

УДК 5539.216.1; 517.958:531.1

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПРОДУКТОВ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ

© 2013 г.

*Д.Н. Бухаров, А.О. Кучерик*

Владимирский госуниверситет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых

buharovdn@gmail.com

Поступила в редакцию 30.11.2012

Рассмотрены результаты экспериментальных и теоретических исследований процессов распространения лазерно-индуцированной плазмы в задаче прямого лазерного напыления. Для моделирования процесса распространения плазмы была предложена математическая модель, основанная на гидродинамическом подходе. Предложенная модель позволяет определить возникающие особенности в распространении потока вблизи поверхности подложки.

*Ключевые слова:* математическое моделирование, лазерная абляция, осаждение.

### Введение

Метод прямого лазерного осаждения – перспективный способ получения наноструктурированных покрытий на поверхности оптически прозрачных сред. Особый интерес в использовании этого метода представляет задача лазерного синтеза углеродных наноструктурированных покрытий с управляемой топологией. В работах [1, 2] показано, что изменение геометрии и условий эксперимента способно приводить к изменению морфологии осажденного слоя. Преимуществом предлагаемого метода является возможность получения стабильных углеродных покрытий в атмосферном воздухе. Для управления топологией синтезируемого слоя необходимо иметь возможность предсказывать структуру области осаждения продуктов лазерной абляции. В настоящей работе проведены эксперименты, позволяющие определить особенность процесса осаждения в зависимости от условий эксперимента. На основе полученных экспериментальных данных предложена математическая модель процесса распространения и осаждения продуктов абляции из лазерно-индуцированного плазменного факела.

### 1. Экспериментальные результаты

Схема эксперимента показана на рис. 1. Использовался источник непрерывного лазерного излучения YAG:Nd<sup>3+</sup> с длиной волны 1.06 мкм. Мощность излучения варьировалась в диапазоне от 5 до 50 Вт, диаметр лазерного пучка на поверхности углеродной мишени (спектрально

чистый графит,  $h \sim 25 \mu\text{м}$ ,  $d \sim 400 \mu\text{м}$ ,  $H = 500 \mu\text{м}$ ) составлял 100 мкм, расстояние от поверхности мишени до плоскости подложки, на которой происходило формирование наноструктур, изменялось от 0.1 мм до 1 мм, время облучения лазерным пучком составляло 20 секунд.

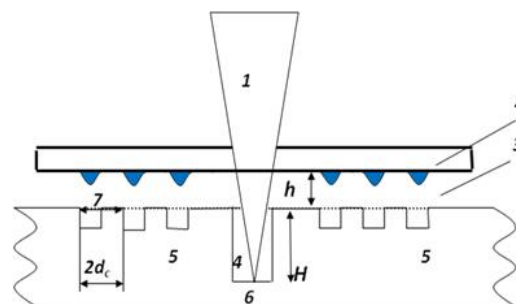


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1 – лазерное излучение; 2 – подложка, прозрачная для излучения лазера, на которой формируется осажденный слой; 3 – газодинамический канал, по которому происходит транспортировка испаренного вещества; 4 – входной канал (диаметром  $d$ ), ограниченный боковыми стенками 5; 6 – область взаимодействия лазерного излучения с мишенью;  $H$  – высота боковых стенок;  $h$  – высота канала; 7 – периодический рельеф (имеет глубину впадины  $h_c$  и шаг  $d_c$ ) газодинамического канала

После лазерного воздействия поверхность холодной подложки исследовалась с помощью атомно-силового микроскопа. Было установлено, что в области подложки, центр которой совпадает с областью прохождения лазерного луча сквозь подложку, осажденный слой не формируется. Размер этой области изменяется от 50 до

200 мкм, и уменьшается с увеличением мощности. Далее, на расстоянии, примерно равном расстоянию до внутреннего края (200–500 мкм) технической оснастки, формируется равномерно осажденный слой. Структура осаждения внутри сформировавшегося канала и за его пределами существенно изменяется.

Внутри канала, образованного плоскостью подложки и поверхностью оснастки, формируется сложный профиль со средней высотой 150 нм. За его пределами в области свободного расширения парогазового облака происходит самоорганизация осажденного слоя и наблюдается формирование кольцевых структур диаметром 1–2 мкм и средней высотой 30 нм.

На рис. 2, 3 видно, что использование газодинамического канала с периодической системой впадин позволяет упорядочивать осаждение на поверхности подложки.

Объяснение процесса образования полученной структуры осажденного слоя проведем в следующем пункте в рамках математической модели движения лазерно-индуцированной плазмы, формирующей парогазовое облако.

## 2. Математическая и численная модели

Достаточно удобным и простым способом моделирования движения продуктов лазерной абляции является использование подходов в рамках гидродинамической модели [2]. Расчет гидродинамической модели в первом приближении позволяет определить области с достаточно большими концентрациями продуктов лазерной абляции.

Гидродинамическая модель распространения продуктов лазерной абляции описывается стационарными уравнениями Навье–Стокса для задачи с плоской геометрией [3].

Математическая модель – система безразмерных дифференциальных уравнений и граничных условий для функции тока и вихря [4]:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial \omega}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial \omega}{\partial y} = \frac{1}{\text{Re}} \left( \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right),$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\omega, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} = v_x, \quad -\frac{\partial \Psi}{\partial x} = v_y,$$

где  $\Psi$  – функция тока,  $\omega$  – вихрь,  $v_x, v_y$  – проекции скорости на оси координат.

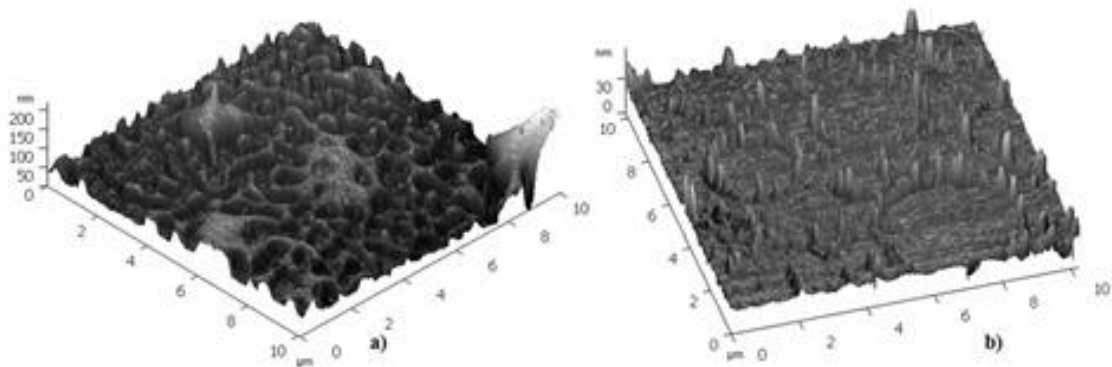


Рис. 2. Изменение структуры осажденного слоя: а) внутри области технологической оснастки; б) за границей области технологической оснастки

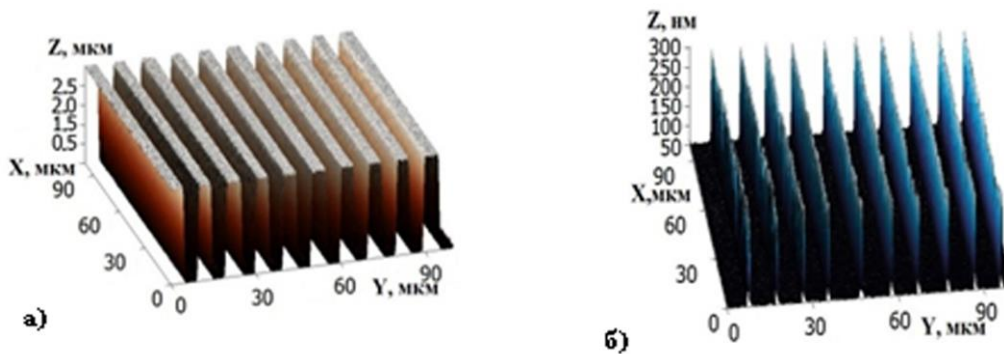


Рис. 3. Изображения поверхности осажденного на подложку слоя (б); изображения поверхности, полученные на АСМ, при воздействии с использованием газодинамического канала с шагом периодического рельефа  $d_c=5$  мкм,  $h_c=3$  мкм (а).

Граничные условия на входном и выходных сечениях представляют точные значения, исходя из соответствующих значений для течения Пуазейля, на стенках канала значения функции тока заданы точно – исходя из условий прилипания. Значения вихря на твердых стенках задаются приближенно по формуле Вудса и уточняются в процессе расчета.

При построении численной модели использовалась равномерная сетка. Разностные уравнения для определения решения в узлах сетки получены на пятиточечном шаблоне.

Уравнение для вихря имеет вид:

$$C\omega_{i,k} = A_1\omega_{i-1,k} + B_1\omega_{i+1,k} + A_2\omega_{i,k-1} + B_2\omega_{i,k+1},$$

$$A_1 = \left( \frac{1}{1 + \text{Re} |u_{i-1/2}| hx / 2} + \text{Re} u_{i-1/2}^+ hx \right) \frac{1}{hx^2},$$

$$B_1 = \left( \frac{1}{1 + \text{Re} |u_{i+1/2}| hx / 2} - \text{Re} u_{i+1/2}^- hx \right) \frac{1}{hx^2},$$

$$A_2 = \left( \frac{1}{1 + \text{Re} |v_{k-1/2}| hy / 2} + \text{Re} v_{k-1/2}^+ hy \right) \frac{1}{hy^2},$$

$$B_2 = \left( \frac{1}{1 + \text{Re} |v_{k+1/2}| hy / 2} - \text{Re} v_{k+1/2}^- hy \right) \frac{1}{hy^2},$$

$$C = A_1 + B_1 + A_2 + B_2,$$

$$u_{i+1/2} = \frac{\Psi_{i+1,k+1} + \Psi_{i,k+1} - \Psi_{i+1,k-1} - \Psi_{i,k-1}}{4hy},$$

$$u_{i-1/2} = \frac{\Psi_{i-1,k+1} + \Psi_{i,k+1} - \Psi_{i-1,k-1} - \Psi_{i,k-1}}{4hy},$$

$$v_{k-1/2} = \frac{\Psi_{i-1,k-1} + \Psi_{i-1,k} - \Psi_{i+1,k-1} - \Psi_{i+1,k}}{4hx},$$

$$u^+ = \frac{1}{2}(u + |u|) = \begin{cases} u, & \text{если } u \geq 0, \\ 0, & \text{если } u < 0, \end{cases}$$

$$u^- = \frac{1}{2}(u - |u|) = \begin{cases} u, & \text{если } u \geq 0, \\ 0, & \text{если } u < 0, \end{cases}$$

где  $hx, hy$  – шаги сетки,  $u_{i+1/2}, u_{i-1/2}, v_{k+1/2}, v_{k-1/2}$  – аппроксимации скоростей в полушаге от узла  $(x_i, y_i)$ ,  $A_1, B_1, A_2, B_2$  – коэффициенты разностной схемы.

Уравнение для функции тока:

$$\left( \frac{2}{hx^2} + \frac{2}{hy^2} \right) \Psi_{i,k} = \frac{\Psi_{i-1,k} + \Psi_{i+1,k}}{hx^2} + \frac{\Psi_{i,k-1} + \Psi_{i,k+1}}{hy^2} + \omega_{i,k}.$$

Разностная схема аппроксимирует исходную задачу со вторым порядком приближения относительно шагов сетки. Уравнения для вихря получены на основе интегрального метода, так что разностная схема является консервативной.

Важной особенностью схемы является монотонность, которая обеспечивает ее устойчивость без специальных ограничений на величину шагов сетки. Система уравнений относительно значений решения в узлах сетки решается методом релаксации.

В этом случае уравнения для функции тока и вихря имеют вид:

$$\Psi_{i,k}^{s+1} = (1 - q_\Psi) \Psi_{i,k}^s + q_\Psi \left( \frac{1}{hx^2} (\Psi_{i-1,k}^{s+1} + \Psi_{i+1,k}^s) + \frac{1}{hy^2} (\Psi_{i,k-1}^{s+1} + \Psi_{i,k+1}^s) + \omega_{i,k}^{s+1} \right) / \left( \frac{2}{hx^2} + \frac{2}{hy^2} \right),$$

$$\omega_{i,k}^{s+1} = (1 - q_\omega) \omega_{i,k}^s + q_\omega \frac{(A_1 \omega_{i-1,k}^{s+1} + B_1 \omega_{i+1,k}^s + A_2 \omega_{i,k-1}^{s+1} + B_2 \omega_{i,k+1}^s)}{C},$$

где  $s$  – номер итерации,  $q_\Psi, q_\omega$  – параметры релаксации.

Процесс итерационного уточнения решения задачи не может продолжаться бесконечно, поэтому необходимо сформировать условие его окончания: критерий сходимости итераций. В нашем случае итерации можно прекращать, если на некотором  $(s+1)$ -м шаге будет выполнено условие:  $\max(\varepsilon_\omega, \varepsilon_\Psi) < \varepsilon = 10^{-3} - 10^{-4}$ , где

$$\varepsilon_\omega = \max_{i,k} |\omega_{i,k}^{s+1} - \omega_{i,k}^s| / \omega_{cp}^s,$$

$$\varepsilon_\Psi = \max_{i,k} |\Psi_{i,k}^{s+1} - \Psi_{i,k}^s| / \Psi_{cp}^s,$$

$$\omega_{cp}^s = \sum_{i,k} |\omega_{i,k}^s| / M, \quad \Psi_{cp}^s = \sum_{i,k} |\Psi_{i,k}^s| / M,$$

$M$  – полное число узлов сеточной области.

### 3. Обсуждение результатов

Гидродинамическая модель и модель осаждения использовались для определения основных геометрических характеристик покрытия, полученного нами в экспериментах по осаждению молекулярного углерода  $C_2$  на стеклянную подложку.

Неравномерное осаждение продуктов абляции на подложке, по-видимому, объясняется неравномерным распределением концентрации молекулярного углерода у поверхности подложки. Мы полагаем, что формирование покрытия в виде кольца обусловлено осаждением частиц из зон с максимальной концентрацией продуктов абляции. Для построения этих зон нами проведена серия расчетов течения для различных значений числа Рейнольдса (Re).

Анализ результатов расчета гидродинамиче-

ской модели показывает, что в центральной части канала около подложки существует область, в которой скорость течения на один-два порядка меньше скорости входного потока (рис. 4). Поскольку в этой области движение практически отсутствует, концентрация продуктов осаждения здесь недостаточна для того, чтобы происходило заметное осаждение.

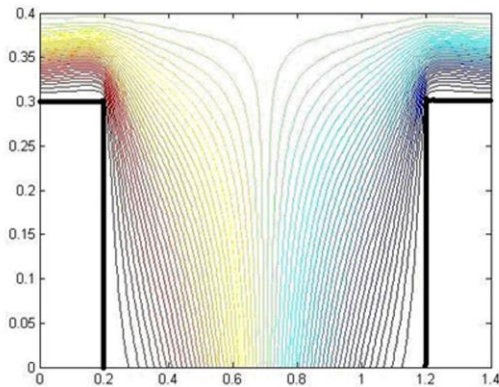


Рис. 4. График функции тока для  $Re=50$ : размеры входного и выходных сечений  $d_1=1$ ,  $d_2=0.1$

Кроме этого, был рассмотрен случай, когда на нижних горизонтальных стенках канала имеется система прямоугольных и треугольных впадин (см. рис 1).

Анализ результатов расчета (рис. 5) показывает, что когда расстояние между впадинами одного порядка с шириной впадины, структура течения во всех впадинах одинакова и подобна структуре течения в одной впадине. При этом в сравнительно неглубоких впадинах при больших числах Рейнольдса циклы не наблюдались, однако скорость течения во впадинах существенно меньше скоростей входного сечения. В глубоких впадинах формируется один или несколько вихрей, как и в случае одной впадины. При этом область проникновения основного потока для первой впадины несколько больше, чем для остальных, а области слабых циклических движений – меньше, чем в последующих впадинах. На наш взгляд это обстоятельство обусловлено влиянием жестких граничных условий на входной границе потока. Максимальное значение скоростей в вихрях также уменьшается по мере удаления от входной границы, однако, разность максимальных значений настолько мала, что ей можно пренебречь.

Сравнение результатов расчетов течения в каналах с прямоугольными и треугольными впадинами показывает, что эти течения имеют много общего: при малых числах Рейнольдса во

впадинах течение практически отсутствует, так как скорость на 2–3 порядка меньше скорости во входном потоке; при умеренных и больших числах Рейнольдса во впадинах формируются замкнутые циклические течения, не связанные со входным течением.

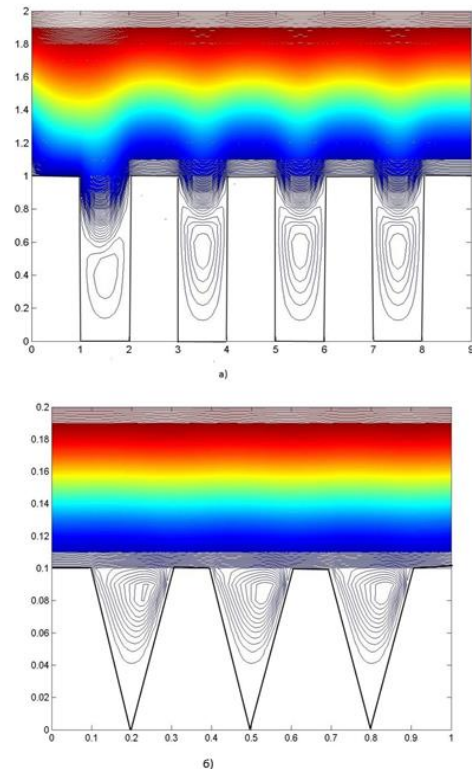


Рис. 5. а) График функции тока для  $Re=1000$  с 4 прямоугольными впадинами; б) График функции тока для  $Re=1000$  с 4 треугольными впадинами

Отсюда следует, что в каналах с неоднородностями в виде впадин концентрация продуктов абляции у дна впадины и стенок будет недостаточна для того, чтобы сформировалась нанопленка. Анализ скорости показывает, что такие зоны возможны в основном канале на некотором расстоянии от впадины и после нее.

Таким образом, можно утверждать, что разработанная модель с достаточной достоверностью моделирует реальный эксперимент и может быть использована для оценки характерных размеров осажденного слоя.

#### 4. Возможности распараллеливания

В нашем случае распараллеливание возможно по данным, когда расчетная область разделяется на подобласти и в каждой подобласти вычисления производятся одновременно. Из практики параллельных вычислений хорошо

известно, что в целом более эффективная двумерная декомпозиция расчетной области теряет свои преимущества перед одномерной в том случае, если количество процессоров параллельного компьютера невелико. Поэтому возможно использовать одномерное разрезание вдоль горизонтальной координаты, так как такому разрезанию свойственна простота программной реализации.

На разных этапах расчетов требуется синхронизация, то есть обмен данными, расположенными в прилежащих к границам разрезов областях, между соседними процессами. Например, для расчета давления в граничном сеточном слое требуются четыре смежных значения (пятиточечный шаблон), три из которых рассчитываются и расположены в данном процессе, а четвертое надлежит получить от соседнего процесса. По этой причине необходима пересылка последней строки 0-процесса 1-процессу, равно как и получение от него его первой строки.

Рассматриваемая задача была реализована в среде MATLAB. MATLAB – высокопроизводительная система научно-технических расчетов, которая включает в себя мощный вычислительный аппарат, уникальную реализацию современных численных методов, а также визуализацию, анимационную графику и программирование в среде, представляющей математико-ориентированный язык программирования высокого уровня.

В реализованном алгоритме просматривается параллелизм, что следует из результатов расчета – характер течения во впадинах одинаковый, поэтому расчет в каждой впадине можно проводить независимо от других впадин. В последовательной программе такой расчет реализован посредством конструкции `for`. В данном цикле последовательно рассчитываются значения функции тока и вихря на левой границе впадины, в самой впадине, на правой границе и на выступе.

Расчет ведется по горизонтальным полосам, что делает возможной одномерную декомпозицию области.

Средой, где можно реализовать такое параллельное приложение, является MATLAB, в частности распараллелить цикл можно конструкцией `parfor`, передавая процессам координаты впадин. Ускорение, получаемое для рассматриваемого примера, может достигать 4-5 раз.

*Работа выполнена в соответствии с проектом №14.В37.21.0176 Федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013 гг. Выполнение работ по проекту соответствует выполняемым в последнее время научно-образовательным программам по развитию суперкомпьютерного образования в стране [5–8].*

### Заключение

Проведено экспериментальное исследование процессов формирования наноструктурированного углеродного покрытия на поверхности холодной подложки при осаждении продуктов лазерной абляции в атмосферном воздухе. На основе экспериментальных данных предложена математическая модель, позволяющая качественно описывать процесс осаждения продуктов абляции и оценить параметры получаемых наноструктурированных слоев углерода на подложке.

### Список литературы

1. Arakelian S.M., Kutrovskaya S.V., Kucherik A.O. et al. Generation of nanostructures on a surface of a cold substrate at laser action on carbon materials in atmospheric air / Proc. SPIE 6732, 67320A, 2007.
2. Герке М.Н., Кутровская С.В., Кучерик А.О. и др. Формирование углеродных субмикронных и наноструктур на поверхности холодной подложки при воздействии лазерного излучения на поверхность углеродосодержащих материалов в атмосферном воздухе // Квантовая электроника. 2008. Т. 38, № 1. С. 73–76.
3. Роуч П. Вычислительная гидродинамика: Пер. с англ. М.: Мир, 1980. 616 с.
4. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.: Дрофа, 2003. 840 с.
5. Гергель В.П., Стронгин Р.Г. Опыт Нижегородского университета по подготовке специалистов в области суперкомпьютерных технологий. Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2010. № 3(1). С. 191–199.
6. Воеводин В.В., Гергель В.П. Суперкомпьютерное образование: третья составляющая суперкомпьютерных технологий. Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. 2010. Т. 11, № 2. С. 117–122.
7. Гергель В.П., Линев А.В., Мееров И.Б., Сысов А.В. Об опыте проведения программ повышения квалификации профессорско-преподавательского состава по направлению «высокопроизводительные вычисления». Открытое и дистанционное образование. 2010. № 3. С. 15–20.
8. Воеводин В.В., Гергель В.П. и др. Развитие системы суперкомпьютерного образования в России: текущие результаты и перспективы // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2012. № 4. С. 268–274.

**MATHEMATICAL MODELING OF A PROPAGATION PROCESS OF LASER ABLATION PRODUCTS***D.N. Bukharov, A.O. Kucherik*

In the given work results of experimental and theoretical researches of processes of distribution of the laser-induced plasma in a problem of a direct laser dusting are considered. For modeling of process of distribution of plasma the mathematical model based on the hydrodynamic approach has been offered. The offered model allows to define arising features in distribution of a stream near to a substrate surface.

*Keywords:* mathematical modeling, laser ablation, sedimentation.