

ПРЯМОЕ СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗЛЕТА ОБЛАКА ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ИСПАРЕНИИ БИНАРНОГО ВЕЩЕСТВА

Миронова М.Л.

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

Исследование импульсного испарения представляет интерес применительно к лазерной абляции вещества. Процесс лазерной абляции твердых материалов широко используется в современных технологиях, связанных с напылением пленок, обработкой поверхности, получением кластеров и т.д. [1, 2]. В результате газодинамических процессов во время разлета происходит перераспределение энергии и меняется конфигурация и состав облака, что важно учитывать при анализе экспериментальных данных. При абляции многокомпонентных материалов рассмотрения газодинамических процессов становится еще более важным, поскольку имеет место перенос энергии между компонентами. В настоящее время теория газодинамических процессов при лазерной абляции многокомпонентных веществ слабо разработана, что обуславливает актуальность соответствующих теоретических исследований.

Особое внимание в данной работе уделяется анализу времяпролетных распределений, поскольку они являются одним из основных инструментов для анализа динамики и механизмов лазерной абляции. В настоящий момент теория времяпролетных распределений фактически отсутствует. Анализ разделения компонент смеси может быть использован для расшифровки времяпролетных распределений с целью определения условий абляции.

В данной работе представлены результаты по разделению компонент бинарной смеси газов на основе численного моделирования разлета газа при импульсном испарении в вакуум.

Решается одномерная задача испарения частиц бинарного вещества с плоской поверхности с последующим разлетом в вакуум. Все частицы, вернувшиеся к поверхности испарения, конденсируются. Для решения данной задачи применяется метод прямого статистического моделирования [3]. Для описания межмолекулярных столкновений используется модель твердых сфер. Основные параметры задачи: отношение масс $M/m = 5$, концентрация компонент одинакова. Расчеты проведены для диапазона числа испаренных монослоев $\Theta = 0.01 \div 500$.

Для анализа экспериментальных данных важна не столько общая энергия, сколько энергия молекул во времяпролетном распределении. Поскольку в реальности облако расширяется во все стороны, а в одномерном случае – только вперед, то на больших временах одномерная модель дает ошибки. Поэтому для вычисления такой энергии используется следующий подход: проводится расчет до времени 10τ (τ – время испарения), далее в предположении бесстолкновительного разлета отбираются только те молекулы, которые летят в конусе 2° (предполагается, что именно они попадут на детектор). Данный подход был предложен и апробирован в работе [4].

Получены данные по разделению энергии для смеси газов. На рис. 1 представлено отношение энергий компонент в зависимости от числа монослоев. Видно, что увеличение числа испаренных монослоев приводит к увеличению отношения энергий как в облаке в целом, так и для частиц во времяпролетном детекторе. При этом предельное отношение энергий соответствует отношению масс компонент.

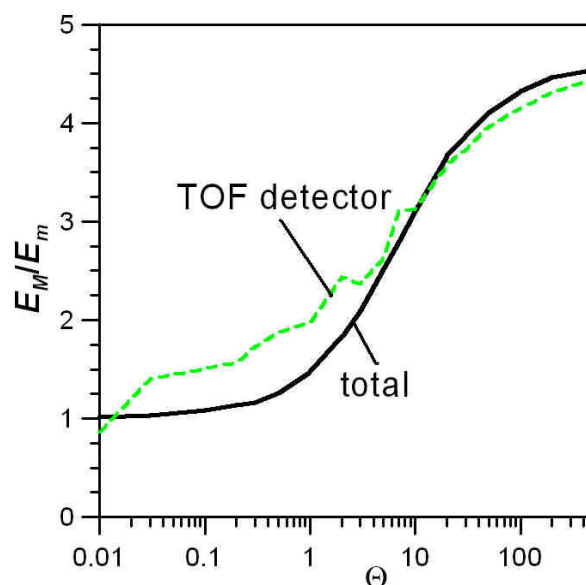


Рис. 1. Зависимость отношения энергий компонент для всех молекул в облаке (total) и для молекул во времяпролетном детекторе (TOF detector) от числа монослоев.

Полученные данные по отношению энергий могут быть использованы для анализа экспериментальных данных и определения условий абляции (количества испаренного вещества и температуры поверхности).

Список литературы:

1. Laser Processing and Chemistry / D. Bauerle. Berlin: Springer, 2011.
2. Pulsed Laser Deposition of Thin Films / D. B. Chrisey and C. K. Hubler (Eds.). New York: Wiley, 1994.
3. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows / G.A. Bird. Oxford: Clarendon Press, 1994. 458 p.
4. 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.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 14-08-00604).