

01;03

## Компьютерное моделирование абляции под воздействием наносекундного лазерного импульса на графитовую пластинку

© Ю.Я. Кузяков, В.А. Трофимов, И.А. Широков

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Факультет вычислительной математики и кибернетики,  
119992 Москва, Россия  
e-mail: vatro@cs.msu.su

(Поступило в Редакцию 28 декабря 2006 г. В окончательной редакции 10 мая 2007 г.)

В рамках квазигазодинамического подхода проведено компьютерное моделирование расширения плазмы после воздействия наносекундного лазерного импульса на графитовую пластинку. Рассматривается лишь однокомпонентная плазма, состоящая из молекул углерода, что является упрощением экспериментальной ситуации, реализованной ранее, с целью изучения динамики движения образовавшегося после испарения газа. Выполненное компьютерное моделирование для различных начальных значений температуры и давления исходной плазмы показало хорошее качественное согласие результатов моделирования и эксперимента, в том числе по моменту достижения максимальной плотности расширяющегося газа. Продемонстрирована возможность формирования сгустков плотности газа, распространяющегося перед основным потоком. Проведено также сравнение результатов компьютерного моделирования с предложенной Сингхом аппроксимацией давления, скорости и плотности потока газа. Показано, что она справедлива лишь в малом (по сравнению с длиной всей области расширения плазмы) начальном интервале расширения для момента времени  $t = 4 \cdot 10^{-9}$  s.

PACS: 42.62.-b, 78.20.Bh

### Введение

Как известно, лазерная абляция является перспективной технологией использования для выращивания тонких пленок, а также объемных кристаллических образцов [1–7]. В рамках нее, например, наносекундный лазерный импульс, падая на мишень, вызывает быстрое испарение (абляцию) вещества мишени. В результате образуется сгусток плазмы, который расширяется и осаждается на подложку в виде тонкой пленки. Качество пленки зависит от скорости осаждаемого вещества. Поскольку процесс происходит в газовой среде при низком давлении (порядка единиц–сотен паскалей), возможно образование ударных волн в газе. Они ухудшают качество выращиваемых пленок, и для практики представляет большой интерес возможность их устранения.

Из-за сложностей экспериментальной реализации соответствующих физико-химических процессов представляется целесообразным провести их компьютерное моделирование с целью выявления факторов, приводящих к формированию ударных волн. Первым шагом является моделирование расширения однокомпонентного газа для ответа на вопрос о возможности такого упрощенного описания реальной многокомпонентной газовой плазмы после воздействия лазерного импульса на углеродную мишень, а также о качественном согласии математической модели с физико-химическим экспериментом. Именно этим двум вопросам посвящена настоящая работа.

Следует подчеркнуть, что в работе [1] экспериментально исследовано распространение углеродного лазерного факела в вакууме и атмосфере азота. По спектрам свечения молекул  $C_2$ ,  $C_3$  и CN определены пространственные и временные характеристики их распространения, с частью из которых проводится сравнение в настоящей работе. В работе [2] распространение лазерной плазмы исследуется теоретически. В ней сделано предположение об определенном законе распределения газодинамических характеристик плазмы (температуры, давления, плотности, макроскопической скорости) при воздействии лазерного импульса. Для проверки адекватности используемых нами математической модели и разностного алгоритма ниже приведено сравнение полученных результатов и с этой работой. Работы [4,5] посвящены исследованию распространения лазерной плазмы с использованием методов компьютерного моделирования на основе газодинамических уравнений, метода прямого численного моделирования Монте-Карло, а также экспериментальных методов. В недавно выполненной работе [8] рассматривается сверхзвуковое течение газа в ударной трубе и методом компьютерного моделирования на основе уравнений Навье–Стокса исследуется влияние отражения ударной волны от торцевой стенки трубы на поток газа.

В отличие от авторов указанных работ, нами используется так называемый квазигазодинамический подход, в котором в макроскопические уравнения вводятся дополнительные слагаемые, позволяющие существенно расширить диапазон параметров газа, для которых можно выполнить компьютерное моделирование.

## Основные уравнения

Нами рассматривается разлет сгустка газа, образовавшегося под действием наносекундного лазерного импульса, после окончания его действия. Задача решается в пространственно одномерной постановке, так как именно этот случай соответствует [1], где лазерный импульс падает на графитовую пластинку под небольшим углом к ее оси. Газ описывается тремя независимыми функциями от эйлеровой координаты и времени [9]:  $\rho(x, t)$  — плотность газа,  $u(x, t)$  — макроскопической скоростью,  $p(x, t)$  — давлением. Здесь  $x$  — координата, вдоль которой распространяется лазерный факел,  $t$  — время. Температура находится из уравнения состояния идеального газа:  $p = \rho RT$ , где  $R = \mathcal{R}/M_{\text{mol}}$  — газовая постоянная,  $\mathcal{R}$  — универсальная газовая постоянная,  $M_{\text{mol}}$  — молярная масса газа. Полная энергия единицы объема  $E$  и полная удельная энтальпия  $H$  вычисляются по формулам:  $E = \rho u^2/2 + p/(\gamma - 1)$  и  $H = (E + p)/\rho$ ,  $\gamma$  — показатель адиабаты. Скорость звука находится по формуле  $c = \sqrt{\gamma RT}$ .

Компьютерное моделирование разлета плазмы проводится на основе квазигазодинамической (КГД) системы уравнений [10]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(ju)}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial \Pi_{xx}}{\partial x}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial(jH)}{\partial x} + \frac{\partial q}{\partial x} = \frac{\partial(\Pi_{xx}u)}{\partial x} + Q, \quad (3)$$

$$j = \rho(u - w), \quad w = \frac{\tau}{\rho} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p). \quad (4)$$

Компонента тензора вязких напряжений, входящая в уравнения (2), (3), определяется как

$$\Pi_{xx} = \Pi_{xx}^{NS} + uw^* + R^*,$$

$$\Pi_{xx}^{NS} = \frac{4}{3} \eta \frac{\partial u}{\partial x} + \eta \left( \frac{5}{3} - \gamma \right) B \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (5)$$

$$w^* = \tau \left( \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} \right), \quad R^* = \tau \left( u \frac{\partial p}{\partial x} + \gamma p \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad (6)$$

где  $\Pi_{xx}^{NS}$  — компонента тензора вязких напряжений, входящего в уравнения Навье–Стокса (НС), с учетом объемной вязкости [9]. Коэффициент  $B$  вычисляется следующим образом [11–14]:

$$B = Z_{\text{rot}}(\gamma - 1)(7 - 2\omega)(5 - 2\omega)/20,$$

$$Z_{\text{rot}} = 23/(1 + 0.5\sqrt{91.5\pi^3/T_1} + (\pi + \pi^2/4)(91.5/T_1)).$$

Тепловой поток вычисляется как

$$q = q^{NS} - \tau \rho u \left[ \frac{u}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{p}{\rho} \right) + p u \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\rho} \right) \right],$$

$$q^{NS} = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (7)$$

Коэффициенты динамической вязкости  $\eta$ , теплопроводности  $\kappa$  и релаксационный параметр  $\tau$  связаны соотношениями

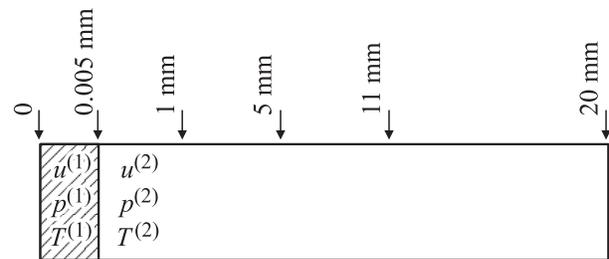
$$\tau = \frac{\eta}{\rho Sc}, \quad \kappa = \frac{\eta Sc}{Pr(\gamma - 1)}, \quad (8)$$

где  $Pr$  и  $Sc$  — числа Прандтля и Шмидта соответственно. Как уже отмечалось, рассматривается разлет молекулярного углерода  $C_2$ , и значения молекулярных параметров равны соответственно [12]:  $V_{\text{mol}} = 346.25$ ,  $\gamma = 7/5$ ,  $\omega = 0.74$ ,  $Pr = 14/19$ ,  $Sc = 0.746$ . Из-за присутствия в задаче значительных перепадов параметров требуется введение искусственной вязкости. В данном случае она вводится следующим образом: для вычисления  $\tau$  вместо (8) используется следующая формула:  $\tau = 0.6h_x/c$ ,  $h_x$  — шаг сетки (см. ниже),  $c$  — скорость звука; значения  $\eta$  и  $\kappa$  вычисляются через  $\tau$  на основе соотношений (8).

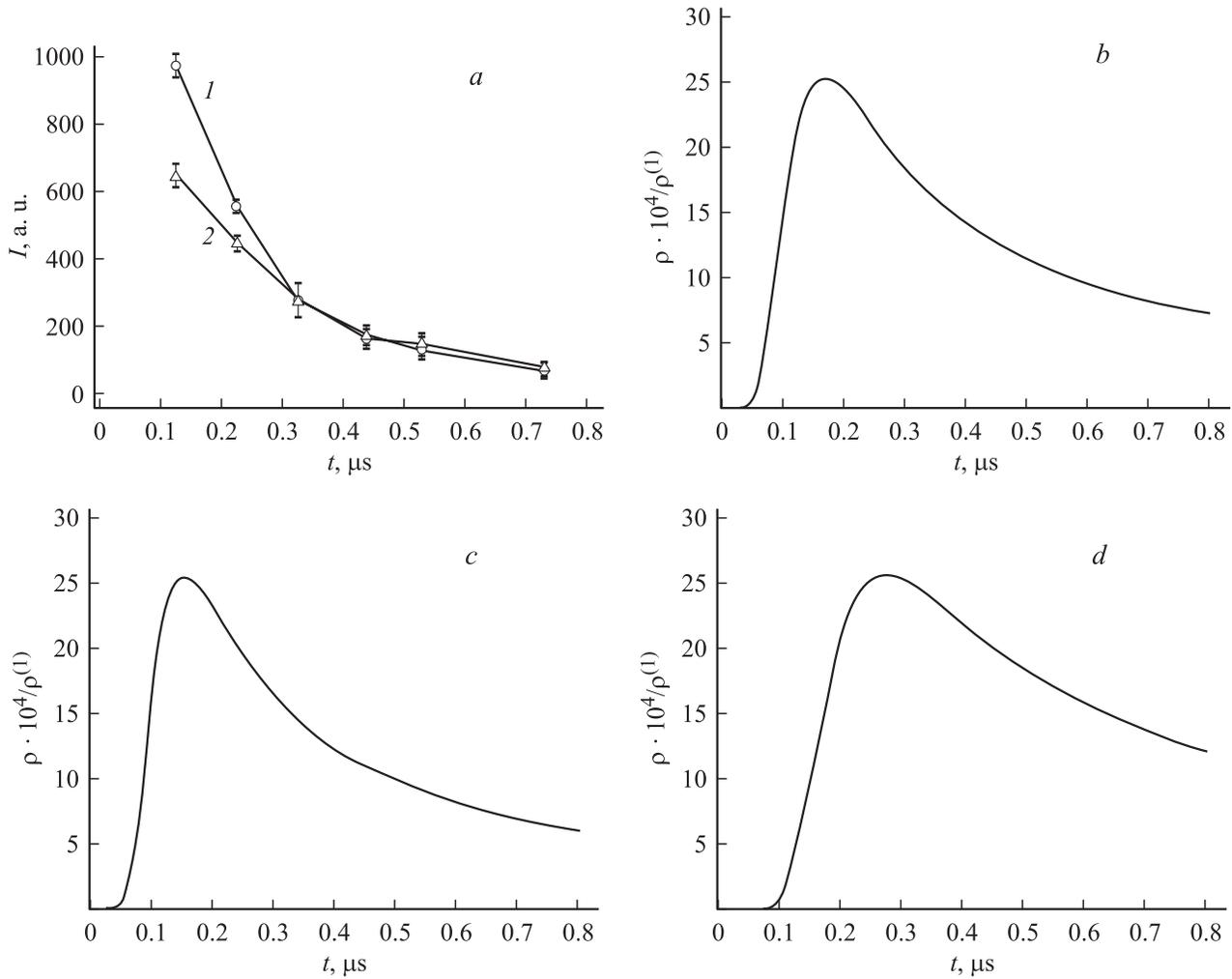
Следует подчеркнуть, что использование ГКД-системы вместо традиционной системы уравнений НС обусловлено более высокой вычислительной устойчивостью численного алгоритма, построенного на ее основе. Как видно из написанного выше, КГД-уравнения отличаются от уравнений НС дополнительными слагаемыми с малым параметром  $\tau$  в качестве коэффициента. Они имеют диссипативный характер, что демонстрируется справедливостью теоремы о неубывании полной термодинамической энтропии в замкнутом объеме, доказанной для этих уравнений, и выполняют роль регуляризаторов. Используемый численный алгоритм был опробован в расчетах сверхзвуковых течений [15]. Подчеркнем также, что в литературе имеется большое число различных разностных схем для рассматриваемого круга задач [16].

## Численный алгоритм

Определим расчетную область как  $0 \leq x \leq L = 0.02m$ , соответствующую эксперименту [1]. В начальный момент времени существует узкая область газа при высоком давлении  $p^{(1)}$  и высокой температуре  $T^{(1)}$ , образовавшаяся после воздействия светового импульса на вещество мишени ( $x \leq l = 5 \cdot 10^{-6}m$ ), и вся оставшаяся область, заполненная газом при низком давлении  $p^{(2)}$  и температуре  $T^{(2)}$  (рис. 1). При этом макроскопическая скорость газа во всей области равна нулю:  $u = 0$ .



**Рис. 1.** Схематическое распределение газа в начальный момент времени и координаты, в которых экспериментально измерялись координаты расширяющегося газа.



**Рис. 2.** Экспериментально измеренные интенсивности спектральных полос молекул  $\text{C}_2$  из [1] (a) и рассчитанные в компьютерном эксперименте изменения плотности молекулярного углерода  $\text{C}_2$  со временем (b–d) для сечения  $x = 1$  mm.

С течением времени происходит расширение области высокого давления в сторону области низкого давления. Таким образом, рассматриваемая задача подобна известной задаче о распаде сильного разрыва [17]. Следует еще раз подчеркнуть, что в работе [8] рассматривается аналогичная задача, но авторы [8] в отличие от нас используют осесимметричную постановку, систему уравнений НС в приближении тонкого слоя и схему предиктор-корректор.

Для компьютерного моделирования в области  $0 \leq x \leq L$ ,  $0 \leq t \leq t_{\max}$  вводится равномерная по пространству и по времени сетка

$$\Omega_{xt} = \omega_x \times \omega_t,$$

$$\omega_x = \{x_i, i = \overline{0, N_x - 1}, x_i = x_0 + h_x i, x_0 = -h_x/2\},$$

$$\omega_t = \{t_j, j = \overline{0, N_t - 1}, t_j = t_0 + h_t j, t_0 = 0\}.$$

Исходя из уже имеющегося опыта параметры сетки выбирались следующими:  $N_x = 45000$ ,  $h_x = 0.45 \cdot 10^{-6}$ ,  $h_t = 2 \cdot 10^{-13}$  s.

Сеточные функции для газодинамических величин  $\rho$ ,  $u$ ,  $p$  определим на введенной сетке:  $\rho_0 \dots \rho_{N_x-1}$ ,  $u_0 \dots u_{N_x-1}$ ,  $p_0 \dots p_{N_x-1}$ . Пространственные производные в (1)–(7) во внутренних узлах сетки аппроксимируются центральными разностями со вторым порядком. Производные по времени аппроксимируются разностями вперед с первым порядком.

На границах области предполагается твердая стенка, и краевые условия имеют следующий вид:  $u = 0$ ,  $\partial p / \partial x = 0$  (дополнительное условие на твердой стенке для КГД-системы, вытекающее из необходимости равенства нулю потока массы [10]),  $\partial \rho / \partial x = 0$  (это следует из предыдущего и предполагаемого  $\partial T / \partial x = 0$  — отсутствие потока тепла).

В разностном виде начальные условия записываются так:

$$u_i = 0, \quad p_i = p^{(1)}, \quad T_i = T^{(1)} \quad \text{при } x_i \leq 5 \cdot 10^{-6};$$

$$u_i = 0, \quad p_i = p^{(2)}, \quad T_i = T^{(2)} \quad \text{при } x_i > 5 \cdot 10^{-6};$$

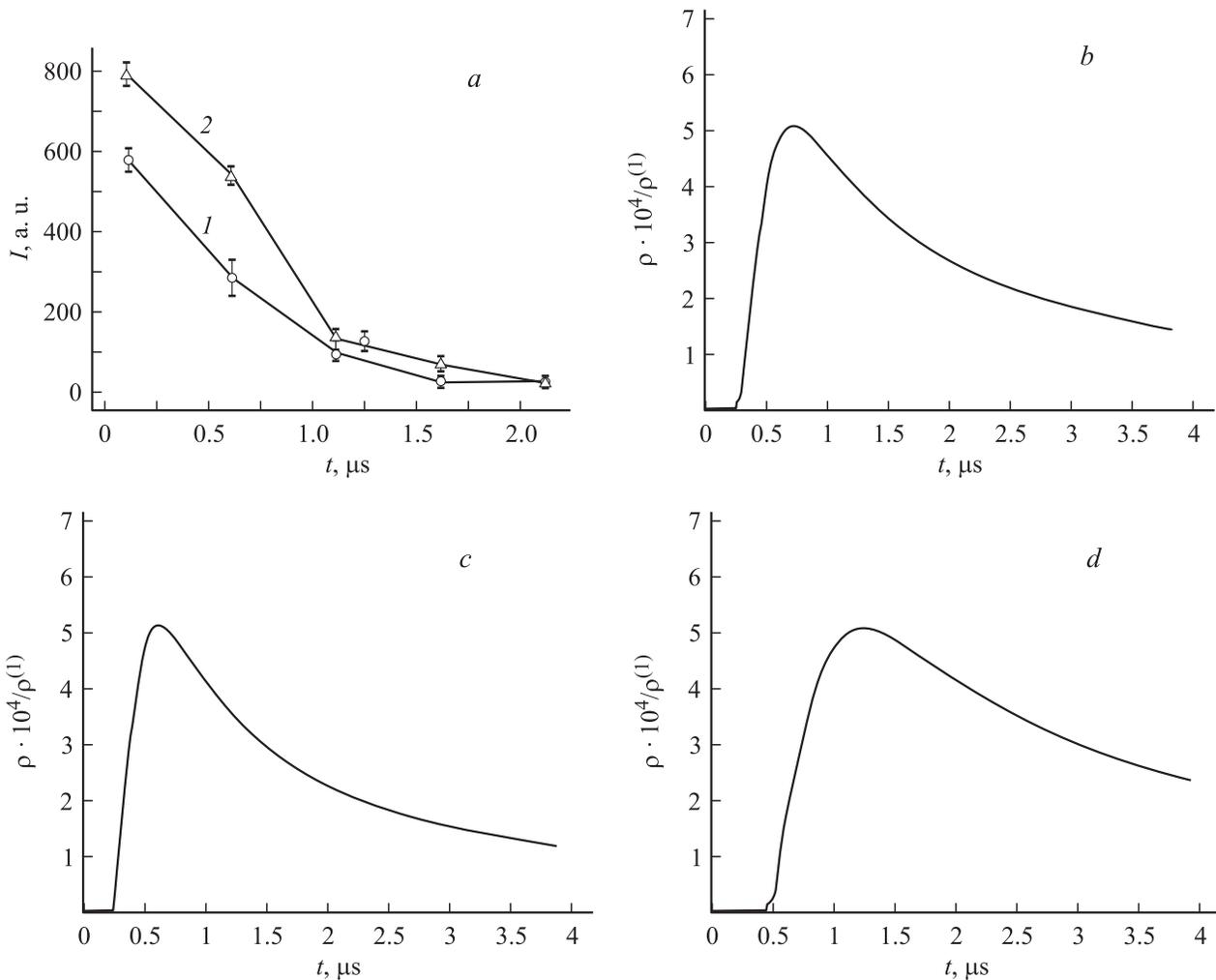


Рис. 3. То же, что для рис. 2,  $x = 5$  mm.

а граничные — следующим образом:

$$\rho_0 = \rho_1, \quad u_0 = -u_1, \quad p_0 = p_1;$$

$$\rho_{N_x-1} = \rho_{N_x-2}, \quad u_{N_x-1} = -u_{N_x-2}, \quad p_{N_x-1} = p_{N_x-2}.$$

## Результаты компьютерного моделирования

Результаты, полученные спектроскопическим методом в эксперименте и на основе компьютерного моделирования (плотность молекулярного углерода  $C_2$  в зависимости от времени), представлены на рис. 2–4 в трех сечениях:  $x = 1, 5$  и  $11$  mm. Динамика изменения интенсивностей спектральных полос Свана и Десландера молекул  $C_2$  при распространении лазерной плазмы в вакууме [1] изображена на рис. 2,  $a$ –4,  $a$ . При этом кривые 1 соответствуют изменению колебательного уровня  $\Delta v = 0$ , а кривые 2 —  $\Delta v = +1$  при переходе с возбужденного электронного состояния в основное. Интенсивность этих полос можно интерпретировать как

величину концентрации молекул  $C_2$  на данном расстоянии от мишени.

На рис. 2,  $b$ –4,  $b$  (вариант „ $b$ “) представлены рассчитанные в компьютерном эксперименте изменения плотности молекулярного углерода  $C_2$ , нормированной на начальное значение  $\rho^{(1)}$ , со временем для следующих начальных условий:  $p^{(1)} = 10^8$  Pa,  $T^{(1)} = 3 \cdot 10^4$  K,  $p^{(2)} = 3$  Pa,  $T^{(2)} = 300$  K,  $\gamma = 1.4$ . Сопоставление рисунков показывает качественное соответствие результатов моделирования экспериментальным данным. Однако скорость распространения лазерного факела оказывается примерно в 2 раза меньше, чем в эксперименте. Такое расхождение можно объяснить упрощением реальной ситуации, имеющей место в эксперименте: в математической модели рассматривается только одно вещество  $C_2$  и не учитываются химические реакции, в то время как в реальном эксперименте в лазерном факеле присутствуют различные кластеры углерода  $C_n$ . Кроме того, начальные условия для компьютерного моделирования имеют неточный характер, поскольку экспериментальные значения соответствующих параметров

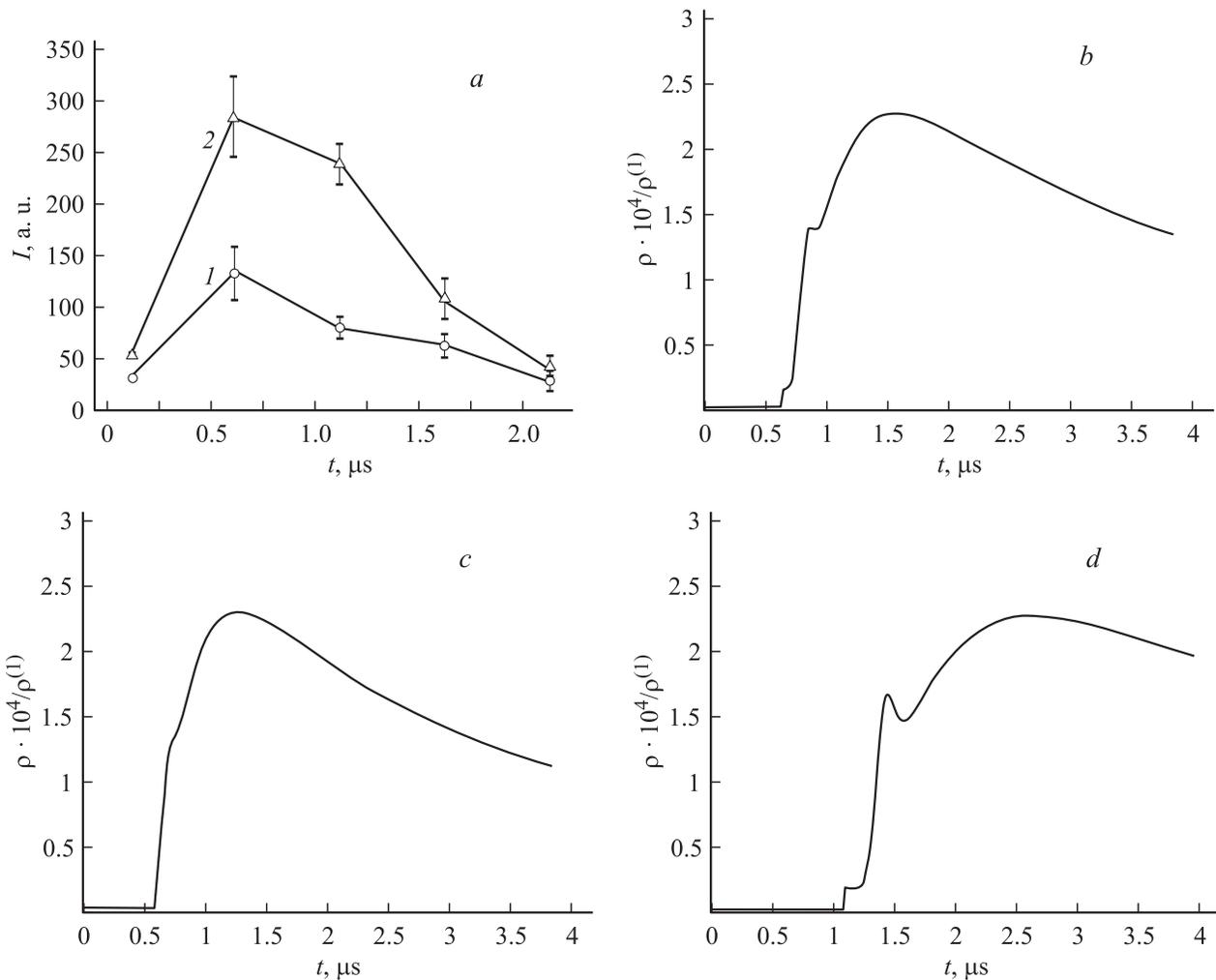


Рис. 4. То же, что для рис. 2,  $x = 11 \text{ mm}$ .

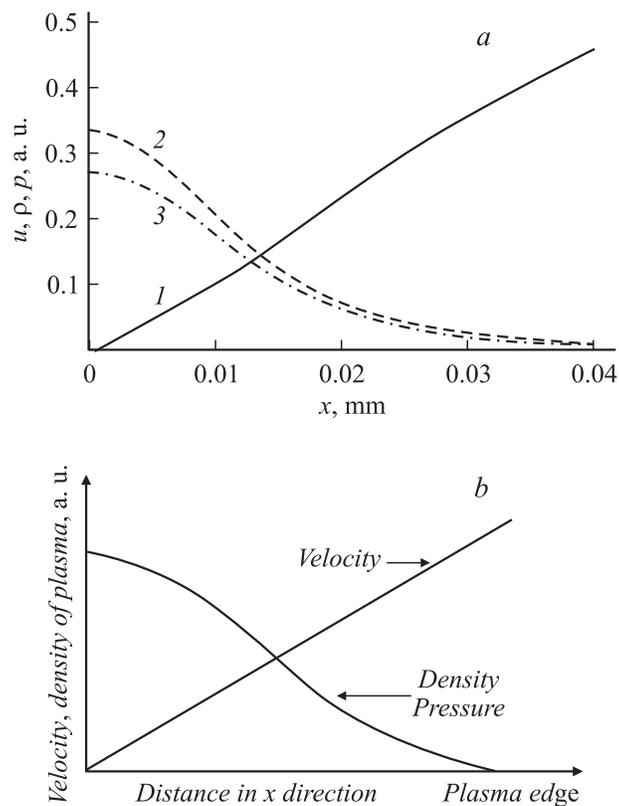
неизвестны. В то же время, как показывает проведенное моделирование, его результаты сильно зависят от начальных условий (рис. 2,  $c, d$ –4,  $c, d$ ). Так, приведенные на рис. 2,  $c$ –4,  $c$  (вариант „ $c$ “) результаты компьютерного моделирования получены при тех же начальных условиях, что и вариант „ $b$ “, но при меньшем значении показателя адиабаты:  $\gamma = 1.2$ . Это соответствует увеличению числа степеней свободы молекулы [13], что можно трактовать как учет присутствия в лазерной плазме кластеров углерода  $C_n$ . Как видно из сравнения графиков, уменьшение показателя адиабаты увеличивает скорость распространения лазерного факела и приближает результаты компьютерного моделирования к экспериментальным данным.

Следующая серия расчетов представлена на рис. 2,  $d$ –4,  $d$  (вариант „ $d$ “), приведены результаты компьютерного моделирования для начальных условий:  $p^{(1)} = 10^{10} \text{ Pa}$ ,  $T^{(1)} = 10^4 \text{ K}$ ,  $p^{(2)} = 10^3 \text{ Pa}$ ,  $T^{(2)} = 300 \text{ K}$ ,  $\gamma = 1.4$ . Следовательно, по сравнению с вариантами „ $b$ “ и „ $d$ “ увеличено начальное давление и уменьшено начальное значение температуры. Видно, что при

этом скорость распространения лазерного факела оказывается меньше, чем в вариантах „ $b$ “ и „ $c$ “.

Общим для всех проведенных расчетов является малое (т.е. начальное) значение плотности углерода в течение некоторого интервала времени. После этого плотность скачкообразно возрастает до ее максимального значения. В этот момент времени основная масса газа достигает соответствующего сечения. В то же время на экспериментальных графиках (рис. 2,  $a$  и 3,  $a$ ) начальное значение плотности не отображается, так как такие малые времена (десятые доли микросекунд) находились за пределами разрешающей способности экспериментальной аппаратуры.

Важно подчеркнуть, что кривые на рис. 4,  $b$  и 4,  $d$  имеют ступенчатый характер. Это соответствует расщеплению фронта лазерного факела на данной дистанции от мишени: часть лазерной плазмы постепенно обгоняет ее основную массу. Таким образом, при определенных условиях может иметь место ударная волна в веществе перед лазерным факелом, которая движется быстрее, чем основная масса лазерного факела, и постепенно опе-



**Рис. 5.** Сравнение результатов компьютерного моделирования для параметров варианта „b“ скорости (1, нормировка  $u/(40\text{ s})$ ), плотности (2,  $\rho/\rho_1$ ) и давления (3,  $p/p_1$ ) для момента времени  $t = 4 \cdot 10^{-9}\text{ s}$  (a) и предполагаемых распределений в аналогичной задаче из [2] (b).

режает его. Это соответствует также результатам [4,5]. Получить ударную волну можно, изменяя как начальные условия распространения газа, так и состав газа.

Для подтверждения правильности компьютерного моделирования на рис. 5 показано сравнение вычисленных для варианта „b“ профилей скорости, плотности и давления вблизи мишени, на которую падает лазерное излучение, для момента времени  $t = 4 \cdot 10^{-9}$  (рис. 5, a) и предполагаемых в [2] профилей в аналогичной задаче (рис. 5, b). Как видим, общая картина течения хорошо соответствует кривым, приведенным в [2] (экспоненциальное уменьшение плотности и давления и линейный рост скорости при увеличении расстояния от мишени). Однако на больших расстояниях от мишени и с течением времени эти профили изменяются, что соответствует распространению лазерной плазмы в направлении от мишени. Подчеркнем, что в работе [2] данные распределения параметров приводятся в предположении изотермического расширения плазмы во время действия лазерного импульса. В настоящей работе результаты компьютерного моделирования также показывают изотермический характер расширения газа вблизи мишени.

## Выводы

Таким образом, в настоящей работе показано, что качественно получить динамику изменения характеристик газа после воздействия наносекундного лазерного импульса на графитовую мишень возможно в рамках модели, учитывающей лишь молекулы одного типа. Изменяя начальные параметры состояния газа и показатель адиабаты (т.е. учитывая вклад других молекул), можно получить формирование ударных волн при распространении лазерного факела. Этот результат согласуется с результатами экспериментов, что показывает адекватность использованной математической модели и численного метода.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ (грант № 04-03-32864).

## Список литературы

- [1] Кузяков Ю.Я., Леднев В.Н., Нольде С.Е. // Химия высоких энергий. 2005. Т. 39. № 39. С. 472–476.
- [2] Singh R.K., Natauan J. // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 41. N 13. P. 8843–8859.
- [3] Kelly R. // Phys. Rev. A. 1992. Vol. 46. N 2. P. 860–874.
- [4] Min Han, Yanshun Cong, Jianteng Zhou et al. // Phys. Lett. A. 2002. Vol. 302. P. 182–189.
- [5] Iitima T.E., Hermann J., Delaporte Ph. et al. // Appl. Surf. Sci. 2003. Vol. 208–209. P. 27–32.
- [6] Каск Н.Е., Мичурин С.В. // ЖТФ. 2005. Т. 31. Вып. 9. С. 6–13.
- [7] Блонский И.В., Данько А.Я., Кадан В.Н., Орешко Е.В., Пузиков В.М. // ЖТФ. 2005. Т. 75. Вып. 3. С. 74–80.
- [8] Булович С.В., Виколайнен В.Э., Зверинцев С.В., Петров Р.Л. // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. Вып. 4. С. 73–78.
- [9] Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1978. 736 с.
- [10] Елизарова Т.Г., Шеретов Ю.В. // ЖВМиМФ. 2001. Т. 41. № 2. С. 239–255.
- [11] Елизарова Т.Г. Математические модели и численные методы в динамике газа и жидкости. М.: Изд-во МГУ, 2005. 226 с.
- [12] Bird G.A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon press, 1998. 458 p.
- [13] Жданов В.М., Алиевский М.Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989.
- [14] Елизарова Т.Г., Серегин В.В. // Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика. Астрономия. 2006. № 1. С. 15–18.
- [15] Елизарова Т.Г., Широков И.А. // Прикладная математика и информатика: Тр. ф-та ВмиК МГУ. М.: МАКС Пресс, 2004. № 18. С. 66–82.
- [16] Кулиновский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Наука, 2001. 607 с.
- [17] Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н. Системы квазилинейных уравнений. М.: Наука, 1978. 688 с.