

01;03

Компьютерное моделирование разлета углеродной лазерной плазмы после абляции в присутствии азотной атмосферы

© В.А. Трофимов, И.А. Широков

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

(Поступило в Редакцию 2 июня 2008 г.)

На основе компьютерного моделирования проанализирована динамика расширения плазмы в атмосфере азота при давлении 10^3 и 10^4 Па после воздействия наносекундного лазерного импульса на графитовую пластинку в рамках технологии лазерной абляции для получения азотоуглеродных нанопленок. Для описания бинарной смеси газов используется макроскопическая квазигазодинамическая модель, учитывающая процессы обмена импульсом и энергией между компонентами смеси. Проведено сравнение результатов моделирования для различных начальных значений температуры и давления лазерного факела как с результатами прямого моделирования Монте-Карло, так и с экспериментальными данными. Продемонстрирована возможность управления режимами распространения ударных волн после абляции путем изменения начальных значений газодинамических параметров. Исследовано влияние азотной атмосферы на процесс распространения лазерного факела.

PACS: 42.62.-b, 78.20.Bh

Введение

Технология лазерной абляции, позволяющая получать нанопленки и наночастицы с заданными свойствами, является одной из наиболее актуальных тем исследовательских работ в последние годы [1–15]. При этом для исследования свойств этих объектов применяются как экспериментальные методики, так и теоретические методы. Среди последних мощным средством для данного класса задач, обладающих большой сложностью, зарекомендовало себя компьютерное моделирование, которое базируется либо на прямом численном моделировании Монте-Карло, либо на конечно-разностных методах для макроскопических уравнений, а также на методе крупных частиц, различных комбинированных подходах. Моделирование позволяет детально изучить различные стадии технологического процесса, такие как взаимодействие лазерного импульса с веществом мишени и собственно процесс абляции, последующий разлет лазерного факела (как в вакууме, так и в присутствии буферного газа) и осаждение лазерной плазмы на подложку. Компьютерное моделирование разлета углеродного лазерного факела проводилось, в частности, нами в [16] в рамках однокомпонентной модели (молекулярный углерод C_2). Тем не менее реальный процесс абляции имеет место, как правило, в газовой среде при низком давлении, т.е. лазерная плазма при разлете взаимодействует с буферным газом. Несмотря на это и некоторые другие упрощения, было достигнуто хорошее качественное согласие результатов компьютерного моделирования с результатами экспериментов, полученными спектроскопическим методом [6].

В настоящей работе для моделирования разлета лазерной плазмы используется более полная математическая

модель, описывающая бинарную смесь газов с целью рассмотрения сложных процессов образования и взаимодействия ударных волн, возникающих при разлете лазерного факела в газовой атмосфере, и выявления рамок применимости однокомпонентной модели.

Аналогично [16] рассматривается разлет сгустка газа в кювете, образовавшегося под действием наносекундного лазерного импульса, в пространственно одномерной постановке. Выбор этой геометрии обусловлен реализацией рассматриваемого процесса в эксперименте. Однако в отличие от этой работы разлет углеродного лазерного факела происходит в присутствии азота, находящегося в кювете при низком давлении. Это позволило определить минимальное значение давления газовой атмосферы, когда буферный газ начинает заметно влиять на процесс разлета лазерного факела, вследствие этого однокомпонентная модель становится неправомерной. Кроме того, для практики представляет интерес изучение динамики распространения лазерной плазмы и ударной волны в буферном газе, так как качество изготовления нанопленок зависит от скорости и плотности взаимодействующих веществ вблизи подложки.

Известно как из эксперимента, так и из результатов моделирования, что при определенных условиях ударная волна, распространяющаяся в буферном газе, может заметно опережать лазерный факел, и после отражения от подложки препятствовать осаждению углерода на подложку, замедляя движение лазерного факела. В результате этого качество нанопленки резко ухудшается. Определение условий, при которых лазерный факел и ударная волна в азоте движутся примерно с равными скоростями, представляет большой практический интерес. Именно эти вопросы детально исследуются в настоящей работе.

Следует подчеркнуть, что изучение подобных процессов широко встречается в литературе, поскольку они часто реализуются на практике. Так, в [2] экспериментально исследуется влияние условий осаждения углеродной плазмы на подложку в присутствии азотной атмосферы. Показана существенная зависимость свойств получающихся углеродных пленок от процентного содержания азота в исходной газовой смеси. Таким образом, исследование эволюции газовой смеси вблизи подложки в процессе ее осаждения может дать информацию о необходимых условиях процесса, в результате которого происходит рост пленок с оптимальными характеристиками.

Работа [3] посвящена теоретическому исследованию распространения углеродного лазерного факела в присутствии буферного газа (аргона, гелия или водорода), выполненному на основе как компьютерного моделирования, так и аналитических методов решения макроскопических уравнений газодинамики. Исследование проводится для различных значений энергии лазерного импульса, температуры и давления буферных газов. Зависимость картины распространения лазерного факела от изменяемых параметров соответствует экспериментальным данным, в частности, линейному росту максимума распределения кинетической энергии с интенсивностью лазерного импульса, а также уменьшению интенсивности абляции с ростом температуры буферного газа (последний эффект связан с усилением взаимодействия между плазмой и лазерным излучением при увеличении температуры плазмы). Экспериментальный эффект увеличения температуры и скорости лазерного факела с уменьшением давления буферного газа также соответствует результатам моделирования, полученным в [3]. Рост скорости разлета лазерной плазмы с уменьшением давления буферного газа показано и в настоящей работе.

В работе [4] метод прямого моделирования Монте-Карло (ПММК) применен для исследования динамики распространения кремниевой лазерной плазмы после абляции в гелиевой атмосфере. Показано, что ударная волна в фоновом газе опережает лазерный факел и после отражения от подложки взаимодействует с факелом, замедляя его движение. Как отмечалось в работе [4], характеристики образующейся смеси лазерной плазмы и буферного газа вблизи подложки существенны для образования наночастиц.

В [5] изучение распространения лазерного факела как в вакууме, так и в буферном газе проводится на основе гибридного численного метода, представляющего собой комбинацию метода крупных частиц и ПММК. Рассматриваются алюминиевые и германиевые мишени и различные буферные газы: аргон и кислород при различных давлениях. Примененный метод позволяет детально исследовать динамику взаимодействия лазерной плазмы и буферного газа и объяснить экспериментальные данные, также полученные в [5]. Кроме того, профили плотности распространяющейся лазерной плазмы и ударной волны в буферном газе, постро-

енные в [5], обнаруживают качественное согласие с профилями, полученными авторами настоящей работы на основе макроскопических уравнений. В частности, эффект „плуга“, описанный в [5], проявляется также в результатах, полученных ниже.

В отличие от авторов упомянутых работ, для компьютерного моделирования разлета лазерного факела в буферном газе мы используем макроскопическую систему уравнений. Возможность применения уравнений газодинамики для расчета подобных задач в случае больших перепадов параметров (до семи порядков!) дает квазигазодинамический подход [17,20], в котором в макроскопические уравнения добавляются диссипативные слагаемые. В результате этого существенно расширяется диапазон параметров газа, для которых можно выполнить компьютерное моделирование на основе макроскопических уравнений газодинамики. Подчеркнем, что использование метода ПММК для расчета нестационарных по времени задач (к которым относится и моделирование разлета лазерного факела) может приводить к существенным вычислительным трудностям из-за необходимости осреднения результатов по большому числу расчетов.

Основные уравнения

Аналогично работе [16] рассматривается разлет сгустка газа в кювете, образовавшегося под действием наносекундного лазерного импульса, после окончания его действия, причем задача решается в пространственно одномерной постановке. Подчеркнем еще раз, что в отличие от этой работы разлет углеродного лазерного факела происходит в присутствии азота (буферного газа), находящегося в кювете при низком давлении. Описание динамики взаимодействия двух различных газов рассматривается в рамках квазигазодинамической системы уравнений для бинарной смеси [17].

Каждая из компонент смеси газа a и газа b описывается тремя независимыми функциями от эйлеровой координаты и времени [18]: $\rho_a(x, t)$ — плотностью газа a , $u_a(x, t)$ — макроскопической скоростью газа a , $p_a(x, t)$ — давлением газа a . Параметры газа b обозначаем $\rho_b(x, t)$, $u_b(x, t)$, $p_b(x, t)$ соответственно. Здесь x — координата, вдоль которой распространяется лазерный факел, t — время. Температуру газов находим из уравнения состояния идеального газа

$$p_a = \rho_a R_a T_a, \quad p_b = \rho_b R_b T_b, \quad (1)$$

где $R_a = \mathcal{R}/M_a$, $R_b = \mathcal{R}/M_b$ — газовые постоянные, \mathcal{R} — универсальная газовая постоянная, M_a, M_b — молярные массы газов. Полная энергия единицы объема (E_a, E_b) и полная удельная энтальпия (H_a, H_b) вычисляются по формулам: $E_a = \rho_a u_a^2/2 + p_a/(\gamma_a - 1)$, $E_b = \rho_b u_b^2/2 + p_b/(\gamma_b - 1)$, $H_a = (E_a + p_a)/\rho_a$, $H_b = (E_b + p_b)/\rho_b$, γ_a, γ_b — показатели адиабаты. Тогда разлет плазмы в рамках выбран-

ного подхода описывается следующей системой квази-газодинамических (КГД) уравнений (для краткости она записана только относительно газа a):

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \frac{\partial j_a}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho_a u_a)}{\partial t} + \frac{\partial(j_a u_a)}{\partial x} + \frac{\partial p_a}{\partial x} = \frac{\partial \Pi_a}{\partial x} + S_a^u, \quad (3)$$

$$\frac{\partial E_a}{\partial t} + \frac{\partial(j_a H_a)}{\partial x} + \frac{\partial q_a}{\partial x} = \frac{\partial(\Pi_a u_a)}{\partial x} + S_a^E, \quad (4)$$

$$j_a = \rho_a(u_a - w_a), \quad w_a = \frac{\tau}{\rho_a} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_a u_a^2 + p_a). \quad (5)$$

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

$$\begin{aligned} \Pi_a &= \Pi_a^{NS} + u_a w_a^* + R_a^*, \\ \Pi_a^{NS} &= \frac{4}{3} \eta_a \frac{\partial u_a}{\partial x} + \eta_a \left(\frac{5}{3} - \gamma_a \right) \frac{\partial u_a}{\partial x}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} w_a^* &= \tau \left(\rho_a u_a \frac{\partial u_a}{\partial x} + \frac{\partial p_a}{\partial x} \right), \\ R_a^* &= \tau \left(u_a \frac{\partial p_a}{\partial x} + \gamma_a p_a \frac{\partial u_a}{\partial x} \right), \end{aligned} \quad (7)$$

где Π_a^{NS} — компонента тензора вязких напряжений, входящего в уравнения Навье–Стокса (НС). Тепловой поток вычисляется как

$$\begin{aligned} q_a &= q_a^{NS} - \tau \rho_a u_a \left[\frac{u_a}{\gamma_a - 1} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p_a}{\rho_a} \right) + p_a u_a \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho_a} \right) \right], \\ q_a^{NS} &= -\kappa_a \frac{\partial T_a}{\partial x}. \end{aligned} \quad (8)$$

Модельные коэффициенты динамической вязкости η_a и теплопроводности κ_a связаны с релаксационным параметром τ следующими соотношениями:

$$\eta_a = \tau p_a / Sc_a, \quad \kappa_a = \frac{\eta_a \gamma_a R_a}{Pr_a (\gamma_a - 1)}, \quad (9)$$

где Pr_a и Sc_a — числа Прандтля и Шмидта соответственно. Как будет видно из дальнейшего изложения, коэффициенты η_a и κ_a играют роль искусственных регуляризирующих коэффициентов. Заметим, что система уравнений для газа b получается из (2)–(9) заменой индекса a и b .

Слагаемые S_a^u и S_a^E в уравнениях (3) и (4) являются обменными членами, описывающими обмен импульсом и энергией между компонентами смеси газов. В уравнении для плотности (2) обменный член отсутствует, поскольку предполагается, что компоненты смеси химически не реагируют друг с другом. Способ вычисления обменных членов приведен в [17] и дает следующие выражения:

$$\begin{aligned} S_a^u &= v_{ab} \rho_a (\bar{u}_a - u_a), \quad S_a^E = v_{ab} (\bar{E}_a - E_a), \\ S_b^u &= -S_a^u, \quad S_b^E = -S_a^E, \end{aligned}$$

где

$$\bar{u}_a = (M_a u_a + M_b u_b) / (M_a + M_b),$$

$$\bar{E}_a = \rho_a \bar{u}_a^2 / 2 + \rho_a R_a \bar{T}_a / (\gamma_a - 1),$$

$$\bar{T}_a = T_a + \frac{2M_a M_b}{(M_a + M_b)^2} \left(T_b - T_a + \frac{1}{6R_b} (u_b - u_a)^2 \right), \quad (10)$$

$$v_{ab} = \frac{p_a}{\eta_a^*} \Omega_a \sqrt{\frac{M_a + M_b}{2M_b}} \frac{\rho_b}{\rho_a} \frac{M_a}{M_b} \quad (11)$$

— частота столкновений молекул газа a с молекулами газа b [19],

$$\Omega_a = \frac{30}{(7 - 2\omega_a)(5 - 2\omega_a)}, \quad \eta_a^* = \eta_a^0 (T_a / T_a^0)^{\omega_a}, \quad (12)$$

ω_a — показатель, описывающий межмолекулярное взаимодействие в газе a , $T_a^0 = 300$ К, η_a^0 — динамическая вязкость газа a при нормальных условиях. Поскольку в качестве газа a рассматривается двухатомный азот N_2 , параметр ω равен 0.74. Вязкость азота при нормальных условиях равна $\eta_a^0 = 1.66 \cdot 10^{-5}$ кг/м · с. Остальные параметры для газов a (N_2) и b (C_2) равны $\gamma_a = \gamma_b = 7/5$, $\omega_a = \omega_b = 0.74$, $Pr_a = Pr_b = 14/19$, $Sc_a = Sc_b = 0.746$ [19]. Молярная масса газов равна $M_a = 0.028$, $M_b = 0.024$ кг/mol, а их газовые постоянные: $R_a = 296.8$ и $R_b = 346.25$.

Из-за присутствия в задаче значительных перепадов давления, плотности и температуры требуется введение искусственной вязкости. Ниже она вводится следующим образом: для вычисления релаксационного параметра τ используется формула:

$$\tau = h_x / (c \cdot Sc_a), \quad (13)$$

h_x — шаг сетки (см. ниже), $c = \sqrt{\gamma_a R_a T_a^{(2)}}$ — скорость звука в азоте при нормальных условиях; значения η_a , κ_a вычисляются через τ на основе соотношений (9). Величины η_b , κ_b вычисляются через соотношения, аналогичные (9) с заменой индекса a на b . Заметим, что для задач с меньшими значениями градиентов параметров (в частности, при расчетах структур ударных волн в газе с фиксированным числом Маха) данный метод работает без введения искусственной вязкости.

Следует подчеркнуть, что использование КГД-системы вместо традиционной системы уравнений Навье–Стокса (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 τ в качестве коэффициента. Они имеют диссипативный характер, что демонстрируется справедливостью теоремы о неубывании полной термодинамической энтропии и замкнутом объеме, доказанной для этих уравнений, и выполняют роль регуляризаторов.

Численный алгоритм

Определим расчетную область как $0 \leq x \leq L = 0.0202$ м, соответствующую эксперименту [6]. В начальный момент времени узкая область вблизи стенки ($x \leq l = 5 \cdot 10^{-6}$ м) заполнена газом b (C_2) при высоком давлении $p_b^{(1)}$ и высокой температуре $T_b^{(1)}$. Эта область сформировалась под воздействием светового импульса на вещество мишени. Другая часть расчетной области ($x > l$) также должна содержать газ b при низком давлении $p_b^{(2)}$, поскольку применяемый численный метод требует задания ненулевых значений давления и плотности. По этой же причине вся расчетная область $0 \leq x \leq L$ должна быть заполнена газом a (N_2), хотя нас интересует взаимодействие газов только при $x > l$. Макроскопическую скорость обоих газов в начальный момент во всей области полагаем равной нулю.

С течением времени высокотемпературная область b (углерода) расширяется в область $x > l$: происходит распад сильного разрыва. Из-за взаимодействия газов a и b расширение газа b (углерода) вызывает формирование ударной волны также в газе a (азоте). Применяемый метод компьютерного моделирования позволяет детально исследовать распространение этих ударных волн.

Для компьютерного моделирования в области $0 \leq x \leq L$, $0 \leq t \leq t_{\max}$ введем равномерную по пространству и по времени сетку $\Omega_{xt} = \omega_x \times \omega_t$, $\omega_x = \{x_i, i = \overline{0, N_x - 1}, x_i = x_0 + h_x i, x_0 = -h_x/2\}$, $\omega_t = \{t_j, j = \overline{0, N_t - 1}, t_j = t_0 + h_t j, t_0 = 0\}$. Параметры сетки выбирались следующими: $N_x = 9000$, $h_x = 2.25 \cdot 10^{-6}$ м.

Численный метод, применяемый в данной работе, детально описан в [16]. Сеточные функции для газодинамических величин газов a и b определяются в точках сетки. Пространственные производные в (2)–(8) во внутренних узлах сетки аппроксимируем центральными разностями со вторым порядком. Производные по времени аппроксимируем разностями вперед с первым порядком. Шаг по времени в начальный момент равен $h_t = 5 \cdot 10^{-14}$ с, а в дальнейшем шаг по времени может модифицироваться в соответствии со следующим алгоритмом: на каждом 10-м шаге по времени вычисляется величина

$$C_{ht} = \max_{i,a,b} \left[\left(\frac{\rho_{i+1}}{\rho_i} + \frac{\rho_i}{\rho_{i+1}} \right), \left(\frac{p_{i+1}}{p_i} + \frac{p_i}{p_{i+1}} \right) \right],$$

где максимум берется как по точкам сетки, так и среди значений для газов a и b , и шаг по времени корректируется: при $C_{ht} \leq 3$ $h_t = 5 \cdot 10^{-14}$ с, при $2.01 \leq C_{ht} < 3$ $h_t = 2.5 \cdot 10^{-13}$ с, при $C_{ht} < 2.01$ $h_t = 5 \cdot 10^{-13}$ с.

На границах области ($x = 0$ и $x = L$) предполагается твердая стенка: имеет место упругое взаимодействие с ней молекул газа. Поэтому краевые условия для обоих газов имеют следующий вид:

- $u = 0$ (условие непротекания);
- $\partial p / \partial x = 0$ (равенство нулю нормальной производной давления — это дополнительное условие на твердой

стенке для КГД-системы, вытекающее из необходимости равенства нулю потока массы [20]);

— $\partial \rho / \partial x = 0$ (это условие следует из предыдущего и предполагаемого $\partial T / \partial x = 0$ — отсутствие потока тепла).

В разностном виде начальные условия записываются так:

$$\begin{aligned} u_{ai} &= 0, & p_{ai} &= p_a, & \rho_{ai} &= \rho_a & \text{при всех } x_i; \\ u_{bi} &= 0, & p_{bi} &= p_b^{(1)}, & \rho_{bi} &= \rho_b^{(1)} & \text{при } x_i \leq 5 \cdot 10^{-6}; \\ u_{bi} &= 0, & p_{bi} &= p_b^{(2)}, & \rho_{bi} &= \rho_b^{(2)} & \text{при } x_i > 5 \cdot 10^{-6}, \end{aligned} \quad (14)$$

а граничные — следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho_{a0} &= \rho_{a1}, & u_{a0} &= -u_{a1}, & p_{a0} &= p_{a1}; \\ \rho_{a(N_x-1)} &= \rho_{a(N_x-2)}, & u_{a(N_x-1)} &= -u_{a(N_x-2)}, \\ p_{a(N_x-1)} &= p_{a(N_x-2)}. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь выписаны начальные и граничные условия для газа a . Граничные условия для газа b получаются из (15) заменой индекса a на b .

Результаты компьютерного моделирования

Ниже представлены результаты компьютерного моделирования распространения лазерного факела для пяти вариантов, которые назывались начальными условиями. Однако следующие параметры оставались одними и теми же: начальная температура буферного газа a $T_a = 300$ К, начальная температура $T_b^{(2)} = 300$ К и давление $p_b^{(2)} = 10^3$ Па газа b в области $x > l$. При этом начальные значения плотности газов a и b определялись через значения давления и температуры на основе уравнений состояния (1). Кратко опишем остальные параметры.

Варианту **1** соответствуют следующие начальные условия давления $p_a = 10^3$, $p_b^{(1)} = 10^{10}$ Па и температуры $T_b^{(1)} = 10^4$ К. При этом вариант **2** отличается от варианта **1** только на порядок большим значением начального давления буферного газа a : $p_a = 10^4$ Па.

Вариант **3** характеризуется следующими начальными условиями: $p_a = 10^3$ Па, $p_b^{(1)} = 10^9$ Па, $T_b^{(1)} = 3 \cdot 10^4$ К. Сравнивая параметры варианта **3** и варианта **1**, видим, что при этом наборе параметров на порядок меньше начальное давление лазерного факела, но в 3 раза выше его температура. Вариант **4** отличается от варианта **3** на порядок большим значением начального давления буферного газа a : $p_a = 10^4$ Па.

Наконец, последний вариант **5** соответствует присутствию только газа b (молекулярный углерод C_2) без буферного газа a . Данный случай детально анализировался в [16]. Исходя из цели, заключающейся в определении области применимости модели одного газа, начальные

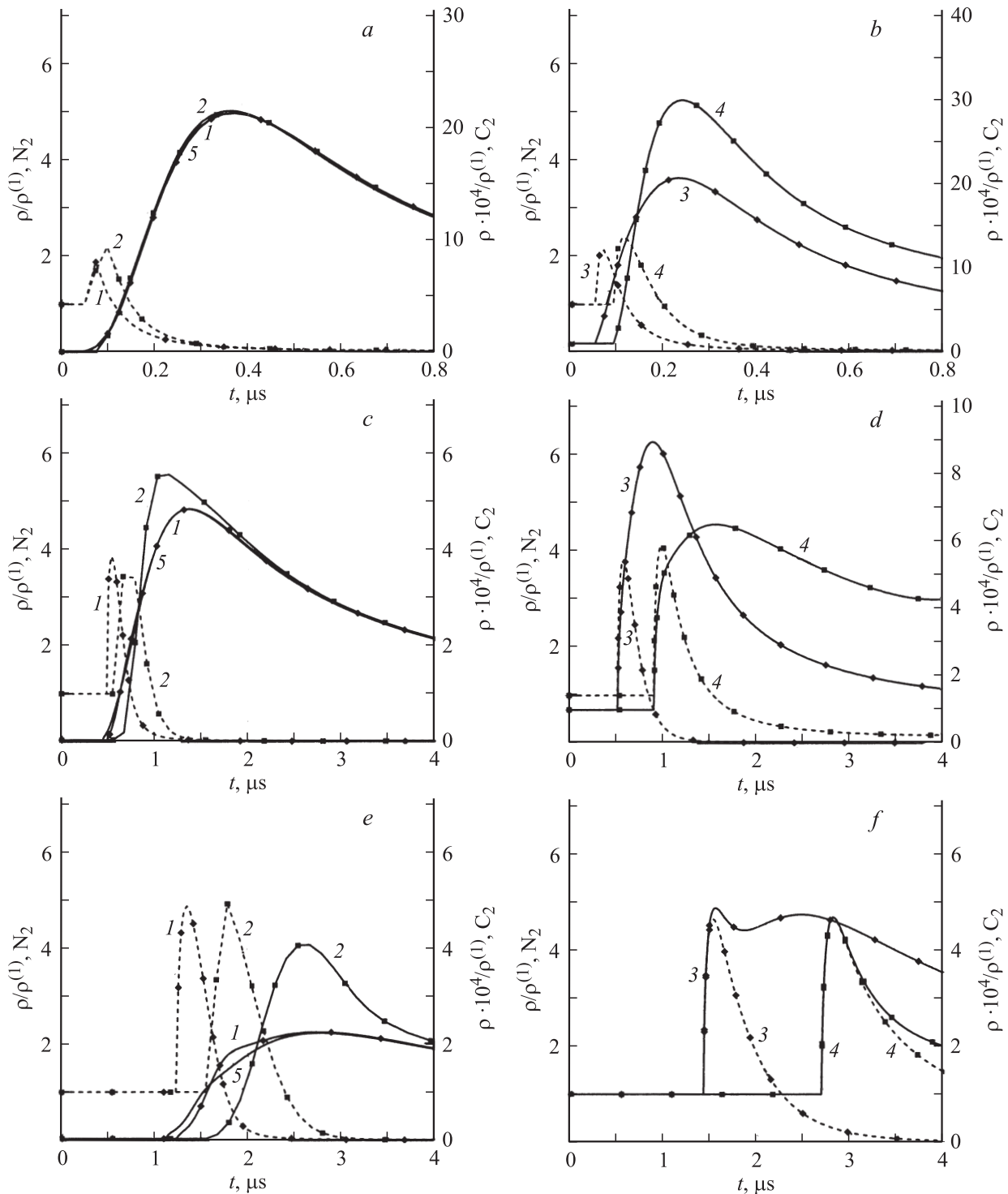


Рис. 1. Динамика плотности C_2 (сплошные кривые) и N_2 (пунктир) во времени на расстоянии $x = 1$ (*a, b*), 5 (*c, d*) и 11 mm (*e, f*) от мишени для вариантов **1** (кривые 1), **2** (2), **3** (3), **4** (4), **5** (5); $-\diamond-$ — $P_b = 10^3$, $-\blacksquare-$ — 10^4 Pa.

значения параметров газа b в этом варианте такие же, как и в вариантах **1** и **2**. Таким образом, сравнение результатов расчетов, соответствующих параметрам этих вариантов, позволяют определить степень влияния буферного газа на процесс разлета углеродной лазерной плазмы.

Результаты компьютерного моделирования в виде зависимости плотности молекулярного углерода C_2 (газ b , сплошные кривые) и азота N_2 (газ a , пунктир) от времени — представлены на рис. 1 соответственно для трех сечений: $x = 1$ mm (*a, b*), 5 mm (*c, d*) и 11 mm (*e, f*), в которых выполнялись измерения в экспериментальной

работе [6]. Номера кривых соответствуют варианту расчета. Результаты компьютерного моделирования приведены в нормированном на начальные значения виде.

Сравнение кривых 1, 2 и 5 (рис. 1, *a, c, d*) показывает, что присутствие буферного газа при давлении 10^4 Па замедляет движение плазменного факела, причем оно существенно проявляется только на достаточно большом удалении потока от мишени. Присутствие буферного газа при давлении 10^3 Па слабо сказывается на движении лазерного факела (кривые 5, соответствующие распространению лазерной плазмы без буферного газа, мало отличаются от профилей 2 для разлета плазмы в присутствии буферного газа с давлением 10^3 Па), а буферный газ с давлением 10^4 Па уже существенно тормозит разлет факела и уменьшает скорость его приближения к подложке. Влияние буферного газа может существенно изменять характеристики процесса роста пленки при осаждении лазерной плазмы на подложку. В частности, замедление скорости углеродной плазмы и увеличение концентрации азота вблизи мишени может приводить к увеличению скорости образования нитридоуглеродных соединений и изменению химического состава получающихся пленок.

Подчеркнем, что представленные расчеты выполнены на сетке с числом точек $N_x = 9000$, в то время как в работе [16] расчеты в аналогичной постановке проводятся на более частой сетке: $N_x = 45\,000$. Использование более грубой сетки в настоящей работе обусловлено применением модели бинарной смеси газов, которая является намного более ресурсоемкой по сравнению с моделью одного газа, использованной в [16]. В то же время искусственная вязкость вводится одинаково в этих работах. Следовательно, так как в данной работе используется шаг сетки по пространству h_x больше, то и диссипативные члены в уравнениях тоже увеличиваются, что приводит к небольшому размыванию газодинамических профилей по сравнению с [16]. В частности, эффект расщепления фронта лазерного факела, отмеченный в [16], не проявляется на рис. 1, *a, c, e* (этот эффект заметен в варианте 3, рис. 1, *f*). За исключением этого эффекта характеристики разлета факела, с моделированного в данной работе, очень хорошо соответствуют ранее полученным результатам, полученным в [6].

Кривые 3, 4 (рис. 1, *b, d, f*) демонстрируют возможность такого выбора начальных условий, при которых происходит одновременное распределение лазерного факела и ударной волны в буферном газе. Видно, что в вариантах 3, 4, соответствующих меньшему начальному значению давления лазерной плазмы по сравнению с вариантами 1, 2, буферный газ оказывает более существенное влияние на распространение лазерного факела, чем в вариантах 1, 2, и это влияние проявляется раньше — на меньших дистанциях от мишени.

На рис. 2, *a* приведены профили концентрации молекул C_2 (сплошная кривая 1) и N_2 (пунктирная кривая 2), полученные в результате компьютерного моделирования

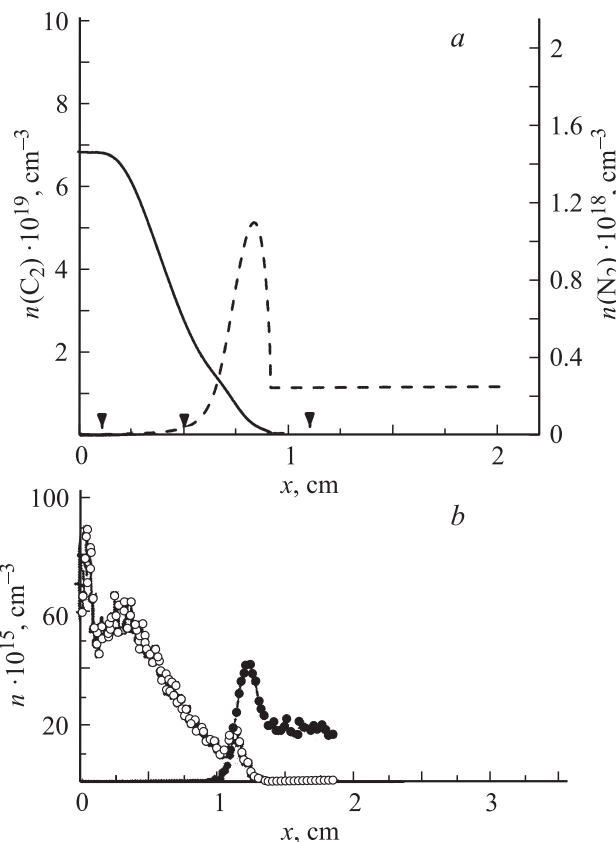


Рис. 2. Профили концентрации молекул C_2 (сплошная кривая) и N_2 (пунктир), рассчитанные в варианте 1 (*a*), и взятые из [5] профили для лазерного факела (\square) и буферного газа (\bullet) (*b*) для момента времени $1 \mu\text{s}$ после абляции.

в варианте 1, в зависимости от расстояния от мишени для момента времени $1 \mu\text{s}$ после абляции. Маркеры в виде черных треугольников обозначают сечения, соответствующие нормированным профилям плотности C_2 и N_2 , приведенным на рис. 1. На рис. 2, *b* показаны профили концентраций лазерного факела (светлые символы) и буферного газа (темные символы), полученные в [5] методом прямого численного моделирования Монте-Карло, также для момента времени $1 \mu\text{s}$ после абляции. Несмотря на то что в [5] рассматривается другая постановка задачи (алюминиевая мишень, буферный газ — кислород при давлении 70 Па), сопоставление рис. 2, *a* и 2, *b* показывает качественное согласие результатов, полученных авторами на основе макроскопической газодинамической модели, и результатов прямого численного моделирования. Плотность лазерного факела и буферного газа на рис. 2, *a* на два порядка больше, чем на рис. 2, *b*, но скорости распространения ударных волн различаются всего в полтора раза, и основные особенности распространения, полученные на основе различных численных методов, сходны. В частности, хорошо заметен эффект „плуга“ — выталкивание буферного газа из зоны лазерного факела и скачок давления в буферном газе. Как указано в [5], этот эффект проявляется при достаточно больших начальных значениях давления

буферного газа. Однако эффект расщепления фронта лазерного факела, видимый на рис. 2, *b* и полученный авторами в [16], почти не заметен на рис. 2, *a*. Как указано выше, это происходит вследствие размывания газодинамических профилей из-за использования больших значений искусственной вязкости.

Выводы

В настоящей работе представлены результаты компьютерного моделирования разлета углеродного лазерного факела после абляции в присутствии азотной атмосферы (буферного газа) при различных значениях соотношения начального давления и температуры. Показано, что при давлениях, меньших некоторого критического значения, буферный газ не оказывает существенного влияния на факел и, следовательно, в этом случае однокомпонентная модель, использованная в [16], оказывается применимой. Оценка величины критического давления приведена выше. Продемонстрировано, что выбором начальных условий можно реализовать одинаковую скорость фронта лазерной плазмы и ударной волны в буферном газе. Показано хорошее качественное согласие результатов компьютерного моделирования на основе макроскопической газодинамической модели с результатами, полученными методом прямого численного моделирования Монте-Карло, что говорит об адекватности применения макроскопической модели к задачам моделирования лазерной абляции.

Список литературы

- [1] *Singh R.K., Narayan J.* // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 41. N 13. P. 8843–8859.
- [2] *Клюй Н.И., Литовченко В.Г., Лукьянов А.Н., Неселевская Л.В., Сариков А.В., Дыскин В.Г., Газиев У.Х., Сеттарова З.С., Турсунов М.Н.* // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 5. С. 122–126.
- [3] *Zhang Zh., Gogos G.* // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 69. N 235432. P. 1–9.
- [4] *Min Han, Yanchun Crong, Jianteng Zhou et al.* // Phys. Lett. A. 2002. Vol. 302. P. 182–189.
- [5] *Itina T.E., Hermann J., Delaporte Ph. et al.* // Appl. Surface Sci. 2003. Vol. 208–209. P. 27–32.
- [6] *Кузьяков Ю.Я., Леднев В.Н., Нольде С.Е.* // Химия высоких энергий. 2005. Т. 39. № 6. С. 472–476.
- [7] *Mao X., Wen S.B., Russo R.E.* // Appl. Surface Sci. Proc. 5th Int. Conf. on Photo-Excited Processes and Applications. 2007. Vol. 253. N 15. P. 6316–6321.
- [8] *Povarnitsyn M.E., Itina T.E., Khishchenko K.V., Levashov P.R.* // Ibid. P. 6343–6346.
- [9] *Pathak K., Povitsky A.* // Ibid. P. 6359–6365.
- [10] *Anisimov S.I., Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Nishihara K., Petrov Yu.V.* // Ibid. P. 6390–6393.
- [11] *Liu X., Metcalf T.H., Mosaner P., Miotello A.* // Ibid. P. 6480–6486.
- [12] *Тюрнина А.В., Золотухин А.А., Образцов А.* // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. Вып. 17. С. 1–6.

- [13] *Захидов А.А., Клименко О.А., Попов И.А., Золотухин А.А., Образцов А.Н.* // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. Вып. 14. С. 1–9.
- [14] *Сейсян Р.П., Ермакова А.В., Калитеевская Н.А., Марков Л.К., Рымалис М.Р.* // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. Вып. 7. С. 64–70.
- [15] *Мажукин В.И., Носов В.В.* // Квант. электрон. 2005. Т. 35. № 5. С. 454–466.
- [16] *Кузьяков Ю.Я., Трофимов В.А., Широков И.А.* // ЖТФ. 2008. Т. 78. Вып. 2. С. 14–19.
- [17] *Елизарова Т.Г.* Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007. 351 с.
- [18] *Лойцянский Л.Г.* Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1978. 736 с.
- [19] *Bird G.A.* Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon press, 1998. 458 p.
- [20] *Елизарова Т.Г., Шеретов Ю.В.* // ЖВМиМФ. 2001. Т. 41. № 2. С. 239–255.