

Численное моделирование процесса распространения и осаждения аблированных частиц в схеме прямого лазерного напыления

А. А. Антипов, С. М. Аракелян, Д. Н. Бухаров, С. В. Кутровская, А. О. Кучерик,* В. Г. Прокошев
 Владимирский государственный университет им. Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых,
 факультет прикладной математики и физики,
 кафедра физики и прикладной математики. Россия, 600000, Владимир, ул. Горького д. 87.
 (Статья поступила 9.05.2012; Подписана в печать 10.09.2012)

В данной работе рассмотрены результаты экспериментальных и теоретических исследований процессов распространения и осаждения лазерно-индуцированной плазмы в задаче прямого лазерного напыления. Исследования проводились при воздействии лазерного излучения на углеродную мишень в присутствии атмосферного воздуха. Для управления процессом распространения плазмы была разработана специальная экспериментальная схема, позволяющая создавать газодинамический канал с изменяемой геометрией. Исследование поверхности холодной подложки после лазерного воздействия позволило определить наличие различных зон осаждения, формирование которых может быть объяснено особенностями плазмодинамических процессов. 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. На основе модельного потенциала Леннарда-Джонса с использованием образующихся линий тока проведены расчеты размеров возможных областей осаждения продуктов лазерной абляции.

PACS: 82.20.Wt.

УДК: 539.216.1; 517.958:531.12.

Ключевые слова: математическое моделирование, лазерная абляция, осаждение.

ВВЕДЕНИЕ

Метод прямого лазерного осаждения — перспективный способ получения наноструктурированных покрытий на поверхности оптически прозрачных сред. Отдельный интерес в использовании данного 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 данной 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:Nd³⁺ 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, $h \sim 25 \mu\text{m}$, $d \sim 400 \mu\text{m}$, $H = 500 \mu\text{m}$) составлял 100 мкм, расстояние от поверхности мишени до плоскости подложки, на которой происходило формирование наноструктур, изменялась от 0.1 мм до 1 мм, время облучения лазерным пучком составляло 20 секунд.

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.

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

*E-mail: kucherik@vlsu.ru

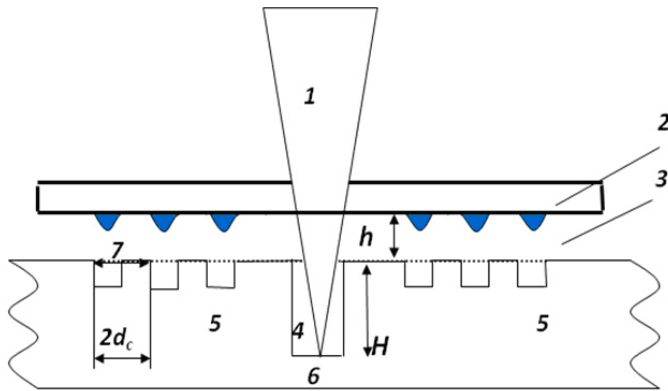


Рис. 1: Схема экспериментальной установки: 1 — лазерное излучение; 2 — подложка, прозрачная для излучения лазера, на которой формируется осажденный слой; 3 — газодинамический канал, по которому происходит транспортировка испаренного вещества; 4 — входной канал (диаметром — d), ограниченный боковыми стенками (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

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

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ И ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛИ

На основе полученных экспериментальных данных была разработана математическая модель, определяющая движение продуктов абляции и процесс их осаждения на подложку.

Достаточно удобным способом моделирования движения продуктов лазерной абляции является использование подходов в рамках гидродинамической модели [3, 4]. Расчет гидродинамической модели в первом приближении позволяет определить области с достаточно большими концентрациями продуктов лазерной абляции. Мы полагаем, что формирование равномерного осажденного слоя обусловлено в основном осаждением частиц из этих областей. Процесс осаждения моделируется на основе принципов молекулярной динамики [5].

Гидродинамическая модель распространения продуктов лазерной абляции описывается стационарными уравнениями Навье–Стокса для задачи с плоской геометрией [6]. Расчетная область представляет из себя канал с одним входным и двумя выходными сечениями, как показано на рис. 4.

Математическая модель представляет систему безразмерных дифференциальных уравнений и гранич-

ных условий для функции тока и вихря.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial \omega}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial \omega}{\partial y} &= \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= -\omega \\ \frac{\partial \Psi}{\partial y} &= v_x, \quad -\frac{\partial \Psi}{\partial x} = v_y, \end{aligned}$$

где Ψ — функция тока, ω — вихрь, v_x, v_y — проекции скорости на оси координат.

Граничные условия на входном и выходных сечениях представляют точные значения, исходя из соответствующих значений для течения Пуазейля:

$$\begin{aligned} v_x(x_r, y) &= 6y(1 - y), \quad v_y(x_r, y) = 0 \\ \omega(x_r, y) &= 6(2y - 1), \quad \Psi(x_r, y) = y^2(3 - 2y), \end{aligned} \quad (1)$$

где x_r — горизонтальная координата границы, y — вертикальная координата.

На стенках канала значения функции тока заданы точно — $\Psi = 0$ для нижней левой стенки и $\Psi = 1$ для верхней стенки, что согласуется с заданием граничных условий на входной и выходной границах потока. Поскольку каждая твердая стенка является линией тока, то для корректного задания функции тока на правой стенке необходимо сделать дополнительное предположение о параметрах течения. Такое предположение может быть сформулировано, исходя из закона сохранения массы, который в данном случае сводится к утверждению: сумма расходов потока через выходные сечения ($q_{\text{вых1}}, q_{\text{вых2}}$) равна расходу через входное сечение ($q_{\text{вх}}$): $q_{\text{вх}} = q_{\text{вых1}} + q_{\text{вых2}}$. Значения вихря на твердых стенках задаются приближенно по формуле Вудса [7] и уточняются в процессе расчета. Например, для граничного узла (x_i, y_k) левой твердой стенки условие Вудса будет иметь вид:

$$\omega_{i,k} = -\frac{3}{hx^2} (\Psi_{i+1,k} - \Psi_{i,k}) - \frac{1}{2}\omega_{i+1,k}.$$

Для граничного узла (x_i, y_k) правой границы впадины условие Вудса запишется в виде

$$\omega_{i,k} = -\frac{3}{hx^2} (\Psi_{i-1,k} - \Psi_{i,k}) - \frac{1}{2}\omega_{i-1,k}.$$

Для граничного узла (x_i, y_k) на верхней стенке условие Вудса будет иметь вид:

$$\omega_{i,k} = -\frac{3}{hy^2} (\Psi_{i,k-1} - \Psi_{i,k}) - \frac{1}{2}\omega_{i,k-1}.$$

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

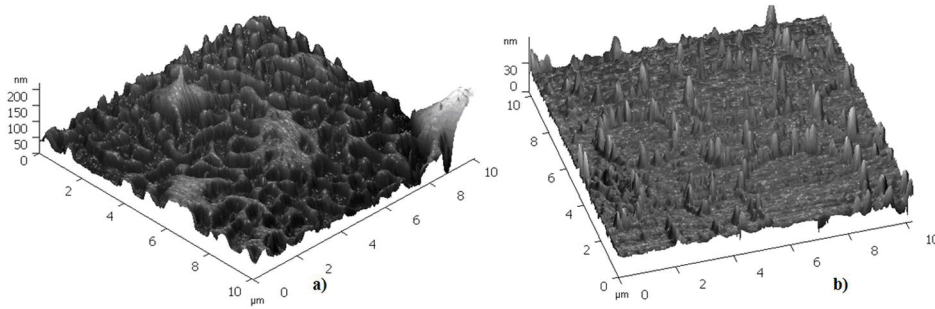


Рис. 2: Изменение структуры осажденного слоя: а) внутри области технологической оснастки; б) за границей области технологической оснастки

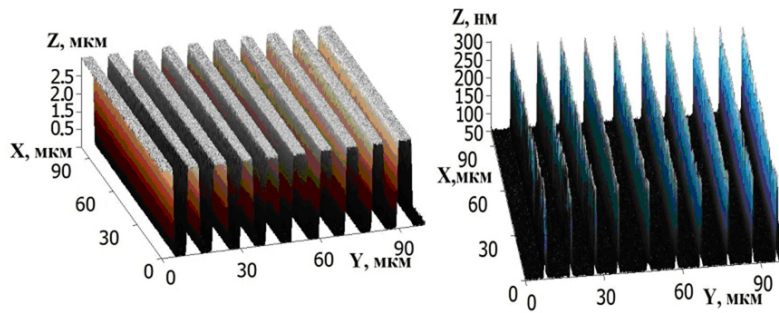


Рис. 3: Изображения поверхности осажденного на подложку слоя (б); полученные на АСМ при воздействии с использованием газодинамического канала с шагом периодического рельефа $d_c = 5$ мкм, $h_c = 3$ мкм (а)

Уравнение для вихря имеет вид:

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

$$A_1 = \left(\frac{1}{1 + \frac{1}{2}\text{Re}|u_{i-1/2}|hx} + \text{Re}u_{i-1/2}^+hx \right) \frac{1}{hx^2}, \quad B_1 = \left(\frac{1}{1 + \frac{1}{2}\text{Re}|u_{i+1/2}|hx} - \text{Re}u_{i+1/2}^-hx \right) \frac{1}{hx^2},$$

$$A_2 = \left(\frac{1}{1 + \frac{1}{2}\text{Re}|v_{k-1/2}|hy} + \text{Re}v_{k-1/2}^+hy \right) \frac{1}{hy^2}, \quad B_2 = \left(\frac{1}{1 + \frac{1}{2}\text{Re}|v_{k+1/2}|hy} - \text{Re}v_{k+1/2}^-hy \right) \frac{1}{hy^2},$$

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

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

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

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

где hx , hy — шаги сетки, $u_{i+1/2}$, $u_{i-1/2}$, $v_{k+1/2}$, $v_{k-1/2}$ — аппроксимации скоростей в полшаге 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 (т. к. $u_{\alpha}^+, v_{\alpha}^+ \geq 0$, а $u_{\alpha}^-, v_{\alpha}^- \leq 0$, где α — номер узла, то все коэффициенты разностной схе-

мы положительны при любых значениях шагов сетки, т. е. схема удовлетворяет принципу максимума), что 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:

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

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

где s — номер итерации, q_{Ψ} , q_{ω} — параметры релаксации.

В этом алгоритме, который при $q_{\Psi} = q_{\omega} = 1$ соответствует методу Зейделя для системы нелинейных уравнений, вычисление функции тока и вихря на итерационном слое происходит параллельно, причем найденные в узле (x_i, y_k) значения $\Psi_{i,k}^{s+1}$ и $\omega_{i,k}^{s+1}$ помещаются на место предыдущих приближений $\Psi_{i,k}^s$ и $\omega_{i,k}^s$, не требуя дополнительной памяти. Верхние индексы в формулах расставлены так, чтобы движение по узлам осуществлялось по направлению возрастания нижних индексов i, k .

Вообще говоря, порядок счета может быть изменен. В частности небольшой выигрыш по числу итераций удастся получить, ведя счет «по спирали» от границы к центру единичной области. В качестве начального приближения можно задать нулевое распределение, но лучше использовать решение при меньших значениях числа Рейнольдса.

Релаксационная процедура применяется не только во внутренних узлах, но и распространяется на граничные условия. Например, условие Вудса для верхней стенки преобразуется к виду:

$$\omega_{i,k}^{s+1} = (1 - q_{\omega})\omega_{i,k}^s + q_{\omega} \left(-\frac{3}{hy^2} (\Psi_{i,k-1}^{s+1} - \Psi_{i,k}^{s+1}) - \frac{1}{2}\omega_{i,k-1}^{s+1} \right),$$

где итерационные номера приграничных величин соответствуют выбранному порядку счета.

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 $(s+1)$ — шаге будет

выполнено условие: $\max(\varepsilon_{\omega}, \varepsilon_{\Psi}) < \varepsilon = 10^{-3}-10^{-4}$, где

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

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

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

M — полное число узлов сеточной области.

В рамках используемой нами молекулярно-динамической модели процесс осаждения описывается системой безразмерных уравнений Ньютона, причем для учета взаимодействий между осаждаемыми атомами и атомами подложки используется потенциал Леннарда-Джонса [4]:

$$\frac{du}{dt} = \sum \left(\frac{1}{r_i}\right)^7 \left(2\left(\frac{1}{r_i}\right)^6 - 1\right) \frac{(x - x_i)}{r_i}$$

$$\frac{dv}{dt} = \sum \left(\frac{1}{r_i}\right)^7 \left(2\left(\frac{1}{r_i}\right)^6 - 1\right) \frac{y}{r_i}$$

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v,$$

$$x(0) = x_0, \quad y(0) = y_0, \quad u(0) = u_0, \quad v(0) = v_0.$$

где x, y — координаты движущегося атома, u, v — проекции скорости атома на оси 0 и 0 соответственно, $r = \sqrt{(x - x_i)^2 + y^2}$ — расстояние между атомом из потока осаждаемого вещества и i -ым атомом подложки.

Математическая модель движения атома представляет собой задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, для решения которой

используется схема с перешагиванием [5]. Рассматриваемая схема является явной, поэтому шаг по времени необходимо выбирать с учетом условия устойчивости.

При этом на шаг сетки накладывается ограничение в виде $\tau\omega_{max} \leq 2$, где ω_{max} — максимальная частота моделируемой системы; τ — шаг по времени.

$$\frac{u^{k+1/2} - u^{k-1/2}}{\tau} = \sum_i f_{ix}(r_i^k); \quad f_{ix} = \left(\frac{1}{r_i^k}\right)^7 \left(2\left(\frac{1}{r_i^k}\right)^6 - 1\right) \frac{(x^k - x_i)}{r_i^k};$$

$$\frac{v^{k+1/2} - v^{k-1/2}}{\tau} = \sum_i f_{iy}(r_i^k); \quad f_{iy} = \left(\frac{1}{r_i^k}\right)^7 \left(2\left(\frac{1}{r_i^k}\right)^6 - 1\right) \frac{y^k}{r_i^k};$$

$$\frac{x^{k+1} - x^k}{\tau} = u^{k+1/2}; \quad \frac{y^{k+1} - y^k}{\tau} = v^{k+1/2};$$

$k = 1, 2, \dots$ — номер шага по времени, τ — величина k -го шага. Значения скоростей в момент времени $t = 0.5\tau_0$ вычисляются по формулам

$$\frac{u^{1/2} - u^0}{0.5\tau_0} = \sum_i f_{ix}; \quad \frac{v^{1/2} - v^0}{0.5\tau_0} = \sum_i f_{iy}.$$

Из формул, приведенных выше видно, что для вычисления перемещения на k -ом шаге используются скорости, вычисленные в момент времени, соответствующей половине шага. Эта особенность обеспечивает погрешность аппроксимации на шаге в виде $O(\tau_k^3)$, определяя данную схему как схему второго порядка точности относительно шага сетки.

Погрешности аппроксимации оцениваются по правилу Рунге, выполнив расчеты координаты прилипания атома к подложке (x) с двумя значениями шагов сетки τ и 2τ . При этом погрешность оценивается по формуле $e \cong |x^{(\tau)} - x^{(2\tau)}|/3$.

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. На рис. 4 показана расчетная область задачи и зоны, из которых возможно осаждение. Основные размеры области в относительных единицах имеют следующие значения: $d_1 = 1, d_2 = 0.1$. Равномерный осажденный слой имеет вид кольца с внутренним радиусом $r_1 = 0.1$ и внешним радиусом $r_2 = 0.5$.

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 концентраци-

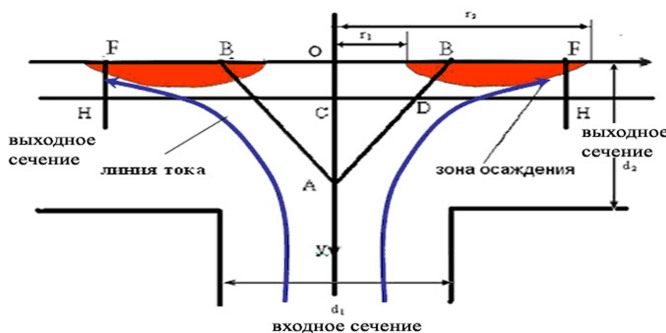


Рис. 4: Расчетная область с зонами осаждения

ей продуктов абляции. Для построения этих зон нами проведена серия расчетов течения для различных значений числа Рейнольдса (Re).

Анализ результатов расчета гидродинамической модели показывает, что в центральной части канала около подложки существует область, в которой скорость течения на один — два порядка меньше скорости входного потока (рис. 5). Поскольку в этой области движение практически отсутствует, то концентрация продуктов осаждения здесь недостаточна для того, чтобы происходило заметное осаждение.

В первом приближении можно считать, что граница этой области проходит через точки, в которых скорость осажденных частиц на порядок меньше скоростей входного потока. На рис. 4 эта граница проходит по прямой АВ. По мере удаления от этой границы в направлении к выходному сечению скорость течения увеличивается, так что максимальная скорость выходного сечения в нашем расчете в 5 раз превосходит максимальную скорость входного сечения. Мы полагаем, что концентрация продуктов абляции также убывает в этом направлении и поэтому в качестве второй границы области осаждения можно принять линию, на которой скорости течения на порядок меньше скоростей течения в выходном сечении. Поскольку

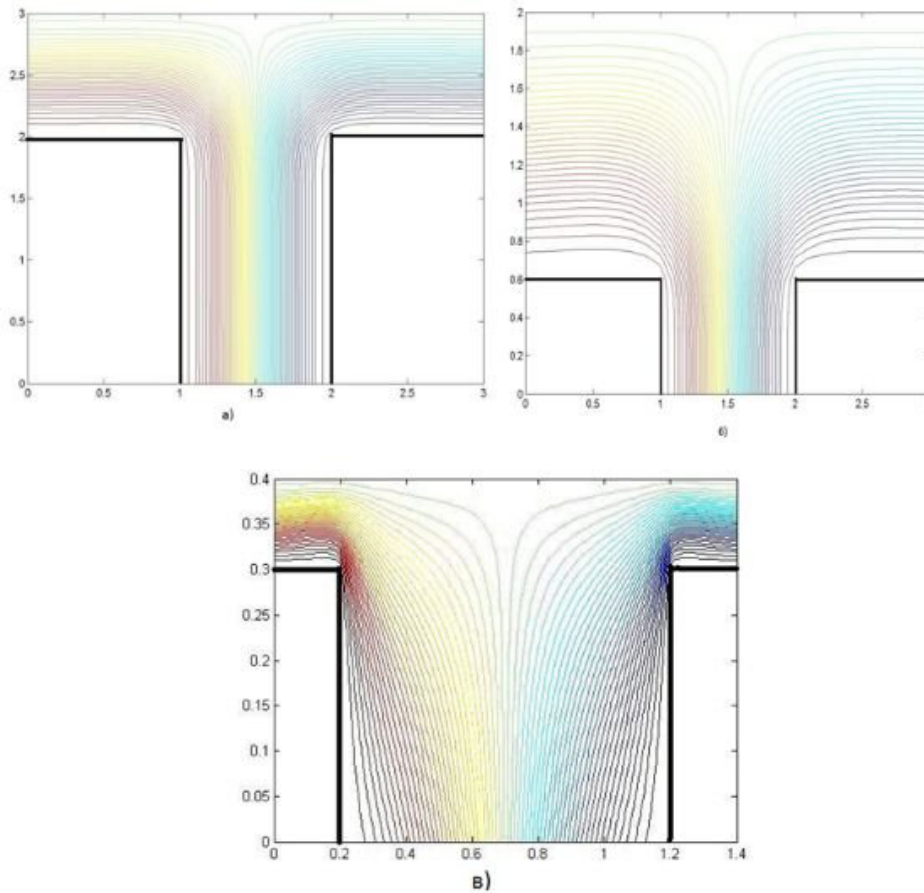


Рис. 5: а) график функции тока для $Re=10$: размеры входного и выходных сечений $d_1 = 1, d_2 = 1$; б) график функции тока для $Re=10$: размеры входного и выходных сечений $d_1 = 1, d_2 = 1.4$ в) график функции тока для $Re=50$: размеры входного и выходных сечений $d_1 = 1, d_2 = 0.1$

ку для расчета процесса осаждения достаточно знать эту границу в области подложки, то для ее построения можно использовать информацию в нескольких узлах расчетной области. На рис. 4 эта граница соответствует прямой ФН.

Результаты расчетов зон осаждения для различных значений числа Рейнольдса (Re) приведены в таблице 1.

Таблица 1: Зона осаждения (см. рис. 4) при различных числах Рейнольдса

Re	АО	ОВ	ОФ	БФ
10	0.08	0.21	0.40	0.19
50	0.07	0.15	0.37	0.22
100	0.06	0.12	0.36	0.23
500	0.05	0.07	0.27	0.20
1000	0.05	0.06	0.25	0.19

Из приведенной таблицы видно, что с увеличением числа Рейнольдса зона осаждения сдвигается к цен-

тру подложки — это приводит к уменьшению внутреннего радиуса осажденного слоя. При этом ширина зоны изменяется мало, однако концентрация продуктов абляции с увеличением модуля скорости течения уменьшается, что должно приводить к уменьшению толщины слоя осаждения.

Осаждение молекулярного углерода в определенной точке подложки является результатом взаимодействия атомов подложки с молекулами углерода. При больших расстояниях эти силы взаимодействия незначительны, поэтому в моделях осаждения принято ограничивать высоту зоны осаждения расстояниями в несколько десятков межатомных расстояний.

На рис. 4 соответствующая граница зоны осаждения представлена прямой СН. В расчетах высота зоны, из которой возможно осаждение, изменялось от 2 до 50 межатомных расстояний.

Применяемые в молекулярной динамике потенциалы имеют бесконечную область влияния. На практике обычно пренебрегают взаимодействием на больших расстояниях и вводят радиус усечения потенциала. При этом для расчета движения частицы достаточно учесть взаимодействие с молекулами, расстояние до

которых не превосходят радиус усреднения, что существенно сокращает объем вычислений. Для потенциала Леннарда–Джонса радиус усреднения принято выбирать не менее пяти межатомных расстояний.

В нашей модели при расчете движения осаждаемой молекулы учитывались силы только со стороны ближайших двадцати симметрично расположенных молекул подложки. Такая модель сравнительно просто учитывает то, что формирование осажденного слоя происходит вдали от границ подложки, поэтому, симметрично расположенные, относительно движущейся молекулы, части подложки должны оказывать одинаковое влияние на движение молекулы. Эти особенности модели приводят к тому, что на больших расстояниях от подложки продольная составляющая скорости движения молекулы практически не изменяется, поэтому проекция перемещения молекулы на подложку в основном определяется временем полета молекул к подложке.

Для определения основной динамической характеристики модели осаждения — времени осаждения (t) молекулы на подложку — была проведена серия расчетов с параметрами потенциала, соответствующими углероду [5, 8]. На основе этих данных масштабные (базисные величины) имеют следующие значения: $l_6 = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $t_6 = 10^{-12}$ с, $v_6 = 500$ м/с. Расстояние между атомами подложки приняты равными равновесному значению. Результаты расчетов сведены в таблицу 2.

Таблица 2: Результаты расчетов осаждения

y	$u_0 = 0, v_0 = 0$	$u_0 = 1, v_0 = 0$	
	t_0	Δx	t_1
2	9.1	9.1	9.1
3	$3.91 \cdot 10^1$	$3.91 \cdot 10^1$	$3.92 \cdot 10^1$
4	$1.08 \cdot 10^2$	$1.08 \cdot 10^2$	$1.08 \cdot 10^2$
5	$2.36 \cdot 10^2$	$2.36 \cdot 10^2$	$2.36 \cdot 10^2$
10	$2.70 \cdot 10^3$	$2.70 \cdot 10^3$	$2.70 \cdot 10^3$
20	$3.32 \cdot 10^4$	$3.33 \cdot 10^4$	$3.33 \cdot 10^4$
30	$1.53 \cdot 10^5$	$1.51 \cdot 10^5$	$1.51 \cdot 10^5$
40	$4.56 \cdot 10^5$	$4.56 \cdot 10^5$	$4.56 \cdot 10^5$
50	$1.11 \cdot 10^6$	$1.09 \cdot 10^6$	$1.09 \cdot 10^6$

Первый столбец табл. 2 задает относительное начальное расстояние от движущейся молекулы до подложки (y), второй столбец — относительное время осаждения (t_0) при нулевой начальной скорости, третий столбец — проекцию перемещения молекулы вдоль оси x , четвертый столбец — время осаждения при $u_0 = 1, v_0 = 0$. Анализ данных таблицы показывает, что при $y > 2$ и $v = 0$ перемещение движущейся молекулы углерода вдоль подложки можно определить по простой формуле $\Delta x = u \cdot t_0$.

При проведении расчетов также контролировалась величина максимального значения вертикальной составляющей скорости молекулы. При изменении величины y в диапазоне от 1.5 до 4 вертикальная составляющая скорости молекулы изменяется от $v_{max} = 0.28$ до $v_{max} = 0.35$. Для значений y от 4 до 50 величина v_{max} отличается от 0.35 менее чем на 1%. Отсюда следует, что «эффективный разгон» молекулы под действием рассматриваемых сил, действительно, происходит на расстояниях от подложки в несколько межатомных расстояний.

Для определения ширины осажденного слоя необходимо располагать информацией о высоте зоны осаждения (y_{max}) и о распределении скоростей молекул углерода. Тогда на основе расчетов можно получить выборку значений Δ , среднее значение которой позволит определить изменение ширины зоны осаждения, обусловленное движением молекул углерода при осаждении.

Однако, в нашем случае информация о распределении скоростей отсутствует. Поэтому можно получить только грубые оценки ширины зоны осаждения, исходя из простых оценок перемещения $\Delta x = u \cdot t_0$. Если y_{max} лежит в диапазоне от 30 до 40, то для $u = 1$ перемещение молекулы углерода — в диапазоне от 40 до 110 мкм, соответственно. С учетом зоны осаждения для $Re=50$ при $y_{max} = 30$ получаются следующие значения параметров ширины зоны осаждения: $r_1 = 150 - 40 = 110$ мкм, $r_2 = 370 + 40 = 410$ мкм. Для $y_{max} = 40$ аналогично получаются следующие значения: $r_1 = 10$ мкм, $r_2 = 510$ мкм. Эти два варианта расчета на наш взгляд лучше всего соответствуют полученным экспериментальным данным, для которых $r_1 \approx 100$ мкм, $r_2 \approx 500$ мкм.

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

Анализ результатов расчета (рис. 6) 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

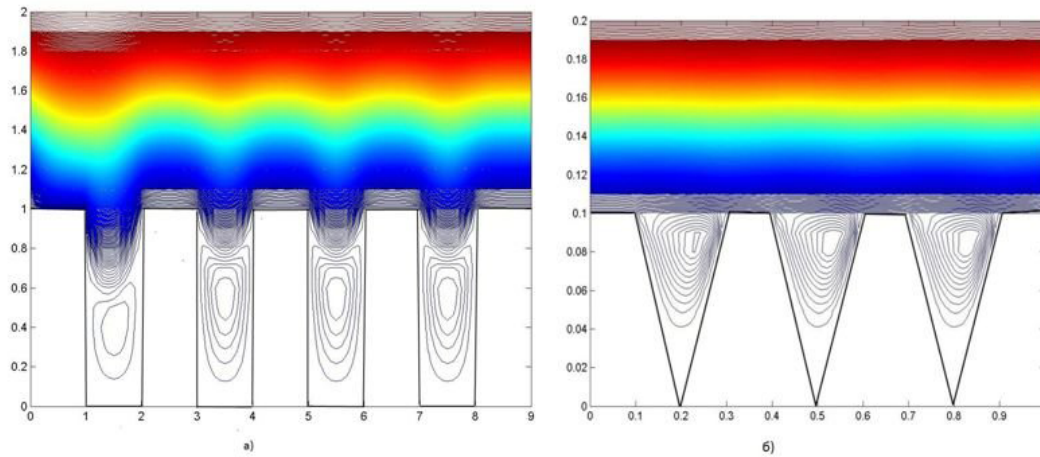


Рис. 6: а) График функции тока для $Re=1000$ с 4 прямоугольными впадинами; б) График функции тока для $Re=1000$ с 4 треугольными впадинами

с прямоугольными и треугольными впадинами показывает, что эти течения имеют много общего: при малых числах Рейнольдса во впадинах течение практически отсутствует, т. к. 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.

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 позволяет утверждать, 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.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе проведено экспериментальное исследование процессов формирования наноструктурированного углеродного покрытия на поверхности холодной подложки при осаждении продуктов лазерной абляции в атмосферном воздухе. Экспериментально показана возможность управления морфологией осаждаемого слоя. На основе экспериментальных данных предложена математическая модель, позволяющая качественно описывать процесс осаждения продуктов абляции и оценить параметры получаемых наноструктурированных слоев углерода на подложке. Предлагаемый подход сочетает в себе методы гидродинамического моделирования и молекулярной динамики. Разработанная модель, позволяет определять общий вид движения плазмы в газодинамическом канале с заданной геометрией и рассчитывать расположение области осаждения.

-
- [1] Arakelian S.M., Kutrovskaya S.V., Kucherik A.O. et al. Proc. SPIE **6732**. 67320A. (2007).
- [2] Герке М.Н., Кутровская С.В., Кучерик А.О., Прокошев В.Г., Аракелян С.М. Квантовая электроника. **38**, № 1. с. 73–76. (2008).
- [3] Бордовский Г.А., Кондратьев А.С., Чоудери А.Д.Р. Физические основы математического моделирования. Уч. Пособие для вузов. (М.: Издательский центр «Академия», 2008). 320 с.
- [4] Цветков И.В. Применение численных методов для моделирования процессов в плазме. Учебное пособие. (М.: МИФИ, 2007). 84 с.
- [5] Зализняк В.Е. Основы вычислительной физики. Часть 2. Введение в методы частиц. (Москва–Ижевск: НИЦ Регулярная и хаотическая динамика: Институт компьютерных исследований, 2006). 156 с.
- [6] Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. (М.: Дрофа, 2003). 840 с.
- [7] Роуч П. Вычислительная гидродинамика: Пер. с англ. (М.: Мир, 1980). 616 с.
- [8] Морозов А.И. Введение в плазмодинамику. (М.: Физматлит, 2008). 616 с.

Numerical modelling of a propagation process and sedimentation of ablated particles in the scheme of a direct laser dusting

A. A. Antipov, S. M. Arakelyan, D. N. Buharov, S. V. Kutrovskaya, A. O. Kucherik, V. G. Prokoshev

*Department of Physics and Applied Mathematics, Faculty of Physics and Applied Mathematics, A.G. and N.G. Stoletov
Vladimir State University. Vladimir 600000, Russia.*

E-mail: kucherik@vlsu.ru.

In the given work results of experimental and theoretical researches of processes of distribution and sedimentation of the laser-induced plasma in a problem of a direct laser dusting are considered. Researches were spent at influence of laser radiation on a carbon target in the presence of atmospheric air. The special experimental scheme has been developed for management of process of distribution of plasma, allowing to create gasdynamical channel with changeable geometry. Research of a surface of a cold substrate after laser influence has allowed to define presence of various zones of the sedimentation which formation can be explained by the features of plasmadynamical processes. For modelling 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. On the basis of modelling potential Lennard-Jones with use of formed lines of a current calculations of the sizes of possible areas of sedimentation of products laser ablation are carried out.

PACS: 82.20.Wt.

Keywords: mathematical modelling, laser ablation, sedimentation.

Received 9 May 2012.

Сведения об авторах

1. Антипов Александр Анатольевич — ассистент кафедры физики и прикладной математики; тел. (492) 247-96-21, e-mail: aantipov@vlsu.ru.
 2. Аракелян Сергей Мартиросович — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (492) 253-33-58 e-mail: aarak@vlsu.ru.
 3. Бухаров Дмитрий Николаевич — ассистент кафедры физики и прикладной математики; тел. (492) 247-96-21, e-mail: buharovdn@gmail.com.
 4. Кутровская Стелла Владимировна — младший научный сотрудник; тел.: (492) 247-96-21, e-mail: sstella@vlsu.ru.
 5. Кучерик Алексей Олегович — кандидат физ.-мат. наук, доцент, директор НИЦ; (492) 247-96-21, e-mail: kucherik@vlsu.ru.
 6. Прокошев Валерий Гигорьевич — доктор физ.-мат. наук, профессор, первый проректор; тел. (492) 233-52-42 e-mail: prokoshev_vg@vlsu.ru.
-