obtener un mapa de distribución de electrones libres durante el procesamiento, facilitando la predicción de las geometrías microfabricadas, considerando la densidad crítica de electrones como criterio crucial para la ablación. El comportamiento de las geometrías en forma de cráter recreadas en la simulación, bajo variaciones de la energía por pulso, sigue la tendencia esperada, mostrando un crecimiento dimensional progresivo con el aumento de la energía. Las geometrías simuladas se han comparado con resultados experimentales, mostrando una correspondencia aceptable con la literatura científica.

En conclusión, el micromecanizado con láser de pulsos ultracortos supera notablemente al realizado con láseres constantes o de pulsos de larga duración, debido a la ablación instantánea del material, reduciendo significativamente las zonas afectadas térmicamente. Además, el método ofrece importantes ventajas sobre las técnicas tradicionales, como una mayor flexibilidad, la reducción de la intervención del operario y la simplicidad de uso.

# 1. Introducción

En el ámbito de la investigación en biomedicina, las técnicas de microfabricación se utilizan principalmente para crear instrumentos miniaturizados denominados "*Organ-on-a-Chip*" (OoC). Un OoC es un dispositivo microfluídico diseñado para replicar ciertas funciones desarrolladas en el cuerpo humano, superando las limitaciones de los métodos tradicionales de cultivo celular en dos dimensiones (2D) [1]. Estos dispositivos se han convertido en herramientas clave en el campo biomédico, ya que permiten una mayor comprensión de la fisiología humana, el desarrollo de plataformas personalizadas para pruebas de fármacos y la creación de modelos *in vitro* de ciertas patologías humanas, entre otras aplicaciones [2].

La combinación de canales, cámaras y membranas porosas con células vivas permite que estos dispositivos imiten la arquitectura celular y el entorno dinámico de los tejidos humanos. La presencia de canales microfluídicos y membranas porosas es esencial para simular vasos sanguíneos y otros sistemas fisiológicos del cuerpo [2]. Por ello, la microfabricación es un pilar fundamental en el desarrollo de los OoCs, ya que emplea técnicas avanzadas de manufactura para construir estos sistemas miniaturizados.

Tradicionalmente, las distintas piezas que los componen se realizan en materiales poliméricos transparentes, que poseen buenas propiedades ópticas, mediante tecnologías consolidadas como el moldeo por réplica y el grabado en seco. Sin embargo, el aumento constante en su complejidad, para desarrollar sistemas más avanzados, requiere la implementación de técnicas innovadoras en su producción.

Se han diseñado múltiples configuraciones y variantes de OoCs. Sin embargo, en términos generales, su estructura básica consiste en dos o más sustratos de polidimetilsiloxano (PDMS) de distintos espesores, unidos entre sí o a membranas con un grado de porosidad controlado. Estos sustratos incorporan canales y cámaras microfluídicas de diversas formas y tamaños. Las membranas son comúnmente utilizadas en el diseño de rutas complejas que requieren el intercambio de sustancias o mezclas de fluidos dentro del dispositivo [3]. Según la aplicación, estas láminas pueden actuar como soportes para co-cultivos celulares, barreras artificiales, o filtros. Asimismo, la porosidad de las mismas debe ser controlada con precisión para imitar fielmente al tejido deseado.

Los materiales utilizados para fabricar estas membranas son diversos y no siempre coinciden con el material del sustrato. Tradicionalmente se han empleado materiales como el tereftalato de polietileno (PET) y el policarbonato (PC) debido a su facilidad de producción a gran escala, lo que permite reducir costes sin comprometer la biocompatibilidad [4]. No obstante, a pesar de su mayor costo, el PDMS ha reemplazado en gran medida a estos materiales gracias a sus excelentes propiedades ópticas, térmicas, químicas y de biocompatibilidad entre otras [5], además de su facilidad de producción y manipulación en cualquier laboratorio.

La porosidad de las membranas de PDMS puede controlarse mediante el proceso de microfabricación, siendo el moldeo por réplica (*replica moulding*) y el grabado en seco (*dry etching*) las tecnologías más utilizadas [4]. El moldeo por réplica, incluido dentro de la denominada como litografía blanda (*soft-lithography*), es un método ampliamente reconocido por su capacidad para crear sustratos de PDMS con canales y poros. En términos generales, este proceso se basa en la fabricación de un molde con la geometría negativa del dispositivo. En el caso de las membranas, el molde consiste un sustrato con una matriz de micro-pilares, cuyo diámetro coincide con el tamaño deseados de los poros, y cuya altura corresponde al grosor de la membrana. Estos moldes pueden fabricarse mediante diversas técnicas, como litografía, impresión 3D o fotolitografía. El PDMS líquido se vierte en el molde, se cura y posteriormente se separa, obteniendo así una réplica del patrón [6]. Por otro lado, el grabado en seco es un método típicamente utilizado en la fabricación de sistemas microelectromecánicos (MEMS), el cuál ha sido adaptado para la producción de este tipo de membranas. Esta tecnología emplea erosión química mediante plasma de oxígeno u otros gases reactivos para eliminar selectivamente el material del sustrato [7]. El proceso se lleva a cabo en una atmósfera controlada, utilizando una máscara de protección, normalmente fabricada en materiales metálicos, que actúa como matriz y filtro, y permite la eliminación del material solo en las áreas deseadas [4].

Estas técnicas han sido estudiadas durante años para optimizar su simplicidad y eficiencia. Sin embargo, aún persisten algunas limitaciones sin resolver. El moldeo por réplica, a pesar de su amplio uso en el desarrollo de dispositivos microfluídicos debido a su alta resolución, presenta ciertas desventajas relacionadas con la manipulación manual en algunas etapas del proceso. Entre sus principales inconvenientes se encuentran la deformación del patrón en el molde y la posibilidad de generar defectos en la membrana, como la deformación de la lámina o la obstrucción de los poros debido a la rotura de los micro-pilares durante el proceso de extracción [8]. Otra limitación de esta técnica es su falta de flexibilidad en cuanto a diversidad de producción se refiere, ya que cada patrón distinto requiere de la fabricación de moldes de alta precisión. Además, la producción de membranas enfrenta el desafío de generar micro-pilares de gran esbeltez, lo que aumenta el riesgo de desprendimiento y obstrucción de los poros. Por otro lado, la técnica de grabado en seco también presenta diversas limitaciones. Entre sus principales desventajas se encuentra el alto costo del equipo y los riesgos para la salud y la seguridad de las personas derivados de la exposición a plasma y gases fluorados. Asimismo, el control del proceso es complejo, ya que requiere el ajuste preciso de múltiples variables, presentando la posibilidad de que los orificios grabados manifiesten falta de uniformidad.

En los últimos años, con el objetivo de superar las limitaciones de los procesos habitualmente empleados, se ha explorado implementación de nuevas técnicas, entre ellas la tecnología de ablación mediante láser de pulsos ultracortos. Esta tecnología se basa en la generación de pulsos láser de alta energía con duraciones en el rango de los picosegundos a los femtosegundos. Dichos pulsos se caracterizan por tener una elevada potencia de pico y un haz extremadamente estrecho, lo que permite concentrar una gran cantidad de energía en un intervalo de tiempo muy reducido y sobre un área minúscula de material. Como resultado, se logra una eliminación instantánea o ablación de material, con un impacto térmico mínimo, lo que reduce significativamente las zonas afectadas por el calor. Debido a esta característica, en la literatura científica se ha llegado a reconocer este proceso como "mecanizado en frío" [9].

La interacción entre la onda electromagnética emitida por el láser y la materia es de naturaleza no lineal, por lo que la respuesta del material no puede estimarse de forma directamente proporcional a la intensidad del láser. Esta no linealidad se debe a la intervención de múltiples procesos, siendo los principales: la absorción multifotónica, la avalancha electrónica, la rotura de enlaces químicos, la recombinación de electrones libres y la expulsión de material [10-12]. A diferencia de otros procesos con láser pulsado cuyo ancho de pulso se encuentra por encima de los 20-50 ps, y cuyo comportamiento puede describirse mediante modelos térmicos, los láseres de pulsos ultracortos (< 20 ps) interactúan con la materia de una manera completamente distinta. En este caso, la interacción y la consecuente respuesta del material ocurre a través de una avalancha de electrones iniciada por la absorción de la energía del láser por parte de los electrones que se encuentran en la banda de conducción. En materiales dieléctricos, como el PDMS, la cantidad de electrones en la banda de conducción es reducida o inexistente. Por ello, inicialmente ocurre un proceso de ionización multifotónica, en el que la absorción de varios fotones del láser permite a los electrones de la banda de valencia superar el ancho de banda prohibida y saltar a la banda de conducción. Una vez presentes los electrones libres, se inicia la avalancha electrónica, en la que estos colisionan con otros átomos y moléculas, generando aún más electrones libres. Como resultado, la densidad electrónica aumenta progresivamente, dando lugar a la formación de plasma en la superficie del material. Cuando esta densidad supera un cierto umbral, se produce la ablación antes de que la energía pueda transferirse desde los electrones a la red molecular del material [10-12].

Además de su alta precisión y daño térmico reducido, la tecnología de ablación por láser de pulsos ultracortos ofrece diversas ventajas en comparación con los métodos anteriores. Especialmente, permite el tratamiento de una amplia variedad de materiales, como metales y polímeros, y proporciona una gran flexibilidad en el proceso. A diferencia del moldeo por réplica, no requiere patrones, moldes ni películas para generar geometrías en el sustrato. Asimismo, al eliminar la necesidad de moldes, se reduce el procesamiento manual, minimizando así el riesgo de defectos en el producto final durante la operación de desmoldado. En cuanto al grabado en seco, no requiere de una atmósfera controlada ni el uso de máscaras. Además, el equipo necesario es menor y el control del proceso es más sencillo debido a la menor cantidad de parámetros de control.

La tecnología de ablación láser con pulsos ultracortos se ha aplicado ampliamente en microfabricación para la micro y nanoestructuración de superficies. Aunque su uso ha sido predominante en metales como cobre acero, titanio y aluminio, también se ha empleado con éxito en materiales dieléctricos como semiconductores o polímeros. Esta técnica tiene un amplio rango de aplicaciones en diversos campos, como la plasmónica, la fotónica, la optoelectrónica, la fotovoltaica, la biomedicina y los dispositivos microfluídicos [13].

En las últimas décadas, los láseres pulsados de picosegundos y femtosegundos han sido ampliamente utilizados en el procesamiento de diversos materiales para micro y nano fabricación. No obstante, el estudio de su interacción con la materia se ha desarrollado principalmente a través de enfoques experimentales. En 2009 H. Huang y Z.X. Guo demostraron que el umbral de energía para obtener daño se reduce con el número de pulsos debido a la consecuente incubación [14]. En 2012, S. Darvishi *et al.* presentaron un modelo sencillo para estimar el ancho y la profundidad de microcanales cónicos mecanizados con un láser de femtosegundos en vidrio y PDMS [15]. En 2016, A. M. Alshehri *et al.* demostraron que, mediante el control de la energía de pulso de un láser de femtosegundos, es posible modificar las propiedades hidrofóbicas de superficies de PDMS a través de cambios químicos y topográficos [16]. En 2017, Y. K. Hsieh *et al.* utilizaron un láser de nanosegundos para generar canales en tres polímeros diferentes, incluido el PDMS, demostrando una relación directa entre el tamaño del haz y la profundidad y el ancho del canal. Además, encontraron una correlación entre la profundidad del canal y el número de pasadas ejecutadas [17]. En 2022, X. Zhang *et al.* investigaron el proceso de ablación con un láser de femtosegundos en una película de PDMS demostrando que existe un valor mínimo de energía necesario para lograr la ablación del material y que un aumento en la velocidad de movimiento reduce las dimensiones los agujeros, además de aumentar el ángulo de conicidad [9].

A nivel puramente teórico, la literatura científica es considerablemente más limitada. En 1996, B.C. Stuart *et al.* desarrollaron un modelo adimensional que, considerando los fenómenos de ionización multifotónica y la avalancha de electrones, permitía describir la evolución temporal de la densidad de electrones generada por un pulso láser en materiales dieléctricos en un punto específico. Se demostró que el modelo desarrollado era coherente con las ecuaciones de la cinética de electrones [12]. Posteriormente, en 2004, M.D. Feit *et al.* mejoraron este modelo al integrar el efecto de recombinación de electrones libres y extenderlo a la dimensión de propagación del láser. Sus

resultados mostraron que, a medida que la densidad de electrones libres aumenta, la intensidad del láser disminuye con la profundidad debido al efecto de apantallamiento del plasma [10].

Si bien estos modelos han permitido describir aspectos clave de la interacción láser-materia, aún existen oportunidades para su desarrollo y aplicación en la simulación del proceso de ablación. En este contexto, el presente trabajo propone un modelo matemático basado en el método de los elementos finitos (MEF) para simular la ablación láser en materiales dieléctricos transparentes, considerando la distribución espacial del láser. En particular, la simulación presentada se centra en la producción de microtaladros en láminas de PDMS, con el objetivo de generar membranas de porosidad controlada para su aplicación en OoCs.

# 2. Materiales y Métodos

#### 2.1. Proceso de ablación mediante pulsos láser ultracortos

El proceso de ablación láser simulado en este estudio corresponde al utilizado en la fabricación de membranas de PDMS Sylgard® 184 (Dow Corning Corporation, USA) para OoCs. Estas membranas de 25  $\mu$ m de espesor, producidas por recubrimiento por rotación, presentan un área central perforada de 1.5 mm × 15 mm, con microtaladros de 7  $\mu$ m de diámetro dispuestos en un patrón de tresbolillo. La separación entre filas es de 22  $\mu$ m en dirección vertical y de 26  $\mu$ m entre taladros en dirección horizontal.



(b) Esquema del equipo empleado

Figura 1: Proceso de fabricación de las membranas de PDMS con porosidad controlada.

El equipo empleado consta de un sistema láser de pulsos de femtosegundos CPA Ti:Sa (Spectra Physics, California, USA), con una duración de 60 fs por pulso, una longitud de onda de 800 nm, una frecuencia fundamental de 5 kHz y una energía máxima por pulso de 1.6 mJ. El número de pulsos emitidos se controla mediante un *shutter* electromecánico (Uniblitz VCM-D1 Shutter Driver, Vincent Associates, Rochester, NY, USA) ajustado por el tiempo de disparo, mientras que la potencia del láser se regula a través de un sistema óptico atenuador. El haz láser está focalizado a un diámetro de 7 µm.

abla 1: 1 arametros del faser pulsado empleados en la sinutación.						
Parámetro	Valor	Unidades	Descripción			
λ	800	nm	Longitud de onda			
f	c/λ	Hz	Frecuencia del láser			
ω	$2\pi f$	rad/s	Frecuencia angular del láser			
$f_P$	5	kHz	Frecuencia de pulsos			
τ	60	fs	Ancho de pulso			
WO	3.5	μm	Radio del haz en el plano focal			
$E_{n}$	4.8.12	μJ	Energía por pulso			

Tabla 1: Parámetros del láser pulsado empleados en la simulación.

Los parámetros del láser se resumen en las Tabla 1, mientras que los parámetros correspondientes al material se resumen en la Tabla 2. Los valores conocidos para el PDMS se han utilizado directamente, mientras que aquellos desconocidos han sido estimados o aproximados a los del agua, debido a la similitud en sus propiedades ópticas y comportamiento dieléctrico. Asimismo, en los casos en que la variación de estos parámetros tiene un impacto

mínimo o nulo en los resultados de la simulación, se ha optado de la misma manera por utilizar valores referenciales del agua (\*).

	D			1	• • • • •
Table 7.	Paramotroe	acturnados al	matorial	an la	cimilación
1 avia 2.	1 arametros	asignauos ai	materiary	un na	simulación.

<b>Tublu 2.</b> Turametros usignados ar materiar en la simulación.						
Parámetro	Valor	Unidades	Descripción			
υ	$3 \cdot 10^{14}$	1/s	Factor de colisión*			
$\Delta$	4.2	eV	Ancho de banda prohibida del PDMS			
$\langle e_e \rangle$	$0.5\Delta$	eV	Energía del electrón libre			
$n_m$	1.4235	-	Índice de refracción del PDMS			
Er	$n_m^2$	-	Permitividad relativa del PDMS			
$n_c$	$3.5 \cdot 10^{27}$	1/m <sup>3</sup>	Densidad crítica de electrones			
β	$3 \cdot 10^{-9}$	cm <sup>3</sup> /s	Coeficiente de recombinación*			

#### 2.2. Modelo matemático

Para simular la interacción entre el PDMS y el láser, se ha desarrollado un modelo 2D axisimétrico.

La evolución temporal de la densidad de electrones en la muestra se modela mediante la expresión propuesta por M.D. Feit *et al.* [10] para describir la ablación en materiales dieléctricos, adaptada en este caso para su aplicación en el espacio. Como parte de esta adaptación y con el fin de simplificar el modelo, se ha considerado la simulación de un único pulso, así como la omisión del factor de difusión espacial de los electrones

$$rac{\partial n}{\partial t} = lpha(I,n) + P(I) - \beta n^2$$
 (1)

donde n representa la densidad de electrones libres, siendo variable en el tiempo t y en el espacio r, z, e I es la intensidad del láser.

Atendiendo a las funciones situadas a la derecha de la ecuación,  $\alpha(I,n)$  representa el proceso de avalancha electrónica, P(I) el proceso de ionización multifotónica, y el tercer término representa la acción de recombinación de los electrones libres con los iones disponibles, dónde  $\beta$  es el coeficiente de recombinación.

El fenómeno de avalancha electrónica  $\alpha(I,n)$  ocurre cuando los electrones en la banda de conducción absorben la energía del láser, generando una avalancha de ionización. Para describir este proceso, se emplea la expresión propuesta por M.D. Feit *et al.* [10]

$$\alpha(I,n) = 2\frac{\omega}{c} \frac{\operatorname{Im}\left(\sqrt{\varepsilon(n)}\right)}{\langle e_e \rangle + \Delta} I \tag{2}$$

donde  $\omega$  la frecuencia del láser, *c* la velocidad de la luz en el vacío,  $\langle e_e \rangle$  la energía media de los electrones libres,  $\Delta$  la energía necesaria para superar el ancho de banda prohibida. La función  $\varepsilon(n)$  representa la permitividad dieléctrica del material, modelada según la teoría de Drude

$$\varepsilon(n) = \varepsilon_r \left( 1 - \frac{n}{n_c} \frac{1}{1 + i\frac{v}{\omega}} \right) \tag{3}$$

donde  $\varepsilon_r$  corresponde a la permitividad relativa del material, n<sub>c</sub> es la densidad crítica de electrones calculada a través de la expresión (4), y  $m_e$  y e son la masa y carga eléctrica del electrón respectivamente, mientras que  $\upsilon$  es el factor de colisión.

$$n_c = \frac{m_e \varepsilon_0 \varepsilon_r \omega^2}{e^2} \tag{4}$$

P(I) describe el proceso de ionización multifotónica, en el cual los electrones absorben múltiples fotones para alcanzar la banda de conducción. Durante la simulación, este término se modela mediante la ecuación definida por Keldysh [18]. De manera simplificada, la expresión resultante es

$$P(I) \sim k_m I^p \tag{5}$$

donde  $k_m$  una constante dependiente del material y del láser, y p es el número de fotones necesarios que debe absorber un electrón para saltar a la banda de conducción.

En la simulación la intensidad del láser se ha modelado a través de la siguiente función

$$I(r, z, t) = Q(r, z) \cdot T(t) \tag{6}$$

donde el primer término Q(r,z) representa la distribución espacial de la energía del láser y T(t) describe la evolución temporal del pulso. Se asume que la energía suministrada por el láser sigue una distribución gaussiana, con una atenuación exponencial en función de la profundidad. En este contexto, la distribución espacial del láser se define a partir de las siguientes expresiones:

$$Q(r,z) = F_0 \left(\frac{w_0}{w_z}\right)^2 \exp\left(-2\frac{r^2}{w_z^2}\right) \exp\left(az\right)$$
(7)

$$F_0 = \frac{2E_p}{\pi w_0^2} \tag{8}$$

$$w_z(z) = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda z}{\pi w_0^2}\right)^2} \tag{9}$$

Aquí  $F_0$  representa la fluencia del láser, dependiente de la energía emitida por pulso  $E_p$  y del radio del haz en el plano focal. El parámetro  $w_z$  define la variación del radio del haz en función de la profundidad z, considerando la longitud de onda del láser  $\lambda$ . *a* es el coeficiente de absorción, obtenido a partir de la relación entre la expresión 31 propuesta por B.C. Stuart *et al.* [12] y la expresión 3 de M.D. Feit *et al.* [10]:

$$a(n) = 2\frac{\omega}{c} \operatorname{Im}\left(\sqrt{\varepsilon(n)}\right) \tag{10}$$

El término temporal T(t), que describe la generación de un pulso gaussiano, se define mediante la siguiente función, donde  $\tau$  representa el ancho del pulso:

$$T(t) = \frac{1}{\tau} \sqrt{\frac{4\log 2}{\pi}} \exp\left(-4\log 2\left(\frac{t-\tau}{\tau}\right)^2\right)$$
(11)

La eliminación del material se ha definido bajo la condición de que el plasma generado alcance la densidad crítica, asumiendo así que ha absorbido la energía suficiente para ser expulsado del sistema.

### 2.3. Geometría y discretización del modelo

Para la simulación, se ha definido una geometría rectangular cuya arista izquierda está alineada con el eje de revolución de la pieza. Sus dimensiones son un ancho de 50 µm, valor superior a la distancia entre taladros utilizada comúnmente en la producción de membranas, y una profundidad de 25 µm, comparable al espesor de las láminas de PDMS empleadas.



Figura 2: Esquema del modelo desarrollado. Detalle de la malla empleada.

Con el fin de garantizar una adecuada resolución en los cálculos, la geometría ha sido discretizada mediante una malla estructurada de cuadriláteros, con un tamaño de elemento máximo de 0.25 µm. Esta configuración permite capturar con precisión las variaciones espaciales de las variables simuladas y asegurar la estabilidad numérica del modelo. La simulación se ha resuelto empleando el software COMSOL Multiphysics en su versión 6.2 [19].

## 3. Resultados y discusión

#### 3.1. Evolución de la densidad de electrones

En esta sección se analizan los resultados de la simulación de la respuesta del PDMS ante la exposición a un pulso láser de gran potencia, centrándose en la evolución de la densidad de electrones durante la interacción con un pulso y su posterior relajación en el intervalo entre pulsos. La simulación se ha realizado para una energía por pulso de

4  $\mu$ J. Este valor se ha adoptado por mostrarse suficiente para inducir cambios significativos en *n* durante la simulación. Se examina la distribución espacial de la densidad electrónica en distintos puntos de la muestra, tanto en profundidad (*z*) como en distancia radial al eje del pulso (*r*), con el objetivo de evaluar el efecto de apantallamiento generado por el plasma inducido. Este análisis proporciona información clave sobre la dinámica del proceso y sugiere posibles implicaciones en la propagación y absorción de la energía del láser en el material.



**Figura 3:** Evolución en el tiempo de la distribución y crecimiento de la densidad de electrones libres n para un pulso de 4  $\mu$ J.

En la Figura 3 se presenta la evolución temporal y la distribución espacial de la densidad de electrones libres en distintos instantes de la simulación. Durante los primeros 15 fs, se observa un aumento generalizado de *n* en toda la profundidad estudiada, ya que el haz láser atraviesa el material con una absorción mínima. En esta etapa inicial, el PDMS se comporta como un material transparente, ya que la absorción del láser depende tanto del número de electrones libres, aún bajo en esta fase, como de la intensidad del láser, que también se mantiene en niveles reducidos. A medida que la potencia del láser aumenta, la ionización multifotónica genera más electrones libres, desencadenando un proceso de avalancha electrónica. Como resultado, la densidad de electrones comienza a acumularse en las regiones superiores, indicando una absorción cada vez más localizada en la superficie (t = 25 fs). Este fenómeno genera dos efectos principales: primero, un incremento sostenido en la absorción y en la generación de electrones en las capas más superficiales, debido a la realimentación positiva entre estos dos procesos; y segundo, una reducción de la densidad electrónica en regiones más profundas, específicamente por debajo del 25% de la longitud de onda del láser. Este efecto de apantallamiento ocurre en todo momento, pero se intensifica conforme la densidad de electrones del plasma se aproxima a la densidad crítica  $n_c$  (t = 30 fs). En este punto, el plasma absorbe y refleja la mayor parte de la radiación incidente, limitando aún más la energía que alcanza las capas internas del material.





En la Figura 4 se presentan las gráficas que muestran la evolución temporal de la densidad de electrones libres n y la intensidad del láser I en distintas coordenadas de la geometría analizada. La Figura 4 (a) representa estos valores en la superficie y en tres profundidades sucesivas con un incremento de 0.2 µm. Se observa que, en los primeros 20 fs, el crecimiento de la densidad de electrones es similar en todas las profundidades, al igual que la intensidad del láser que alcanza cada punto. Sin embargo, a partir de ese instante, la densidad electrónica en la superficie llega al valor crítico, lo que provoca una caída brusca en la intensidad del haz en las profundidades situadas por debajo de un cuarto de la longitud de onda. Este efecto es especialmente evidente a partir de la cota z= -0.2 µm, donde se observa un marcado descenso en la potencia del láser, lo que ralentiza significativamente el crecimiento de la densidad de electrones en comparación con la superficie. Así, se confirma lo señalado previamente en relación con los mapas de densidad. Cuando el plasma en la superficie alcanza la densidad crítica  $n_c$ , se genera un fuerte efecto de apantallamiento que limita el incremento de n a una región de espesor inferior a la longitud de onda del láser. Por otro lado, la Figura 4 (b) muestra la evolución de las mismas variables en función de distintas posiciones radiales con respecto al centro del haz láser. Se aprecia que, a medida que aumenta la distancia radial, el crecimiento de la densidad electrónica es más gradual, con una pendiente que decrece progresivamente. Esto es coherente con el perfil gaussiano del láser, donde la potencia en las regiones periféricas es significativamente menor que la potencia pico en el centro. Además, dado que este análisis se realiza exclusivamente en la superficie, no se observa el efecto de apantallamiento. También se evidencia que la densidad electrónica es aproximadamente proporcional a la intensidad del láser en esta dirección, ya que las variaciones en *n* e *I* entre los distintos puntos presentan una correspondencia directa.

Los resultados analizados en este apartado concuerdan directamente con los obtenidos por M.D. Feit *et al.* [10] en su estudio, donde se observó que, al alcanzar la densidad crítica, el plasma actúa como un filtro o barrera, impidiendo que una gran parte de la energía del láser penetre a mayores profundidades. Asimismo, en el contexto experimental, los resultados de la simulación muestran coherencia con la realidad. Esto se evidencia en estudios como el de H. Huang y Z.X. Guo [14], quienes analizaron el umbral de daño en PDMS mediante un láser de femtosegundos. En sus experimentos, para un solo pulso, la ablación se limitó exclusivamente a la superficie del material, un comportamiento consistente con el observado en la simulación.

#### 3.2. Efectos del incremento de la energía por pulso

En la sección anterior se analizaron los resultados de la simulación en términos de la dinámica de crecimiento de la densidad electrónica para un pulso de 4  $\mu$ J. A pesar de que esta energía es relativamente baja, su aplicación en un intervalo de tiempo extremadamente corto y sobre un área reducida genera una potencia lo suficientemente alta como para alcanzar la densidad crítica de electrones. En este apartado, se presentan los resultados obtenidos al aumentar la energía del pulso, con el objetivo de evaluar cómo responde el material ante esta variación. Para ello, se han realizado dos simulaciones adicionales con energías de 8  $\mu$ J y 12  $\mu$ J por pulso, permitiendo analizar si el incremento de energía conlleva un aumento proporcional en la densidad de electrones o si emergen efectos no lineales en el proceso.







**Figura 6:** Representación de la densidad de electrones libres *n* y la intensidad del láser *I* en función del tiempo, para diferentes profundidades y distancias radiales, con una energía por pulso  $E_p = 12 \mu$ J. La línea continua corresponde a la densidad de electrones, mientras que la línea discontinua representa la intensidad del láser.

En las Figuras 5 y 6 se presentan las gráficas equivalentes a las mostradas previamente para el pulso de 4  $\mu$ J, ahora con los resultados obtenidos para 8 y 12  $\mu$ J. Además, la Figura 7 muestra mapas de colores que representan la evolución de la densidad electrónica en los instantes de 15 y 30 fs, permitiendo una comparación directa con la Figura 3. En primer lugar, el análisis de las Figuras 5 y 6 revela que el incremento en la densidad de electrones no es proporcional al aumento de la energía del pulso. Esto se evidencia claramente en la evolución de *n* en la superficie: mientras que para 4  $\mu$ J se alcanza un pico de 15  $\cdot 10^{29}$  1/m<sup>3</sup>, para 8  $\mu$ J el valor asciende a 19 $\cdot 10^{29}$  1/m<sup>3</sup> y para 12  $\mu$ J a 22  $\cdot 10^{29}$  1/m<sup>3</sup>. Asimismo, en *z* = -0.2  $\mu$ m, apenas se observa variación entre las tres simulaciones, lo que concuerda con el hecho de que, una vez alcanzada la densidad crítica, el crecimiento adicional se dificulta debido al efecto de apantallamiento. Como resultado, las regiones internas del material simulado experimentan un impacto mínimo ante el aumento de energía. Por otro lado, el análisis de la respuesta al incremento energético muestra que, a medida que se utilizan pulsos de mayor energía, la ionización multifotónica y la posterior avalancha electrónica se inician antes. Este comportamiento es esperable, ya que, en las fases iniciales del pulso, cuando la intensidad del láser aún no alcanza el 15% de su potencia máxima debido a su perfil gaussiano, un mayor aporte energético total acelera la generación de electrones libres.

Las Figuras 4 (b), 5 (b) y 6 (b) reflejan un comportamiento similar. Se confirma que el aumento de energía del pulso genera un crecimiento en la densidad de electrones, pero, además, se destaca un aspecto crucial: a medida que la potencia del pulso aumenta, una mayor superficie alcanza la densidad crítica de electrones. En consecuencia, el área afectada por el láser se expande, superando el umbral de ablación en regiones más alejadas del centro.

Lo descrito en los párrafos previos se corrobora con los mapas de la Figura 7. Comparándola con la Figura 3, se observa que a t = 15 fs, el material aún mantiene cierto grado de transparencia para 4 µJ, mientras que para 8 y 12 µJ, el apantallamiento provocado por la formación de plasma ya ha comenzado. Asimismo, en t = 30 fs, se aprecia como el área de generación de plasma se expande en dirección radial conforme aumenta la energía del pulso, en coherencia con las observaciones previas.



**Figura 7:** Distribución espacial de la densidad de electrones libres *n* representada en un mapa de colores para dos instantes t = 15 fs y t = 30 fs. Los diagramas corresponden a dos valores de energía:  $E_p = 8 \mu J$  y  $E_p = 12 \mu J$ .

Si bien el incremento de la potencia por pulso no produce un aumento proporcional en la densidad electrónica, sí impacta directamente en la extensión del área afectada. Este resultado coincide con los hallazgos de H. Huang y Z.X. Guo [14], quienes, basándose en la relación experimental obtenida por S. Baudach *et al.* [20] para poliamida y aplicándolo para PDMS, demostraron que el diámetro de la zona alterada por el láser está directamente relacionado con la fluencia del pulso.

#### 3.3. Simulación del proceso de eliminación de material

En esta sección, desde un enfoque más práctico, se analiza el proceso evaluando las áreas en las que el cambio a nivel atómico es irreversible y, por lo tanto, se manifiesta el fenómeno de ablación. Para ello, se han utilizado las simulaciones correspondientes a los tres valores de potencia con el objetivo de estimar la cantidad de material eliminado debido a la acumulación de energía. Esta determinación se ha realizado en t = 130 fs, en el que la energía aportada por el láser es ya despreciable en comparación con su valor pico y en el que la recombinación de electrones comienza a ser el factor dominante.

En la Figura 8 se presentan los resultados de esta evaluación para las tres simulaciones. Se observa que la superficie de material eliminado aumenta conforme se incrementa la energía del pulso. Este crecimiento no es proporcional: entre las imágenes (a) y (c), la energía del pulso se triplica, pero la cantidad de material eliminado no alcanza un aumento del 50%. Para un pulso de 4 µJ, la profundidad estimada del cráter es de 0.97 µm, con un radio de 4.7 μm. En el caso de 8 μJ, la profundidad alcanza 1.10 μm y el radio 5.1 μm, mientras que para 12 μJ los valores son 1.18 µm y 5.4 µm, respectivamente. Esto indica que el aumento de energía no genera un incremento equivalente en la cantidad de material eliminado, ni en profundidad ni en diámetro. Mientras que la variación en la profundidad es del orden de 0.1 µm, el diámetro del área afectada muestra un crecimiento aproximadamente tres veces mayor. Por lo tanto, se puede concluir que, ante un aumento de potencia, predomina la expansión del diámetro del cráter sobre la profundidad de extracción de material. Esto confirma nuevamente lo argumentado en los apartados anteriores: el efecto de apantallamiento concentra la acumulación de energía en la superficie, limitando su penetración en profundidad y explicando la baja variabilidad en la profundidad del cráter. Por otro lado, el aumento del diámetro del cráter está en concordancia con el análisis previo de las simulaciones, donde se observó que, a mayores energías de pulso, regiones más periféricas alcanzan la densidad crítica de electrones, lo que conduce a cambios irreversibles en áreas más extensas. Esto implica que, en experimentos dirigidos a la producción de microtaladros sobre superficies, la energía por pulso es un parámetro clave para el control de las dimensiones geométricas del agujero.



**Figura 8:** Cantidad de material ablacionado y dimensiones de la geometría resultante tras la exposición a distintas energías de pulso láser. Se considera eliminado el material cuya densidad de electrones libres supera el valor crítico  $n_c$  para un instante de simulación t = 130 fs.

## 4. Conclusiones

Se ha desarrollado una simulación numérica en COMSOL Multiphysics para modelar el comportamiento tridimensional del PDMS, un material dieléctrico, bajo la excitación de un láser de pulsos ultracortos. En particular, se ha implementado un modelo 2D axisimétrico para simular la interacción con un pulso de alta potencia. Los resultados obtenidos en las simulaciones muestran la distribución de la densidad de electrones libres en el material, evidenciando que la mayor acumulación de energía ocurre en las zonas superficiales debido al efecto de apantallamiento del plasma.

Asimismo, se ha analizado la respuesta del material ante el incremento de la energía por pulso, observándose que este factor influye principalmente en el diámetro del área afectada, con un aumento más moderado en la profundidad. Además, se ha establecido una condición para determinar la cantidad de material eliminado por pulso mediante la densidad crítica de electrones, confirmando que la potencia del láser es un parámetro clave en el control del tamaño de las geometrías. Los resultados obtenidos concuerdan con la literatura, validando el correcto comportamiento del modelo simulado.

El modelo propuesto representa un punto de partida sólido para simulaciones más avanzadas que consideren la interacción de múltiples pulsos consecutivos. Su fiabilidad lo convierte en una herramienta prometedora para el desarrollo de gemelos digitales (DT), facilitando la optimización de métodos de fabricación avanzada mediante láser de pulsos ultracortos y la selección de parámetros adecuados para mejorar el control y la eficiencia del proceso. En futuros estudios, se profundizará en el desarrollo del modelo y se llevarán a cabo experimentos para evaluar su comportamiento en diversas condiciones.

# 5. Agradecimientos

Los autores expresan su agradecimiento a la Universidad de Salamanca por proporcionar los recursos y el equipamiento necesarios para la realización de esta investigación, en particular a la Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial por facilitar la licencia del software COMSOL Multiphysics, así como al grupo ALF-USAL por compartir su conocimiento y experiencia en el uso del láser de pulsos de femtosegundos. Asimismo, el autor principal de este artículo agradece al Ministerio de Universidades por la oportunidad brindada a través del Contrato de Formación de Profesorado Universitario 2022, el cual ha contribuido a su formación y desarrollo dentro de su trayectoria investigadora.

## 6. Referencias

- [1] A. Tajeddin, and N. Mustafaoglu, "Design and Fabrication of Organ-on-Chips: Promises and Challenges," *Micromachines*, vol. 12, no. 12, (2021)
- [2] D. Huh, H. J. Kim, J. P. Fraser, D. E. Shea, M. Khan, A. Bahinski, G. A. Hamilton, and D. E. Ingber, "Microfabrication of human organs-on-chips," *Nature Protocols*, vol. 8, no. 11, pp. 2135-2157, (2013)
- [3] B. Mosadegh, M. Agarwal, Y. S. Torisawa, and S. Takayama, "Simultaneous fabrication of PDMS throughholes for three-dimensional microfluidic applications," *Lab on a Chip*, vol. 10, no. 15, pp. 1983-1986, (2010)
- [4] W. F. Quirós-Solano, N. Gaio, O. Stassen, Y. B. Arik, C. Silvestri, N. C. A. Van Engeland, A. Van der Meer, R. Passier, C. M. Sahlgren, C. V. C. Bouten, A. van den Berg, R. Dekker, and P. M. Sarro, "Microfabricated tuneable and transferable porous PDMS membranes for Organs-on-Chips," *Scientific Reports*, vol. 8, (2018)
- [5] A. Mata, A. J. Fleischman, and S. Roy, "Characterization of polydimethylsiloxane (PDMS) properties for biomedical micro/nanosystems," *Biomedical Microdevices*, vol. 7, no. 4, pp. 281-293, (2005)
- [6] D. Qin, Y. N. Xia, and G. M. Whitesides, "Soft lithography for micro- and nanoscale patterning," *Nature Protocols*, vol. 5, no. 3, pp. 491-502, (2010)
- [7] S. J. Hwang, D. J. Oh, P. G. Jung, S. M. Lee, J. S. Go, J. H. Kim, K. Y. Hwang, and J. S. Ko, "Dry etching of polydimethylsiloxane using microwave plasma," *Journal of Micromechanics and Microengineering*, vol. 19, no. 9, (2009)
- [8] B. K. Gale, A. R. Jafek, C. J. Lambert, B. L. Goenner, H. Moghimifam, U. C. Nze, and S. K. Kamarapu, "A Review of Current Methods in Microfluidic Device Fabrication and Future Commercialization Prospects," *Inventions*, vol. 3, no. 3, (2018)
- [9] X. F. Zhang, Z. Q. Yao, Z. B. Hou, and J. C. Song, "Processing and Profile Control of Microhole Array for PDMS Mask with Femtosecond Laser," *Micromachines*, vol. 13, no. 2, (2022)
- [10] M. D. Feit, A. M. Komashko, and A. M. Rubenchik, "Ultra-short pulse laser interaction with transparent dielectrics," *Applied Physics a-Materials Science & Processing*, vol. 79, no. 7, pp. 1657-1661, (2004)

- [11] X. Liu, D. Du, and G. Mourou, "Laser ablation and micromachining with ultrashort laser pulses," *Ieee Journal of Quantum Electronics*, vol. 33, no. 10, pp. 1706-1716, (1997)
- [12] B. C. Stuart, M. D. Feit, S. Herman, A. M. Rubenchik, B. W. Shore, and M. D. Perry, "Nanosecond-tofemtosecond laser-induced breakdown in dielectrics," *Physical Review B*, vol. 53, no. 4, pp. 1749-1761, (1996)
- [13] A. S. Alnaser, S. A. Khan, R. A. Ganeev, and E. Stratakis, "Recent Advances in Femtosecond Laser-Induced Surface Structuring for Oil-Water Separation," *Applied Sciences-Basel*, vol. 9, no. 8, (2019)
- [14] H. Huang, and Z. X. Guo, "Ultra-short pulsed laser PDMS thin-layer separation and micro-fabrication," *Journal of Micromechanics and Microengineering*, vol. 19, no. 5, (2009)
- [15] S. Darvishi, T. Cubaud, and J. P. Longtin, "Ultrafast laser machining of tapered microchannels in glass and PDMS," *Optics and Lasers in Engineering*, vol. 50, no. 2, pp. 210-214, (2012)
- [16] A. M. Alshehri, S. Hadjiantoniou, R. J. Hickey, Z. Al-Rekabi, J. L. Harden, A. E. Pelling, and V. R. Bhardwaj, "Selective cell adhesion on femtosecond laser-microstructured polydimethylsiloxane," *Biomedical Materials*, vol. 11, no. 1, (2016)
- [17] Y. K. Hsieh, S. C. Chen, W. L. Huang, K. P. Hsu, K. A. V. Gorday, T. H. Wang, and J. Wang, "Direct Micromachining of Microfluidic Channels on Biodegradable Materials Using Laser Ablation," *Polymers*, vol. 9, no. 7, (2017)
- [18] L. V. Keldysh, "Ionization in Field of a Strong Electromagnetic Wave," *Soviet Physics Jetp-Ussr*, vol. 20, no. 5, pp. 1307-&, (1965)
- [19] C. Inc., "COMSOL Multiphysics® v6.2 User Guide," 2023.
- [20] S. Baudach, J. Bonse, and W. Krautek, "Ablation experiments on polyimide with femtosecond laser pulses," *Applied Physics a-Materials Science & Processing*, vol. 69, pp. S395-S398, (1999)