

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.635

Посвящается доктору физико-математических наук профессору
Евгению Михайловичу Шахову в связи с его 90-летием

ЭВОЛЮЦИЯ ФОРМЫ ОБЛАКА ГАЗА ПРИ ИМПУЛЬСНОМ
ЛАЗЕРНОМ ИСПАРЕНИИ В ВАКУУМ: ПРЯМОЕ СТАТИСТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ И РЕШЕНИЕ МОДЕЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ¹⁾

© 2023 г. А. А. Морозов^{1,2,*}, В. А. Титарев^{2,**}

¹ 630090 Новосибирск, пр-т Лаврентьева, 1, Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Россия

² 119333 Москва, ул. Вавилова, 40, ФИЦ ИУ РАН, Россия

*e-mail: morozov@itp.nsc.ru

**e-mail: vladimir.titarev@frccsc.ru

Поступила в редакцию 23.06.2023 г.

Переработанный вариант 05.07.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Проведено исследование динамики разлета газа при наносекундном лазерном испарении в вакуум. Задача рассматривается в осесимметричной постановке для широкого диапазона параметров: числа испаренных монослоев и размера пятна испарения. Для получения достоверного численного решения используются два разных кинетических подхода: прямое статистическое моделирование методом Монте-Карло и решение модельного кинетического уравнения БГК. Анализируется изменение формы облака испаренного вещества в процессе разлета. Показано сильное влияние степени разреженности на форму формирующегося облака. При испарении большого числа монослоев наблюдается хорошее согласие с континуальным решением. Библ. 57. Фиг. 6.

Ключевые слова: кинетическая модель БГК, прямое статистическое моделирование, разреженный газ, импульсное лазерное испарение, LasInEx, Несветай.

DOI: 10.31857/S0044466923120207, **EDN:** ZUMXKA

ВВЕДЕНИЕ

Импульсная лазерная абляция широко используется в различных технологиях, связанных с осаждением тонких пленок, синтезом наночастиц, обработкой и структурированием поверхности. Исследования лазерной абляции в вакууме являются важными для изучения механизмов и динамики процесса абляции на основе анализа времяпролетных (см. [1, 2]) и угловых (см. [1, 3]) распределений разлетающихся частиц. Для корректной интерпретации экспериментальных данных необходимо представлять в целом динамику разлета облака продуктов абляции в вакууме.

Теоретический анализ рассматриваемой задачи базируется в основном на различных вычислительных подходах. При малой плотности потока лазерного излучения газ можно считать нейтральным, так как эффекты поглощения лазерного излучения в факеле и ионизации газа пренебрежимо малы. Обычно для изучения разлета нейтрального факела в вакууме используется прямое статистическое моделирование методом Монте-Карло (ПСМ) (см. [4]). В первых работах этот метод позволял исследовать угловые распределения частиц при импульсной десорбции нескольких монослоев на основе одномерных расчетов (см. [5, 6]). Позднее на основе двумерных расчетов было исследовано влияние размера пятна испарения на разлет частиц (см. [7]), изучены структура формирующегося факела и динамика его разлета (см. [8, 9]). Также исследовано влияние химических реакций (см. [10]) и потенциала межатомного взаимодействия в факеле

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 22-11-00078). Расчеты проводились с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования “Высокопроизводительные вычисления и большие данные” (ЦКП “Информатика”) ФИЦ ИУ РАН и МСЦ РАН (г. Москва).

(см. [11]) на динамику расширения. Изучено влияние давления испаряемого вещества на формирующиеся угловые распределения частиц (см. [12]). Особое внимание уделялось эффектам разделения компонентов газовой смеси при абляции многокомпонентных веществ (см. [13–15]).

В ряде работ анализировались времяпролетные распределения частиц, пролетающих через детектор малого размера, расположенный на нормали к поверхности испарения. Исследовано влияние теплоты парообразования и химических реакций на времяпролетные распределения (см. [16]). Введение в расчет высокоскоростных частиц для учета эффекта рекомбинации ионов позволило описать времяпролетные распределения в условиях формирования плазмы в лазерном факеле (см. [17]). Было показано, что использование расчетной базы данных времяпролетных распределений позволяет определить температуру облучаемой поверхности из экспериментальных распределений (см. [18]), в то время как обычно используемые подгоночные формулы сильно завышают температуру поверхности (см. [19]). Было объяснено, почему энергия частиц во времяпролетном распределении может в несколько раз превышать энергию частиц при испарении, и показано, как эта энергия зависит от размера пятна (см. [20]) и от количества испаряемых монослоев (см. [21]). Раскрыты причины немонотонности этого роста энергии для большого числа монослоев и определена максимально достижимая средняя энергия частиц во времяпролетном распределении (см. [22]). Показано, что учет эволюции лазерного излучения во времени (см. [23, 24]) и его неоднородности вдоль радиуса пятна испарения (см. [25]) мало влияет на энергию и функцию распределения частиц по скоростям на времяпролетном детекторе.

С другой стороны, следует отметить работы в рамках подходов сплошной среды. Проведен анализ различных стадий разлета газа при испарении в вакуум (см. [26]), выведено одномерное аналитическое континуальное решение для адиабатического газа (см. [27, 28]), и получено соответствующее численное решение (см. [29]). В осесимметричной постановке рассматриваются газодинамические уравнения в предположении изотермического (см. [30]) или адиабатического расширения, причем в последнем случае удалось получить относительно простые уравнения, которые описывают изменение формы облака и профиль осаждаемой пленки (см. [31]).

Данное континуальное решение достаточно широко используется для описания динамики разлета облака и экспериментально измеренных угловых распределений частиц. Однако это решение не учитывает эффекты разреженности течения, которые могут возникать при испарении небольшого количества вещества. Поэтому интересно рассмотреть влияние разреженности течения на динамику разлета и сравнить точное кинетическое решение задачи с континуальным решением. Целью настоящей работы является проведение такого исследования с анализом изменения формы облака при импульсном испарении в вакуум в осесимметричной постановке для широкого диапазона режимов разреженности. Для получения достоверного численного решения используются два разных кинетических подхода: прямое статистическое моделирование методом Монте-Карло и решение модельного уравнения. Ранее эти два подхода были использованы вместе для получения достоверного решения задачи импульсного испарения в вакуум применительно к анализу времяпролетных распределений частиц только в рамках одномерной постановки задачи (см. [22, 32]).

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается двухмерная осесимметричная задача импульсного испарения в вакуум. Предполагается механизм нормального испарения, соответствующий тепловой модели абляции. Молекулы испаряются с поверхности круглого пятна площадью $S = \pi R^2$ с энергией, соответствующей температуре поверхности T_0 . Для скоростей испаряющихся частиц задается полу-максвелловская функция распределения. Давление насыщенного пара определяется уравнением Клапейрона–Клаузиуса

$$p_s(T_0) = p_b \exp \left\{ \frac{L_V}{k} \left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_0} \right) \right\}, \quad (1)$$

где T_b – температура кипения при давлении p_b , L_V – скрытая теплота парообразования, k – постоянная Больцмана. Отметим, что параметры T_b и p_b не предполагают механизм взрывного вскипания и используются в качестве нормирующих величин. Давление определяет плотность

насыщенного пара $n_0(T) = p_S(T_0)/(kT_0)$. В течение временного интервала τ задается постоянный поток молекул Ψ_{VAP} :

$$\Psi_{VAP} = \frac{1}{4} n_0 u_T, \quad (2)$$

где $u_T = \sqrt{8kT_0/(\pi m)}$ – средняя тепловая скорость частиц при испарении, m – масса молекулы. Для описания межмолекулярных взаимодействий используется модель твердых сфер. Предполагается, что все возвращающиеся молекулы поглощаются на поверхности испарения.

Решение задачи в данной постановке однозначно определяется количеством испаренного вещества и размером пятна испарения. Общее число испаренных частиц за все время действия импульса τ равняется

$$N = \tau \Psi S. \quad (3)$$

Предположим, что одна частица занимает площадь на поверхности испарения $\Sigma = \sigma/4$, где σ – полное сечение столкновений. Определим, что один монослой испаренного вещества соответствует такому числу частиц N_1 , когда вся поверхность пятна испарения полностью заполнена частицами, т.е.

$$N_1 = S/\Sigma. \quad (4)$$

Тогда общее число испаренных монослоев с поверхности будет равно

$$\Theta = \frac{N}{N_1} = \tau \Psi_{VAP} \Sigma = \frac{u_T \tau}{16\sqrt{2}\lambda_0} = \frac{\sigma \tau p_S(T_0)}{4\sqrt{2\pi m k T_0}}, \quad (5)$$

где $\lambda_0 = 1/(n_0 \sigma \sqrt{2})$ – средняя длина пробега.

Размер пятна испарения также удобно представить в безразмерном виде, поделив радиус на характерную длину облака испаренных частиц в момент завершения импульса:

$$b = \frac{R}{u_T \tau} = \frac{R}{16\sqrt{2}\Theta \lambda_0}. \quad (6)$$

Данные параметры определяют режим разреженности течения. Действительно, из (6) можно оценить начальное число Кнудсена течения по размеру пятна испарения как

$$\text{Kn} = \frac{\lambda_0}{R} = \frac{1}{16\sqrt{2}\Theta b}. \quad (7)$$

Отметим, что в процессе разлета плотность газа в облаке уменьшается, и соответственно число Кнудсена увеличивается.

Диапазон изменения безразмерного радиуса пятна испарения b можно оценить следующим образом. Типичный размер пятна испарения при лазерной абляции $R = 0.1-1$ мм. Для молекулярной массы $m = 12-200$ а.е.м. и температуры поверхности $T = 4000-8000$ К получаем по формуле тепловую скорость $u_T = 700-8000$ м/с. В результате по формуле (6) получаем для длительности испарения $\tau = 10$ нс безразмерный радиус пятна испарения $b = 3-150$. В то же время при лазерной десорбции (обычно для $\Theta < 1$) длительность испарения может быть намного меньше, чем длительность действия лазерного импульса, поэтому имеет смысл увеличить рассматриваемый диапазон вплоть до $b = 1000$.

2. РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

2.1. Модель БГК

В первом из кинетических подходов решается уравнение Больцмана с интегралом столкновений в виде модели БГК (Бхатнагара, Гросса и Крука) (см. [33]). Хотя поставленная двумерная задача допускает существенное упрощение путем введения цилиндрической системы координат (см., например, [34, 35]), в настоящем исследовании решение строилось в декартовой системе координат, так как в расчетах использовался универсальный трехмерный решатель. Макроскопические параметры, такие как числовая плотность n , вектор средней скорости $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$,

давление p и температура T выражаются через функцию распределения в виде интегралов по молекулярной скорости:

$$n = \int f d\xi, \quad n\mathbf{u} = \int \xi f d\xi, \quad \frac{3}{2}p + \frac{1}{2}mnu^2 = \frac{1}{2}m \int \xi^2 f d\xi, \quad p = nkT. \quad (8)$$

Кинетическое уравнение для функции распределения с оператором столкновений в форме модели БГК имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\xi_\alpha f) = J(f), \quad J = v(f_M - f), \quad v = \frac{p}{\mu}, \quad (9)$$

$$f_M = \frac{n}{(2\pi kT/m)^{3/2}} e^{-c^2}, \quad \mathbf{c} = \frac{\xi - \mathbf{u}}{\sqrt{2kT/m}}.$$

Коэффициент динамической вязкости выбран в соответствии с моделью твердых сфер:

$$\mu = \frac{5}{16} \sqrt{\frac{\pi m k T}{\sigma}}. \quad (10)$$

Граничное условие для молекул, движущихся в область течения с поверхности пятна ($\xi_x > 0$), имеет вид

$$f = f_0 = \begin{cases} \frac{n}{(2\pi k T_0/m)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2k T_0/m}\right), & t \leq \tau, \\ 0, & t > \tau. \end{cases} \quad (11)$$

Вне пятна для любого момента времени предполагается полное поглощение падающих молекул, так что $f = f_w = 0$.

Решение задачи зависит от параметра разреженности δ , который обратно пропорционален числу Кнудсена (Kn) и определяется по формуле

$$\delta = \frac{Rp_0}{\mu_0 \beta_0}, \quad (12)$$

где μ_0 – вязкость (10) при температуре T_0 , $\beta_0 = \sqrt{2kT_0/m}$ – наиболее вероятная скорость молекул при температуре T_0 . Для модели твердых сфер

$$\delta = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{1}{Kn} = \frac{32\sqrt{2}}{5\sqrt{\pi}} \Theta b. \quad (13)$$

2.2. Метод дискретных ординат

Для решения кинетического уравнения (9) в настоящей работе используется недавнее обобщение (см. [36]) универсального метода дискретных скоростей (discrete ordinate method – DVM) (см. [37–39]), предназначенное для моделирования нестационарных течений на основе общего лагранжево-эйлерового (arbitrary Lagrangian-Eulerian – ALE) подхода (см. [40–42]). Основное отличие данного метода DVM-ALE от более традиционных подходов (см. [43, 44]) состоит в использовании деформирующихся пространственных сеток и расширении пространственных областей, что значительно увеличивает скорость счета. Для полноты представления результатов кратко опишем общую идею DVM-ALE.

Введем в скоростном пространстве ограниченную расчетную область и расчетную сетку с общим числом ячеек N_ξ . Обозначим через $\xi_j = (\xi_{1j}, \xi_{2j}, \xi_{3j})^T$ центр ячейки j , ω_j – ее объем. Функции f, f_M будем задавать в центрах ячеек скоростной сетки, интерпретируя их как векторы длины N_ξ с компонентами $f_j = f(t, \mathbf{x}, \xi_j)$, $(f_M)_j = f_M(t, \mathbf{x}, \xi_j)$. Кинетическое уравнение (9) переписывается в виде системы из N_ξ уравнений и в векторной форме имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\hat{\xi}_\alpha \circ \mathbf{f}) = \mathbf{J}, \quad \mathbf{J} = v(\mathbf{f}_M - \mathbf{f}), \quad (14)$$

где $\hat{\xi}_k = (\xi_{k1}, \xi_{k2}, \dots, \xi_{kN_\xi})$ – вектор, составленный из значений компоненты k координат центров ячеек скоростной сетки, символом \circ обозначена операция покомпонентного умножения двух векторов.

В физическом пространстве введем расчетную область конечного размера. В настоящей работе мы ограничиваемся только сетками с шестигранными ячейками с четырехугольными гранями A_{lj} , где l – номер грани. Общее количество ячеек равняется N_{space} . Обозначим через $\mathbf{U}(t, \mathbf{x})$ скорость движения сетки, способ задания которой будет приведен ниже. Используя общепринятый способ перехода от системы дифференциальных уравнений (14) к интегральным соотношениям для подвижного деформирующегося контрольного объема V_i , получаем следующую полудискретную схему для нахождения значений функции распределения \mathbf{f}_i :

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_i |V_i) = \mathbf{R}_i, \quad \mathbf{R}_i = -\sum_l \Phi_{li} + |V_i| \mathbf{J}_i, \tag{15}$$

$$\Phi_{li} = \int_{A_{li}} (\hat{\xi}_{nli} - U_{nli} \mathbf{I}) \circ \mathbf{f} ds, \quad \hat{\xi}_{nli} = \hat{\xi}_\alpha n_{\alpha li}, \quad U_{nli} = U_\alpha n_{\alpha li}, \tag{16}$$

где $\mathbf{n}_{li} = (n_1, n_2, n_3)_{li}^T$ – внешняя единичная нормаль к грани l пространственной ячейки V_i , \mathbf{I} – единичный вектор размерности N_ξ .

Пространственный оператор аппроксимируется методом Годунова второго порядка точности, представляющим собой комбинацию кусочно-линейной реконструкции решения по координатным направлениям и точного римановского решателя на границах ячеек. Поскольку решение кинетического уравнения является разрывным, используется квазимонотонная кусочно-линейная реконструкция, впервые предложенная независимо Колганом (см. [45, 46]) и ван Ли-ром (см. [47]). Для подавления возможных осцилляций на разрывах используется ограничитель наклонов “van Albada”. В результате применения процедуры реконструкции для каждой грани сетки получается пара значений функции распределения $\mathbf{f}_{li}^-, \mathbf{f}_{li}^+$, соответствующих экстраполяции решения с двух сторон грани. Выражение для численного потока Φ_{li} записывается с учетом движения сетки в физическом пространстве:

$$\Phi_{li} = \frac{1}{2} (\hat{\xi}_{nli} - U_{nli} \mathbf{I}) \circ \left[(f_{li}^+ + f_{li}^-) - \mathbf{K}_{li} \circ (f_{li}^+ - f_{li}^-) \right] |A_{li}|, \tag{17}$$

$$\mathbf{K}_{li} = \text{sign}(\hat{\xi}_{nli} - U_{nli} \mathbf{I}). \tag{18}$$

Вычисление модельного (приближенного) интеграла столкновений \mathbf{J} (индексы сетки по пространству и шагу времени опущены для простоты) требует знания макроскопических величин $\mathbf{W} = (n, \mathbf{u}, T)$. В настоящей работе вектор \mathbf{W} находится из системы уравнений, выражающей законы сохранения массы, импульса и энергии (см. [48, 49])

$$\mathbf{H}(\mathbf{W}) = \sum_{j=1}^{N_\xi} (1, \hat{\xi}, \xi^2)_j (f_M - f)_j \omega_j = \mathbf{0}. \tag{19}$$

Здесь индекс пространственной сетки i опущен для простоты. Выписанная система нелинейных уравнений (19) решается методом Ньютона. В качестве начального приближения используются значения, полученные обычной аппроксимацией выражений (8) квадратурной формулой второго порядка точности. Для ускорения счета точная матрица Якоби системы уравнений заменяется приближенной матрицей, которая явным образом выражается через макропараметры газа без необходимости интегрирования по молекулярной скорости (см. [37]). Помимо этого, итерационная процедура решения системы для расчета макропараметров может расходиться в областях с низкими температурами и высокими скоростями, что не редкость для метода Ньютона. Для решения этой проблемы предлагается ограничить приращение вектора \mathbf{W} значением 10% для компонент плотности и температуры и 20% локальной скорости звука для компонентов скорости. Данная модификация позволила обеспечить надежную работу метода (19) для практически произвольной скоростной сетки.

Продвижение по времени осуществляется с помощью явной схемы Рунге–Кутты 2-го порядка с уменьшением полной вариации (TVD) (см. [50]). В результате получаем итоговый вид нового метода дискретных скоростей на подвижной сетке:

$$\mathbf{f}_i^* |V_i^{n+1}| = \mathbf{f}_i^n |V_i^n| + \Delta t^n \mathbf{R}_i(f^n), \quad (20)$$

$$\mathbf{f}_i^{n+1} |V_i^{n+1}| = \frac{1}{2} \left(\mathbf{f}_i^n |V_i^n| + \mathbf{f}_i^* |V_i^{n+1}| + \Delta t^n \mathbf{R}_i(f^*) \right), \quad (21)$$

где величина шага по времени $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$ выбирается по обычной формуле, модифицированной для учета движения и деформации сетки.

Описанный метод DVM-ALE реализован в параллельном коде Несветай (см. [51]), разрабатываемом в ФИЦ ИУ РАН вторым автором. Для проведения вычислений на современных многопроцессорных супер ЭВМ с возможностью использования десятков тысяч ядер в пакете Несветай реализована двухуровневая модель параллельных вычислений MPI + OpenMP (см. [52]), которая активно развивается в последние годы в приложении к газодинамическим расчетам (см., например, [53, 54]).

2.3. Расчетные сетки и параметры расчетов

Для построения расчетных сеток использовался пакет Ansys ICEM CFD (см. [55]), лицензия на который имеется в ФИЦ ИУ РАН. Осесимметричные расчеты проводились на трехмерной многоблочной пространственной сетке, построенной для четверти полупространства $y \geq 0, z \geq 0$ (см. [36]). В плоскостях yz и xz использовалось граничное условие зеркального отражения молекул. Сетка состояла из 100 ячеек по координате x , 46 ячеек в радиальном направлении и восьми ячеек по угловой координате. Общее число ячеек равнялось 35 тысячам. Начальный размер расчетной области $0 \leq x \leq 0.05R, y^2 + z^2 \leq 3R$. Как правило, скорость движения вершин пространственной сетки внутри области линейно пропорциональна их относительному положению по отношению к внешней границе области.

Для построения неструктурированной скоростной сетки использовался подход, предложенный в [32] и хорошо зарекомендовавший себя в задачах испарения с плоской поверхности (см. [22]). Для $\xi_x \geq 0$ скоростная сетка строится путем вытягивания в радиальном направлении треугольной сетки на единичной сфере с некоторым сгущением к $\xi_r \approx 2.5\beta_0$. При $\xi_x < 0$ использовалась обычная гексаэдральная сетка. Общее число ячеек в построенной таким образом скоростной сетке равнялось 180 тысячам.

Важно отметить, что во избежание деления на нуль начальное состояние вакуума замещается фоновым газом с плотностью $n_b = 10^{-13}n_0$. Значение температуры фонового газа не имеет большого значения и для простоты принимается равным $T_b = 0.03T_0$. В начальный момент времени задается максвелловская функция распределения скоростей с плотностью и температурой фонового газа.

Поскольку расчетная область во время разлета газа постоянно увеличивается, необходимо задать алгоритм движения сетки в физическом пространстве. В направлении координаты x задается движение правой границы расчетной области со скоростью $4.5\beta_0$. Аналогичным образом задается движение границы области в радиальном направлении со скоростью $2.5\beta_0$. При этом скорость движения вершин сетки пропорциональна их относительному положению по отношению к внешней границе.

Основные вычисления проводились с использованием одного из высокопроизводительных вычислительных комплексов, установленных в ЦКП “Информатика” ФИЦ ИУ РАН. Комплекс состоит из 14 серверов, каждый из которых содержит два процессора Intel Xeon Gold 6338 (32 ядра; 2.0 ГГц; 2 потока на ядро) и 512 Гб оперативной памяти. Для межузловых обменов по протоколу MPI используется высокоскоростная сеть InfiniBand EDR с пропускной способностью 100 Гбит/с.

3. ПРЯМОЕ СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Используется традиционная схема метода ПСМ (см. [4]) с некоторыми элементами “усложненной” версии (см. [56]). Физическая область делится на вычислительные ячейки, и решение изменяется дискретными временными шагами. Процесс моделирования делится на две части:

во-первых, бесстолкновительное движение частиц в пространстве и, во-вторых, моделирование столкновений между частицами. Временная эволюция газового облака строится по модельным молекулам. Состояние каждой молекулы определяется ее положением в пространстве и вектором скорости. Столкновения между частицами моделируются по схеме “без счетчика времени”.

Схема ПСМ реализована первым автором в параллельном коде LasInEx (Laser-Induced-Expansion). Ранее этот код успешно использовался во многих исследованиях импульсной абляции (см. [22, 24, 25, 32]). Длина расчетной области в начальный момент времени составляла $0.5R$, а затем в ходе расчета увеличивалась каждые 1000–2000 шагов по времени таким образом, чтобы частицы не вылетали из расчетной области. При изменении расчетной области задавалась новая равномерная сетка. Обычно в расчете задавалось до 4 млн ячеек и до 200 млн частиц. Для более точного моделирования столкновений на каждом этапе столкновений использовались временные столкновительные подъячейки следующим образом: каждый раз при моделировании столкновений в каждой ячейке задавалось некоторое число подъячеек таким образом, чтобы среднее число молекул на подъячейку равнялось 8 (см. [56]). Некоторые режимы (с плотным начальным облаком, например, $\Theta > 10$ для $b = 10$) рассчитывались с использованием “равновесной” модификации метода ПСМ (см. [57]). В рамках этого подхода предполагается, что газ в каждой ячейке находится в состоянии теплового равновесия, и поэтому размер ячейки и временной шаг могут превышать локальную длину свободного пробега частиц и среднее время между столкновениями.

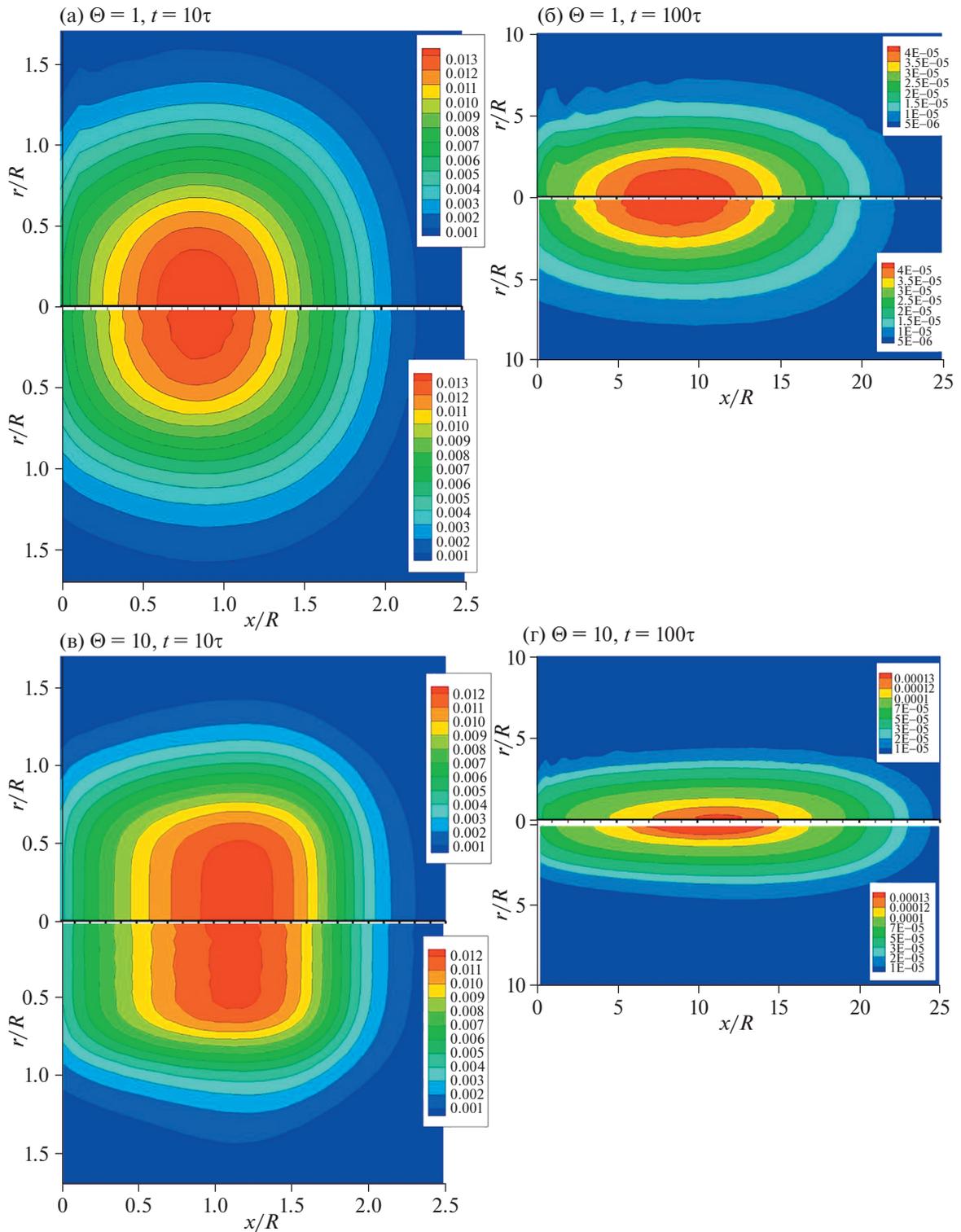
4. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

4.1. Изменение формы облака

На фиг. 1 представлены типичные распределения плотности при разлете газа в моменты времени $t = 10\tau$ и 100τ для $b = 10$ и числа монослоев $\Theta = 1$ и 10 . По формуле (7) для данных режимов начальное число Кнудсена (по плотности насыщенного пара) будет $\text{Kn} \approx 0.005$ и 0.0005 соответственно. Затем в процессе разлета степень разреженности существенно увеличивается. Так, в момент времени $t = 10\tau$ имеем значение плотности $n = 0.01n_0$ в облаке с характерным размером $L \approx R$, так что $\text{Kn} = \lambda/L \sim 0.4$ и 0.04 для $\Theta = 1$ и 10 соответственно, что свидетельствует о нарушении условий сплошной среды. Далее при времени $t = 100\tau$ имеем значение плотности $n \sim 0.0001n_0$ в облаке с характерным размером $L \approx 10R$, откуда получаем $\text{Kn} = \lambda/L \sim 4$ и 0.4 для $\Theta = 1$ и 10 соответственно, что уже соответствует переходу к практически бесстолкновительному режиму разлета газа. Видно достаточно хорошее согласие между результатами различных кинетических подходов. Отметим, что для ПСМ решения имеет место некоторая негладкость линий уровня плотности на малых временах, связанная с недостаточным количеством модельных частиц, а для решения кинетического уравнения — негладкость на больших временах, связанная с недостаточным разрешением скоростной сетки.

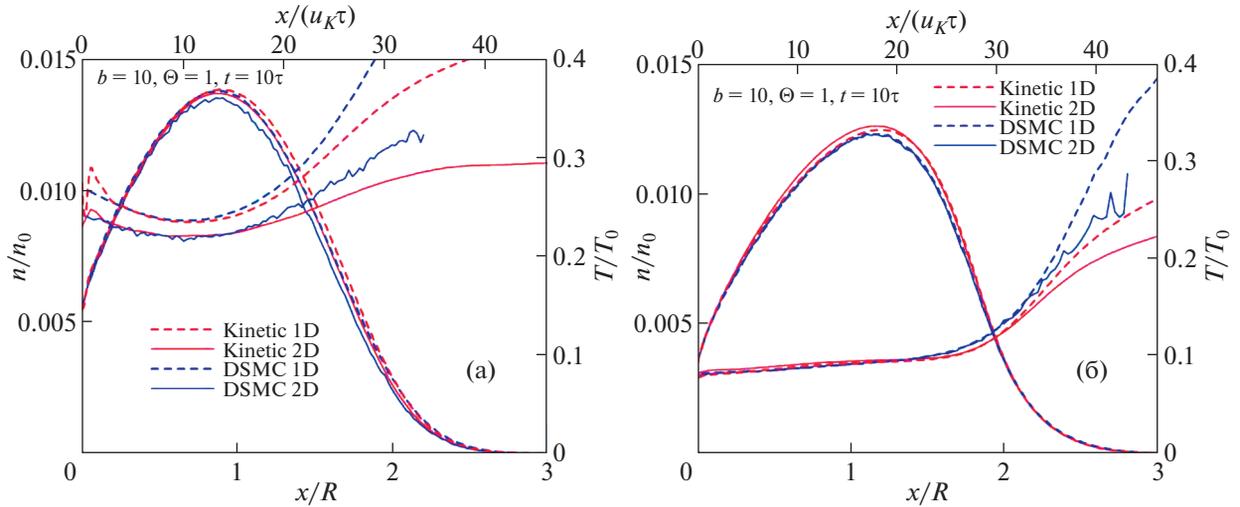
Для более детального сравнения расчетных данных на фиг. 2 представлены профили плотности и температуры на оси симметрии в момент времени $t = 10\tau$ для числа монослоев $\Theta = 1$ и 10 . Как следует из фиг. 1, в это время течение на оси является практически одномерным, поэтому для проверки точности расчета на фиг. 2 также приведены результаты соответствующих одномерных расчетов. Результаты решения кинетического уравнения и ПСМ хорошо согласуются между собой с отличием по плотности в пределах 1–2%. Для $\Theta = 10$ наблюдается полное согласие одномерных и двухмерных ПСМ расчетов, тогда как для решения кинетического уравнения для одномерного и двухмерного расчетов максимальная плотность отличается на 1%. Для $\Theta = 1$ двухмерный расчет дает заметно меньшее значение плотности и температуры, что, по-видимому, является проявлением эффектов двухмерности течения.

Отметим, что на фронте движения облака имеет место рост температуры с существенным расхождением результатов ПСМ и решения модельного уравнения. Повышение температуры обусловлено тем, что летящие на фронте частицы практически не испытывают столкновений между собой ввиду малой плотности, что приводит к нарушению теплового равновесия и “заморозке” неосевых компонент температуры (см. [8]). Отличие результатов двух рассматриваемых подходов объясняется фактически разными граничными условиями на фронте. Для метода ПСМ в расчете действительно задается вакуум (полное отсутствие фоновых частиц). Однако при решении модельного уравнения в окружающем пространстве задается газ с предельно малой плотностью $n_b = 10^{-13}n_0$ и температурой $T_b = 0.03T_0$. В результате в расчете на большом расстоянии перед

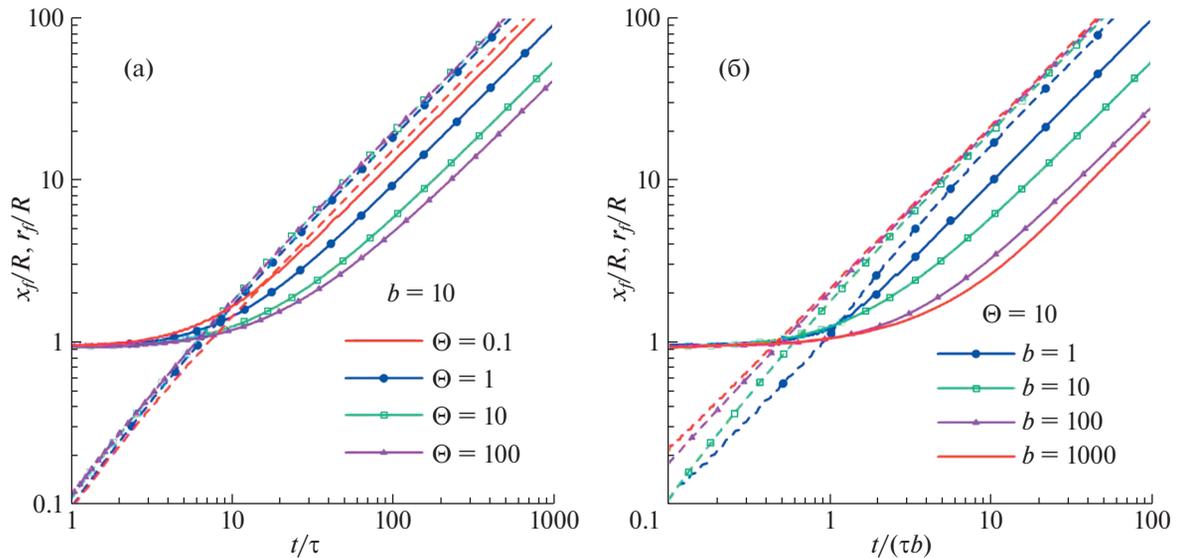


Фиг. 1. Поля плотности в момент времени $t = 10\tau$ и 100τ для $b = 10$, $\Theta = 1$ (а), (б) и 10 (в), (г). Вверху – кинетическое уравнение, внизу – ПСМ.

фронтом облака ($x/R \sim 4-5$ для режимов, фиг. 2) образуется ударная волна. Поскольку эта ударная волна реализуется при пренебрежимо малой плотности, мы ее не рассматриваем, однако само ее наличие, по-видимому, приводит к заметному искажению профиля температуры на фронте облака.



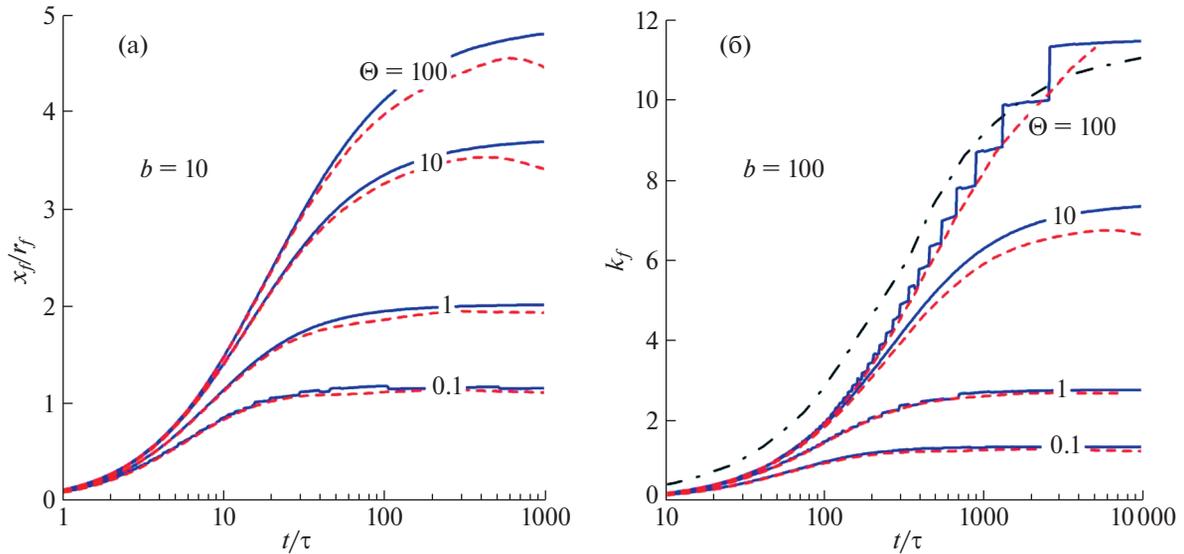
Фиг. 2. Профили плотности и температуры в момент времени $t = 10\tau$ для $b = 10$, $\Theta = 1$ (а) и 10 (б).



Фиг. 3. Временная эволюция положения фронта облака в осевом направлении x_f (штриховые линии) и в радиальном направлении r_f (сплошные линии) для фиксированного размера пятна $b = 10$ и разных значений числа монослоев (а) и фиксированного числа монослоев $\Theta = 10$ и разных значений размера пятна (б). Представлены результаты ПСМ.

4.2. Вытянутость облака в осевом направлении

Для анализа динамики изменения формы облака рассмотрим движение фронта облака в осевом и радиальном направлениях. Положение границы фронта облака определим как поверхность, за пределами которой вниз по потоку содержатся 10% всех частиц облака (см. [8]). На фиг. 3 представлена рассчитанная методом ПСМ временная эволюция границы фронта облака в осевом направлении (x_f) и в радиальном направлении (r_f). Видно, что осевое положение границы фронта слабо зависит от параметров задачи, тогда как радиальный размер облака r_f существенно уменьшается при увеличении размера пятна или числа монослоев. Следует отметить, что при уменьшении числа монослоев Θ скорость движения фронта в радиальном направлении увеличивается (фиг. 3а) и в бесстолкновительном пределе ($\Theta = 0$) совпадает со скоростью движения фронта в осевом направлении.



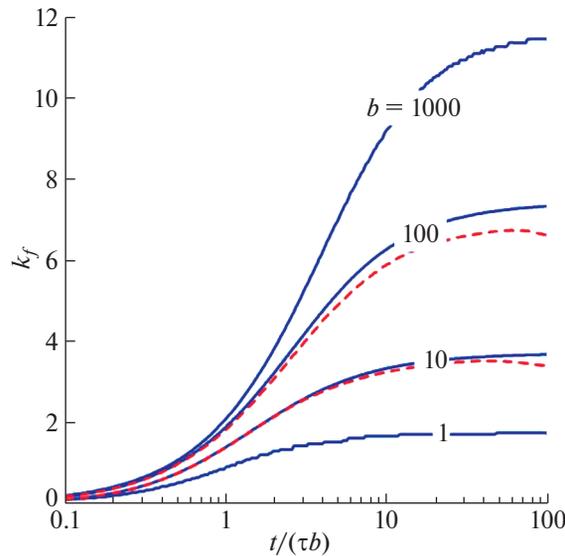
Фиг. 4. Временная эволюция степени вытянутости облака k_f для разных значений числа монослоев для размера пятна $b = 10$ (а) и 100 (б): ПСМ (сплошные линии), кинетическое уравнение (штриховые) и континуальное решение (штрихпунктир) (см. [31]).

Для оценки степени вытянутости факела в осевом направлении введем отношение $k_f = x_f/r_f$ (см. [31]), которое непосредственно определяет угловые распределения частиц в облаке. Временная эволюция степени вытянутости представлена на фиг. 4. Степень вытянутости сильно увеличивается как с увеличением числа монослоев, так и с увеличением размера пятна испарения. Так, для размера пятна $b = 10$ для $\Theta = 100$ получается максимальная вытянутость $k_f = 5$, тогда как для размера пятна $b = 100$ имеем максимальное значение $k_f = 11$. Со временем степень вытянутости k_f стремится к некоторому предельному значению.

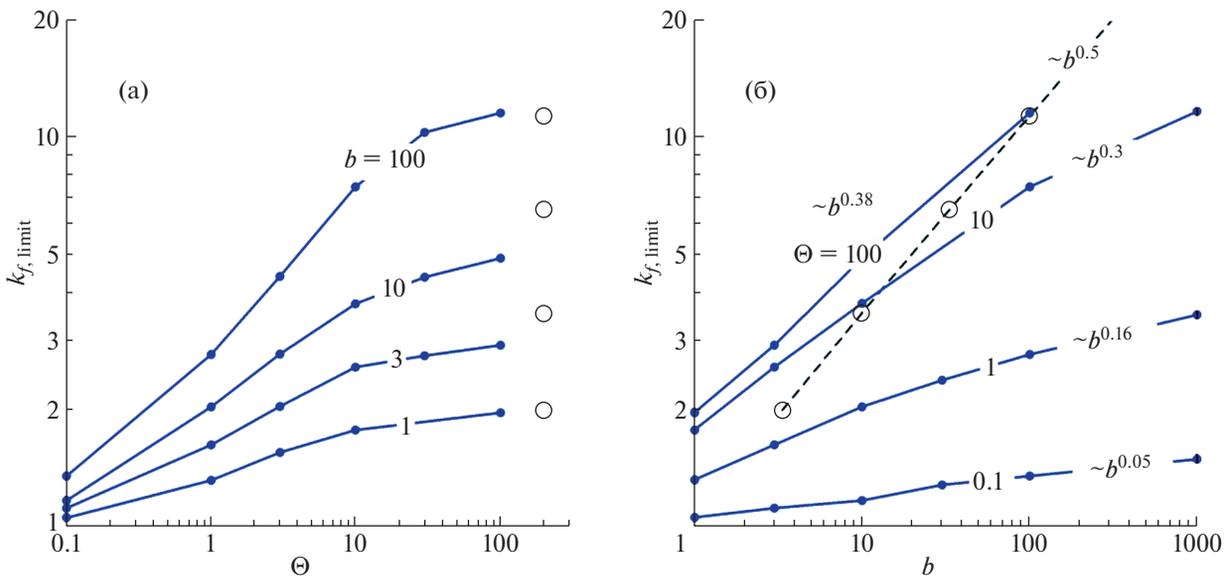
Решение кинетического уравнения и метод ПСМ дают близкие значения степени вытянутости. Начиная с некоторого момента, для числа монослоев 10 и 100 полученные в решении кинетического уравнения кривые начинают “заваливаться” вниз, что объясняется недостаточным разрешением пространственной сетки и сложностью проведения расчетов в вакуум с использованием конечного значения плотности газа, которое ограничено разрядностью ЭВМ. На фиг. 4б также представлено континуальное решение из работы [31]. Видно, что оно достаточно хорошо согласуется с кинетическими решениями для числа монослоев $\Theta = 100$.

На фиг. 5 представлена временная эволюция степени вытянутости для разных размеров пятна испарения b . Видно, что увеличение размера пятна испарения в 10 раз приводит примерно к двукратному увеличению степени вытянутости. Отметим, что время выхода степени вытянутости на предельное значение фактически пропорционально размеру пятна испарения $R \sim \tau b$.

Зависимость предельной степени вытянутости $k_{f,\text{limit}} = \lim_{t \rightarrow \infty} k_f(t)$ от размера пятна и числа монослоев представлена на фиг. 6. Также там приведено континуальное решение из работы [31]. При фиксированном числе монослоев Θ с увеличением нормированного размера пятна b степень вытянутости стремится к некоторому предельному значению, которое достаточно хорошо согласуется с континуальным решением (фиг. 6а) (см. [31]). Зависимость степени вытянутости от размера пятна b может быть описана степенной функцией в виде $k_{f,\text{limit}} \sim b^d$, где d меняется от нуля при бесстолкновительном разлете ($\Theta = 0$) до $d = 0.38$ при $\Theta = 100$. При этом для континуального решения получается $d = 0.5$. По-видимому, показатель степенной зависимости в расчетах ПСМ приблизится к $d = 0.5$ при дальнейшем увеличении числа монослоев (режимы с $\Theta > 100$, которые сейчас фактически невозможно посчитать ввиду ограниченных возможностей вычислительной техники). Отличия в конкретных значениях степени вытянутости в расчетах ПСМ и в решении из [31] связаны, по-видимому, с приближенным описанием факела в континуальной модели и другим определением фронта факела по сравнению с расчетом ПСМ.



Фиг. 5. Временная эволюция степени вытянутости облака k_f для фиксированного числа монослоев $\Theta = 10$ и разных значений размера пятна $b = 1, 10, 100, 1000$: ПСМ (сплошные линии) и кинетическое уравнение (штриховые).



Фиг. 6. Зависимость предельной степени вытянутости облака $k_{f,limit}$ от числа монослоев Θ (а) и от размера пятна испарения b (б): ПСМ расчет (сплошные линии) в сравнении с непрерывным решением из [31] (штриховая линия и кружки).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено численное исследование динамики разлета газа в осесимметричной постановке при наносекундном лазерном испарении в вакуум на основе прямого статистического моделирования методом Монте-Карло и решения модельного уравнения БГК. Выполнен анализ изменения формы формирующегося облака в зависимости от параметров задачи: числа испаренных монослоев и размера пятна испарения. Показано сильное влияние степени разреженности течения на вытянутость формирующегося облака. При испарении большого числа монослоев наблюдается хорошее согласие с непрерывным решением.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kelly R., Dreyfus R.W. Reconsidering the mechanisms of laser sputtering with Knudsen-layer formation taken into account // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1988. V. 32. № 1–4. P. 341–348.
2. Morozov A.A. Analytical formula for interpretation of time-of-flight distributions for neutral particles under pulsed laser evaporation in vacuum // J. Phys. D: Appl. Phys. 2015. V. 48. № 19. P. 195501–195512.
3. Konomi I., Motohiro T., Asaoka T. Angular distribution of atoms ejected by laser ablation of different metals // J. Appl. Phys. 2009. V. 106. P. 013107–013115.
4. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation Monte Carlo method. Oxford: Clarendon Press, 1994.
5. NoorBatcha I., Lucchese R.R., Zeiri Y. Effects of gas-phase collisions on particles rapidly desorbed from surfaces // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. P. 4978–4981.
6. Feil H., Baller T.S., Dieleman J. Effects of post-desorption collisions on the energy distribution of SiCl molecules pulsed-laser desorbed from Cl-covered Si surfaces: Monte-Carlo simulations compared to experiments // Appl. Phys. A. 1992. V. 55. P. 554–560.
7. Sibold D., Urbassek H.M. Effect of gas-phase collisions in pulsed-laser desorption: a three-dimensional Monte Carlo simulation study // J. Appl. Phys. 1993. V. 73. № 12. P. 8544.
8. Булгакова Н.М., Плотников М.Ю., Ребров А.К. Исследование разлета продуктов лазерного испарения методом прямого статистического моделирования // Теплофизика и аэромеханика. 1998. Т. 5. № 3. С. 421.
9. Morozov A.A. Dynamics of gas cloud expansion under pulsed laser evaporation into vacuum // J. Phys. Conf. Ser. 2018. V. 1105. P. 012116.
10. Itina T.E., Tokarev V.N., Marine W., Autric M. Monte Carlo simulation study of the effects of nonequilibrium chemical reactions during pulsed laser desorption // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. P. 8905–8912.
11. Petrov V.A., Ranjbar O.A., Zhilyaev P.A., Volkov A.N. Kinetic simulations of laser-induced plume expansion from a copper target into a vacuum or argon background gas based on ab initio calculation of Cu–Cu, Ar–Ar, and Ar–Cu interactions // Phys. Fluid. 2020. V. 32. P. 102010–102027.
12. Konomi I., Motohiro T., Kobayashi T., Asaoka T. Considerations on the determining factors of the angular distribution of emitted particles in laser ablation // Appl. Surf. Sci. 2010. V. 256. P. 4959–4965.
13. Urbassek H.M., Sibold D. Gas-phase segregation effects in pulsed laser desorption from binary targets // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 1886–1889.
14. Morozov A.A., Mironova M.L. Numerical analysis of time-of-flight distributions of neutral particles for pulsed laser ablation of binary substances into vacuum // Appl. Phys. A. 2017. V. 123. № 12. P. 783, 1–9.
15. Morozov A.A., Starinskiy S.V., Bulgakov A.V. Pulsed laser ablation of binary compounds: effect of time delay in component evaporation on ablation plume expansion // J. Phys. D: Appl. Phys. 2021. V. 54. № 17. P. 175203.
16. Itina T.E., Patrone L., Marine W., Autric M. Numerical analysis of TOF measurements in pulsed laser ablation // Appl. Phys. A. 1999. V. 69. P. S59–S65.
17. Garrelie F., Aubreton J., Catherinot A. Monte Carlo simulation of laser-induced plasma plume expansion under vacuum: comparison with experiments // J. Appl. Phys. 1998. V. 83. № 10. P. 5075–5082.
18. Morozov A.A. Interpretation of time-of-flight distributions for neutral particles under pulsed laser evaporation using direct Monte Carlo simulation // J. Chem. Phys. 2013. V. 139. P. 234706–234714.
19. Bykov N.Y., Bulgakova N.M., Bulgakov A.V., Loukianov G.A. Pulsed laser ablation of metals in vacuum: DSMC study versus experiment // Appl. Phys. A. 2004. V. 79. P. 1097–1100.
20. Morozov A.A. Analysis of time-of-flight distributions under pulsed laser ablation in vacuum based on the DSMC calculations // Appl. Phys. A. 2013. V. 111. P. 1107–1111.
21. Morozov A.A., Evtushenko A.B., Bulgakov A.V. Gas-dynamic acceleration of laser-ablation plumes: Hyperthermal particle energies under thermal vaporization // Appl. Phys. Lett. 2015. V. 106. P. 054107–054122.
22. Morozov A., Titarev V. Planar gas expansion under intensive nanosecond laser evaporation into vacuum as applied to time-of-flight analysis // Entropy. 2022. V. 24. P. 1738.
23. Ellegaard O., Schou J., Urbassek H.M. Monte–Carlo description of gas flow from laser-evaporated silver // Appl. Phys. A. 1999. V. 69. P. S577–S581.
24. Morozov A.A. Effect of temporal evolution of the evaporation surface temperature on the plume expansion under pulsed laser ablation // J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1677. P. 012143–012150.
25. Morozov A.A. Effect of evaporation-flux nonuniformity along the irradiation-spot radius on the plume expansion dynamics during pulsed laser ablation in vacuum // Thermophysics and Aeromechanics. 2022. V. 29. P. 437–448.
26. Kelly R. Gas dynamics of the pulsed emission of a perfect gas with applications to laser sputtering and to nozzle expansion. // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. № 2. P. 860–874.
27. Sibold D., Urbassek H.M. Gas-dynamic study of pulsed desorption flows into a vacuum // Phys. Fluids A. 1992. V. 4. P. 165.
28. Kelly R., Miotello A. Pulsed-laser sputtering of atoms and molecules. Part I: Basic solutions for gas-dynamic effects // Appl. Phys. B. 1993. V. 57. P. 145–158.

29. *Miotello A., Moro C.* Numerical solution of gas-dynamic equations with boundary conditions for reflection and recondensation // *Phys. Lett. A.* 1995. V. 199. P. 333–338.
30. *Singh R.K., Narayan J.* Pulsed-laser evaporation technique for deposition of thin films: physics and theoretical model // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 41. № 13. P. 8843–8859.
31. *Anisimov S.I., Bäuerle D., Luk'yanchuk B.S.* Gas dynamics and film profiles in pulsed-laser deposition of materials // *Phys. Rev. B.* 1993. V. 48. P. 12076–12081.
32. *Morozov A.A., Frolova A.A., Titarev V.A.* On different kinetic approaches for computing planar gas expansion under pulsed evaporation into vacuum // *Phys. Fluid.* 2020. V. 32. № 11. P. 112005.
33. *Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M.* A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // *Phys. Rev.* 1954. V. 94. № 511. P. 1144–1161.
34. *Shakhov E.M.* Solution of axisymmetric problems of the theory of rarefied gases by the finite-difference method // *USSR Comput. Math. and Math. Phys.* 1974. V. 14. № 4. P. 147–157.
35. *Larina I.N., Rykov V.A.* A numerical method for calculating axisymmetric rarefied gas flows // *Comput. Math. and Math. Phys.* 1998. V. 38. № 8. P. 1335–1346.
36. *Titarev V.A., Morozov A.A.* Arbitrary Lagrangian-Eulerian discrete velocity method with application to laser-induced plume expansion // *Appl. Math. and Comput.* 2022. V. 429. P. 127241.
37. *Titarev V.A.* Implicit numerical method for computing three-dimensional rarefied gas flows using unstructured meshes // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2010. V. 50. № 10. P. 1719–1733.
38. *Titarev V.A.* Application of model kinetic equations to hypersonic rarefied gas flows // *Comput. and Fluid.* 2018. V. 169. P. 62–70.
39. *Titarev V.A.* Application of the Nesvetay code for solving three-dimensional high-altitude aerodynamics problems // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2020. V. 60. P. 737–748.
40. *Hirsh C.* Numerical computation of internal and external flows. 2nd Ed. Publ.: John Wiley & Sons, 2007.
41. *Gaburro E., Dumbser M., Castro M.J.* Direct Arbitrary-Lagrangian-Eulerian finite volume schemes on moving nonconforming unstructured meshes // *Comput. and Fluid.* 2017. V. 159. P. 254–275.
42. *Boscheri W., Dimarco G.* High order central WENO-implicit-explicit Runge Kutta schemes for the BGK model on general polygonal meshes // *J. Comput. Phys.* 2020. V. 422. P. 109766.
43. *Gusarov A.V., Smurov I.* Influence of atomic collisions in vapour phase on pulsed laser ablation // *Appl. Surf. Sci.* 2000. V. 168. P. 96–99.
44. *Titarev V.A., Shakhov E.M.* Heat transfer and evaporation from a plane surface into a half-space upon a sudden increase in body temperature // *Fluid Dynamics.* 2002. V. 37. № 1. P. 126–137.
45. *Колган В.П.* Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных течений газовой динамики // *Уч. зап. ЦАГИ.* 1972. Т. 3. № 6. С. 68–77.
46. *Kolgan V.P.* Application of the principle of minimizing the derivative to the construction of finite-difference schemes for computing discontinuous solutions of gas dynamics // *J. Comput. Phys.* 2011. V. 230. № 7. P. 2384–2390.
47. *van Leer B.* Towards the ultimate conservative difference scheme I: the quest for monotonicity // *Lect. Not. Phys.* 1973. V. 18. P. 163–168.
48. *Mieussens L.* Discrete-velocity models and numerical schemes for the Boltzmann-BGK equation in plane and axisymmetric geometries // *J. Comput. Phys.* 2000. V. 162. № 2. P. 429–466.
49. *Gusarov A.V., Smurov I.* Gas-dynamic boundary conditions of evaporation and condensation: numerical analysis of the Knudsen layer // *Phys. Fluid.* 2002. V. 14. № 12. P. 4242–4255.
50. *Shu C.-W.* Total-Variation-Diminishing time discretizations // *SIAM J. Sci. and Statistic. Comput.* 1988. V. 9. P. 1073–1084.
51. *Титарев В.А.* Программный комплекс Несветай-3Д моделирования пространственных течений одноатомного разреженного газа // *Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Элект. журн.* 2014. № 6. С. 124–154.
52. *Titarev V.A., Utyuzhnikov S.V., Chikitkin A.V.* OpenMP + MPI parallel implementation of a numerical method for solving a kinetic equation // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2016. V. 56. № 11. P. 1919–1928.
53. *Gorobets A.V., Duben A.P.* Technology for supercomputer simulation of turbulent flows in the good new days of exascale computing // *Supercomput. Frontiers and Innovat.* 2021. V. 8. № 4. P. 4–10.
54. *Alvarez-Farre X., Gorobets A., Trias F.X.* A hierarchical parallel implementation for heterogeneous computing. Application to algebra-based CFD simulations on hybrid supercomputers // *Comput. and Fluid.* 2021. V. 214. P. 104768.
55. Ansys ICEM CFD, version 2021 R2. Ansys ICEM CFD Help Manual. 772 с.
56. *Bird G.A.* Sophisticated versus simple DSMC // *Rarefied Gas Dynamics. Proc. 25th Intern. Symp.*, Ed. by M.S. Ivanov and A.K. Rebrov. Novosibirsk, 2007. P. 349.
57. *Titov E.V., Levin D.A.* Extension of the DSMC method to high pressure flows // *Inter. J. Comput. Fluid Dyn.* 2007. V. 21. P. 351.