

УДК 536.42

В.И. МАЖУКИН¹, Н.М. НИКИФОРОВА², А.А. САМОХИН

ФОТОАКУСТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ ПРИ ПЛАВЛЕНИИ И ИСПАРЕНИИ ВЕЩЕСТВА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА

1. Введение

Действие импульсного лазерного излучения на поглощающие конденсированные среды сопровождается генерацией звуковых или ударных волн, несущих информацию о характере процессов в зоне облучения (см., например, [1–3] и цитированную там литературу). Возникающий фотоакустический эффект может быть обусловлен различными физическими механизмами, ответственными за изменение удельного объема вещества при поглощении излучения: обычный (равновесный) нагрев, неравновесное (нетепловое) возбуждение электронной подсистемы или фазовые переходы первого рода.

Возбуждаемые в среде импульсы давления могут регистрироваться, например, с тыльной стороны облучаемого образца с помощью соответствующих пьезодатчиков с разрешением порядка 1 нс. Возможности фотоакустической диагностики для исследования неравновесных фазовых превращений первого рода, таких как плавление или испарение, реализованы пока далеко не полностью. Это связано, в частности, с отсутствием достаточно подробных теоретических исследований динамики быстрых фазовых переходов в условиях лазерного воздействия, которые фактически могут быть выполнены только с помощью современных методов математического моделирования.

В настоящей работе рассматриваются особенности фотоакустического эффекта, связанные с плавлением и испарением вещества в зоне лазерного облучения. Постановка задачи и метод ее численного решения излагаются соответственно в разд. 2 и 3. В разд. 4 дается анализ полученных результатов, выводы сформулированы в Заключение.

2. Постановка задачи

Лазерный импульс с интенсивностью $G = 10^7\text{--}10^{10}$ Вт/см² поглощается в узкой приповерхностной зоне мишени, нагрев которой может сопровождаться

¹ Институт математического моделирования РАН, г. Москва

² МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва

© В.И. Мажукин, Н.М. Никифорова, А.А. Самохин, 2004

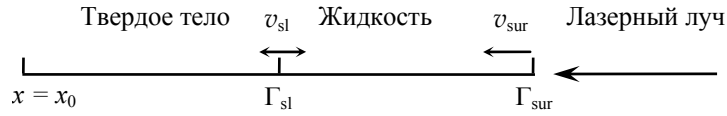


Рис. 1. Схема лазерного воздействия и распространения фазовых фронтов

фазовыми превращениями. Размер пятна облучения предполагается много большим глубины поглощения лазерного излучения, обратно пропорциональной коэффициенту поглощения, и глубины теплового прогрева за время действия лазерного импульса, что позволяет использовать для математического описания одномерное по пространству приближение (рис. 1).

Теоретическое описание динамики фазовых превращений первого рода в общем случае является весьма сложной задачей и сводится к одному из вариантов задачи Стефана [4]. Классический вариант задачи Стефана, сформулированный для фазовых переходов типа плавление–кристаллизация, сводится к нелинейному уравнению теплопроводности в области с заранее неизвестной границей Γ_{sl} , разделяющей твердую и жидкую фазы и имеющей температуру T_{sl} , равную температуре плавления T_m . Описание процесса поверхностного испарения с числом Маха $M = 1$ в потоке испаренного вещества осуществляется с помощью однофазного варианта задачи Стефана [5], в котором температура испаряющейся поверхности T_{sur} слабо (логарифмически) зависит от скорости перемещения v_{lv} по конденсированной фазе фронта Γ_{lv} .

Математическое моделирование процессов формирования и распространения фотоакустического сигнала осуществляется в рамках совмещенного варианта гидродинамической задачи Стефана [6], включающего оба (классический и однофазный) варианта. Основу совмещенного варианта составляет полная система уравнений гидродинамики, дополненная уравнением переноса лазерного излучения. Полная система уравнений гидродинамики состоит из уравнения неразрывности, движения и полной энергии, учитывающей конвективный, кондуктивный и излучательный механизмы переноса. В строго дивергентной форме система уравнений имеет вид

$$\left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0 \right]_k, \quad (1)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2) = -\frac{\partial p}{\partial x} \right]_k, \quad (2)$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(H + \frac{u^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho u \left(H + \frac{u^2}{2} \right) \right] = -\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) - \frac{\partial W}{\partial x} - \frac{\partial G}{\partial x} \right\}_k, \quad (3)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial x} + \alpha G = 0 \right)_k, \quad (4)$$

$$x \in [x_0, \Gamma_{sl}] \cup [\Gamma_{sl}, \Gamma_{lv}], \quad k = \begin{cases} s, & x \in [x_0, \Gamma_{sl}], \\ l, & x \in [\Gamma_{sl}, \Gamma_{lv}]. \end{cases}$$

Здесь индексы *sl*, *s*, *l*, *v* означают принадлежность величин соответственно к поверхности, твердой, жидкой и парообразной средам; ρ , u , H , W , T , p — плотность, газодинамическая скорость, энтальпия, тепловой поток, температура и давление вещества соответственно; α и G — коэффициент поглощения и интенсивность лазерного излучения, $\lambda(T)$ и $c_p(T)$ — коэффициенты теплопроводности и теплоемкости.

Уравнение (4) соответствует поглощению по закону Бугера. В общем случае величина G вычисляется с использованием уравнений Максвелла.

2.1. Формулировка краевых условий

Граничные условия. Левая граница $x = x_0$ полагалась закрепленной и теплоизолированной:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad u = 0. \quad (5)$$

На фронте плавления $x = \Gamma_{sl}(t)$ выписываются три закона сохранения, дополненные условием непрерывности температуры фазового перехода:

1. закон сохранения массы

$$\rho_s v_{sl} = \rho_l (u_s - u_l + v_{sl}); \quad (6)$$

2. закон сохранения импульса

$$\rho_s v_{sl}^2 + p_s = \rho_l (u_s - u_l + v_{sl})^2 + p_l; \quad (7)$$

3. закон сохранения энергии (дифференциальное условие Стефана)

$$\lambda_1 \frac{\partial T_l}{\partial x} - \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = L_m^{ne} \rho_s v_{sl}, \quad (8)$$

где

$$L_m^{ne} = L_m + (c_{pl} - c_{ps}) T_m + \frac{\rho_s + \rho_l (u_s - u_l)^2}{\rho_s - \rho_l} \frac{1}{2};$$

4. феноменологическое условие для температуры

$$T_s = T_l = T_{sl} = T_m. \quad (9)$$

На правой облучаемой границе $x = \Gamma_{lv}(t)$ выписываются три закона сохранения, дополненные граничным условием для уравнения переноса лазерного излучения и двумя соотношениями на кнудсеновском слое, характеризующими степень неравновесности процесса испарения:

1. закон сохранения массы

$$\rho_l v_{lv} = \rho_v (v_{lv} + u_l - u_v); \quad (10)$$

2. закон сохранения импульса

$$p_l + \rho_l v_{lv}^2 = p_v + \rho_v (v_{lv} + u_l - u_v)^2; \quad (11)$$

3. закон сохранения энергии (дифференциальное условие Стефана), в котором пренебрегается тепловым потоком W_v в среде пара ввиду его незначительной роли,

$$W_1^T = \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} = \rho_1 v_{lv} L_v^{nc}, \quad (12)$$

$$L_v^{nc} = L_v(T_1) + c_{pv}(T_1 - T_v) + \frac{\rho_1 + \rho_v}{\rho_1 - \rho_v} \frac{(u_1 - u_v)^2}{2},$$

$$G_{lv} = A(T_{sur}) G_0 \exp \left[-4 \left(\frac{t}{t_0} \right)^2 \right]. \quad (13)$$

Величины T_v , ρ_v , p_v определяются из соотношений на неравновесном кнудсеновском слое по модели Крута [7, 8]:

$$T_v = T_1 \alpha_T(M), \quad \rho_v = \rho_{sat} \alpha_\rho(M), \quad p_v = R \rho_v T_1, \quad (14)$$

где $M = u_v/c_s$ — число Маха, $c_s = \sqrt{\gamma R T_v}$ — скорость звука на внешней стороне кнудсеновского слоя, $\alpha_T(M)$, $\alpha_\rho(M)$ — кинетические коэффициенты, которые при $M = 1$ принимают значения $\alpha_T(M) = 0.633$, $\alpha_\rho(M) = 0.326$.

Давление насыщенного пара вычислялось из уравнения Клапейрона–Клаузиуса

$$p_{sat} = R \rho_{sat} T_1, \quad p_{sat} = p_b \exp \left(\frac{L_v}{R T_b} \left(1 - \frac{T_b}{T_1} \right) \right), \quad (15)$$

где p_b , T_b — соответственно давление и равновесная температура кипения при нормальных условиях.

Начальные условия. $t = t_0$: $T_s = T_0$, $u_s = 0$, $\rho_s = \rho_{0,s}$.

2.2. Оптические и теплофизические характеристики мишени

Поглощательная способность плавящейся поверхности A_{sur} и выделяющаяся при этом плотность излучения определялась из решения задачи об отражательной способности двухслойной системы [9]:

$$A_{sur} = 1 - R_{sur}, \quad (16)$$

где

$$R_{sur} = \left(\delta_1 + \frac{ar \exp(-\alpha_1 \Delta x_1)}{r^2 + \gamma^2} \right)^2 + \left(\frac{a\gamma \exp(-\alpha_1 \Delta x_1)}{r^2 + \gamma^2} \right)^2,$$

$$r = \delta_1 (\delta_1 - \delta_s) \exp(-\alpha_1 \Delta x_1) + (\delta_s \delta_1 - 1) \cos(\alpha_1 \Delta x_1 n_1 / k_1),$$

$$\gamma = -(\delta_s \delta_1 - 1) \sin(\alpha_1 \Delta x_1 n_1 / k_1),$$

$$a = (\delta_1 - \delta_s)(1 - \delta_1^2), \quad \delta_s = \sqrt{R_s}, \quad \delta_1 = \sqrt{R_1}.$$

Мощность объемного энерговыделения в областях $k = s, l$ задается выражением

$$G_k = k_0 \varepsilon_k'' \frac{|E_k|^2}{|E_0|^2} G_0 \exp \left[-4 \left(\frac{t}{\tau_1} \right)^2 \right], \quad (17)$$

в котором величина напряженности поля E_k нормирована на напряженность поля падающей волны E_0 и определяется из уравнений Максвелла и соответствующих граничных условий на поверхностях раздела $x = \Gamma_{lv}$ и $x = \Gamma_{sl}$; $\varepsilon_k'' = 2n_k \kappa_k$ — мнимая часть диэлектрической проницаемости, k_0 — волновое число вакуума. Коэффициент объемного поглощения α_k известным образом (см. [10]) выражается через мнимую часть κ_k комплексного показателя преломления $n_k + i\kappa_k$ и длину волны λ_v :

$$\alpha_k = 4\pi \kappa_k / \lambda_v. \quad (18)$$

На рис. 2 и 3 представлены температурные зависимости используемых теплофизических и оптических характеристик алюминия и кремния в конденсированном состоянии.

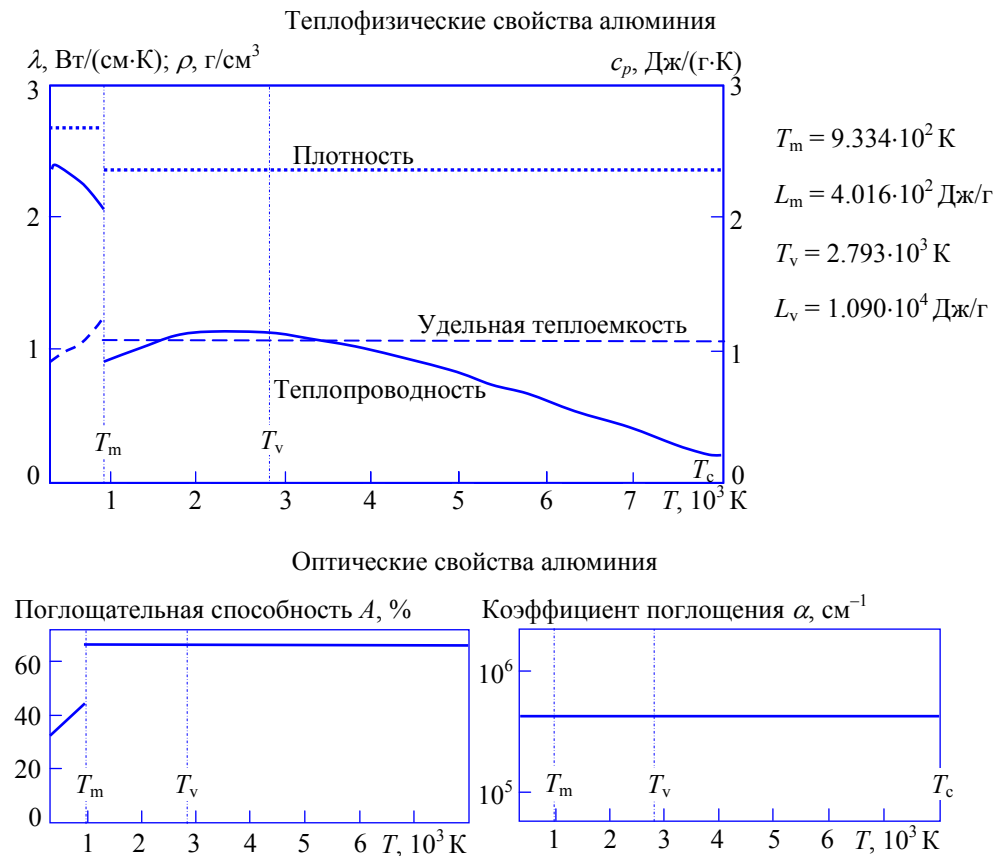


Рис. 2. Теплофизические и оптические характеристики алюминия

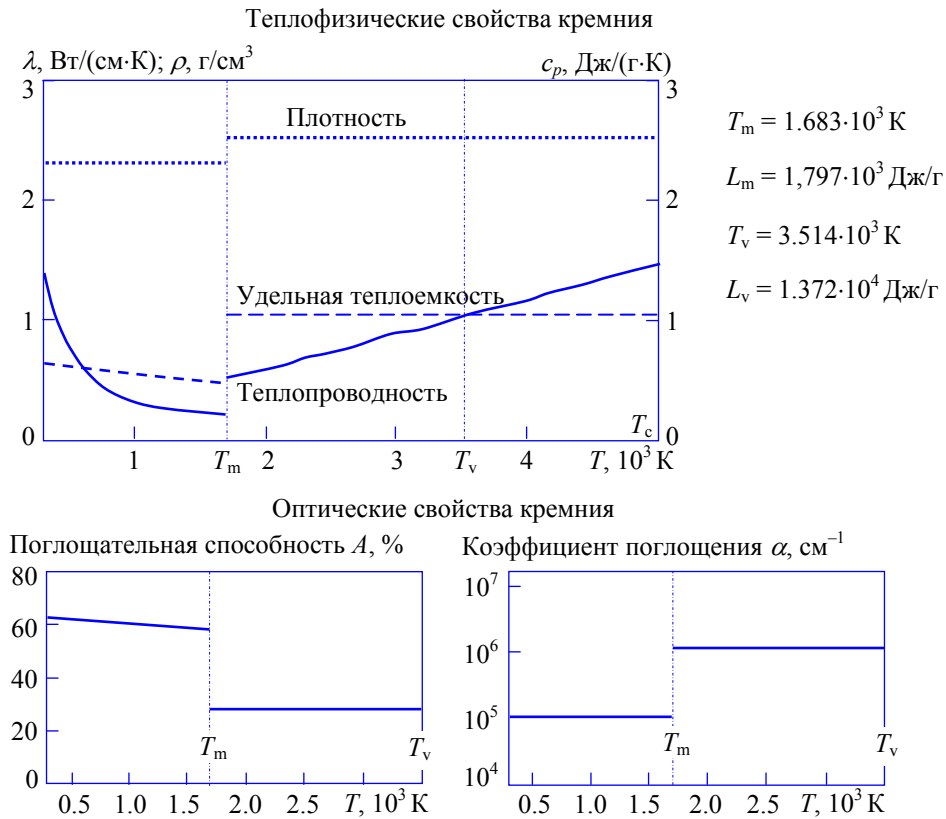


Рис. 3. Теплофизические и оптические характеристики кремния

2.3. Уравнения состояния

Система (1)–(3) дополняется необходимыми уравнениями состояния, которые формулируются в виде [11]

$$H_s = C_{ps}(T_s - T_m), \quad p_s = u_{cs}^2 \rho_{0s} \left[\left(\frac{\rho_s}{\rho_{0s}} - 1 \right) + \beta_s (T_s - T_0) \right], \quad x \in [x_0, \Gamma_{sl}], \quad (19)$$

$$H_l = C_{pl}(T_l - T_m) + L_m, \quad p_l = u_{cl}^2 \rho_{0l} \left[\left(\frac{\rho_l}{\rho_{0l}} - 1 \right) + \beta_l (T_l - T_m) \right], \quad x \in [\Gamma_{sl}, \Gamma_{sur}].$$

3. Метод и алгоритм решения

В вычислительном отношении основная сложность решения задач типа Стефана заключается в наличии нескольких (в данном случае двух) подвижных границ, положение которых не известно и должно определяться в ходе расчетов, при том, что размеры твердой и жидкой подобластей в течение расчетов могут меняться на несколько порядков. Для решения задач Стефана широко применяется так называемый энтальпийный метод [12–14], в котором движущаяся поверхность разрыва в решении явно не учитывается, а заменяет-

ся процедурой сглаживания. Однако введение процедуры сглаживания, полностью исключаяющей из рассмотрения границу раздела фаз и связанные с ней физические явления, такие как кинетика фазовых переходов, накладывают естественные ограничения на область применимости данного подхода. В проблемах импульсного воздействия мощных лазерных потоков на материалы, в том числе при анализе оптоакустических сигналов, где неравновесность быстрых фазовых превращений может играть определяющую роль, появляется необходимость явного выделения межфазных границ и учета связанных с ними процессов.

Численное решение задачи (1)–(20) осуществляется с помощью метода динамической адаптации [15, 16], позволяющий производить расчет с явным выделением межфазных границ.

3.1. Метод динамической адаптации

В основу метода динамической адаптации положена идея перехода к произвольной нестационарной системе координат, осуществляемого с помощью искомого решения. В произвольной нестационарной системе координат проблема описывается расширенной дифференциальной системой уравнений, часть из которых характеризует физическое явление, а остальные — динамику узлов расчетной сетки. Проблемы, связанные с подвижными границами, снимаются посредством перехода к произвольной нестационарной системе координат, в которой узлы сетки и границы оказываются неподвижными. Преобразование координат осуществляется автоматически с помощью искомого решения, что позволяет производить размещение узлов сетки в зависимости от особенностей решения. В нестационарных задачах таковыми могут быть формирование и распространение зон больших градиентов, возникновение разрывных решений — ударных волн, контактных и фазовых границ. В первом случае с помощью соответствующей функции преобразования Q , зависящей от искомого решения, производится концентрация узлов сетки в области больших градиентов. Во втором случае появление разрывного решения внутри области рассматривается как появление новой границы, которая делит исходную область на две подобласти. В конечном итоге появление новой границы сводится к рассмотрению двух краевых задач, связанных общей подвижной границей, на которой выполняются соответствующие законы сохранения. Проблемы, связанные с подвижными границами, снимаются посредством перехода к произвольной нестационарной системе координат, в которой узлы сетки и границы оказываются неподвижными. Переход из физического пространства с переменными (x, t) в расчетное с произвольной нестационарной системой координат (q, τ) осуществляется с помощью замены переменных общего вида $x = f(q, \tau)$, $t = \tau$, имеющей обратное невырожденное преобразование $q = \varphi(x, t)$, $\tau = t$.

Частные производные зависимых переменных выражаются при этом следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial q}{\partial t} \frac{\partial}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial x}{\partial \tau} \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{Q}{\psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad (20)$$

где $\psi = \partial x / \partial q$ — метрический коэффициент, $\partial x / \partial \tau$ — скорость движения новой системы координат, подлежащая в дальнейшем определению, относительно исходной. Связав движение системы координат, определяемое некоторой функцией Q , с особенностями искомого решения, получим уравнение обратного преобразования, используемое в дальнейшем для определения координат узлов расчетной сетки:

$$\frac{\partial x}{\partial \tau} = -Q. \quad (21)$$

Величины ψ и Q связаны соотношением

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \frac{\partial Q}{\partial q} = 0, \quad (22)$$

которое получается дифференцированием уравнения (21) по пространственной переменной q .

Таким образом, при переходе к произвольной нестационарной системе координат исходная дифференциальная модель трансформируется в расширенную дифференциальную систему, в которой появляется дополнительное уравнение типа (21) или (22), являющееся уравнением обратного преобразования. Его тип, свойства и вид краевых условий зависят от конкретного вида функции Q . Для построения равномерных (квазиравномерных) на каждый момент времени сеток в областях с подвижными границами функция Q задается в виде [15, 16]

$$\left(Q = -D \frac{\partial \psi}{\partial q} \right)_k, \quad k = s, 1,$$

где коэффициент диффузии D выражается через геометрические и скоростные параметры задачи: $D = L^2(t)(|v_{s1}| + |v_{1s}|) / \Delta x$.

Применяя преобразование переменных общего вида, запишем дифференциальную задачу (1)–(19) в переменных произвольной нестационарной системы координат (q, τ) в строго дивергентной форме:

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\frac{\partial Q}{\partial q} \right)_k, \quad k = s, 1, \quad (23)$$

$$\left\{ \frac{\partial(\psi\rho)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial q} [\rho(u+Q)] = 0 \right\}_k,$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \left[\psi\rho \left(H + \frac{u^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial q} \left[\rho(u+Q) \left(H + \frac{u^2}{2} \right) \right] = -\frac{\partial}{\partial q} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial q} \left[\frac{\lambda(T)}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q} \right] \right\}_k, \quad (24)$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} (\psi\rho u) + \frac{\partial}{\partial q} [\rho u(u+Q)] = -\frac{\partial p}{\partial q} \right\}_k, \quad \left(\frac{\partial G}{\partial q} + \psi\alpha G \right)_k = 0,$$

$$q \in [0, q_{sl}] \cup [q_{sl}, q_s], \quad \tau \in [\tau_0, \tau_{\text{end}}], \quad k = s, 1.$$

3.2. Краевые условия

Расширенная дифференциальная модель требует дополнительных граничных и начальных условий.

Граничные условия. При формулировке краевых условий для уравнения обратного преобразования необходимо учитывать общие для всех видов Q положения, которые состоят в следующем. Если среди граничных условий встречается условие $Q = 0$, то оно означает, что данная граница является неподвижной. Любое другое, отличное от нуля, соотношение будет характеризовать скорость движения границы области. Остальные граничные условия записываются с учетом появления функции Q .

- $q = q_0$ — невозмущенная граница в твердом теле:

$$u = W = 0, \quad Q = 0. \quad (25)$$

- $q = \Gamma_{sl}$ — граница раздела твердое тело–жидкость:

1. закон сохранения массы

$$\rho_s (Q_{sl} + u_s) = \rho_l (Q_{sl} + u_l); \quad (26)$$

2. закон сохранения импульса

$$P_s + \rho_s (Q_{sl} + u_s)^2 = p_l + \rho_l (Q_{sl} + u_l)^2; \quad (27)$$

3. закон сохранения энергии

$$W_l - W_s = \rho_s v_{sl} L_m^{\text{ne}}, \quad (28)$$

где $v_{sl} = -(Q_{sl} + u_s)$.

- $q = \Gamma_{lv}$ — граница жидкость–пар:

1. закон сохранения массы

$$\rho_l (Q_{lv} + u_l) = \rho_v (Q_{lv} + u_v); \quad (29)$$

2. закон сохранения импульса

$$P_l + \rho_l (Q_{lv} + u_l)^2 = p_v + \rho_v (Q_{lv} + u_v)^2; \quad (30)$$

3. закон сохранения энергии

$$W_l^T = -\frac{\lambda_l}{\psi_l} \frac{\partial T_l}{\partial q} = \rho_l v_{lv} L_v^{\text{ne}}, \quad v_{lv} = -(Q_{lv} + u_l). \quad (31)$$

Начальные условия. $\tau = \tau_0$: $T_s = T_0$, $u_s = 0$, $\rho_s = \rho_{0,s}$, $\psi = 1$.

3.3. Разностная схема и алгоритм решения

Численное решение дифференциальной модели (23)–(31) осуществлялось при помощи конечно-разностного метода, согласно которому уравнения гид-

родинамики аппроксимировались семейством консервативных разностных схем, полученных интегро-интерполяционным методом [17]. Для построения семейства разностных схем в расчетном пространстве вводится сетка ω_q^r с неравными шагами $h_{k,i} \Delta \tau^j$ по пространственной q и временной τ переменным:

$$\omega = \{\omega_l \cup \omega_s\} \times \{\omega_\tau\},$$

где

$$\omega_l = \left\{ \begin{array}{l} q_{l,i}, q_{l,i+1/2}; \quad q_{l,i+1} = q_{l,i} + h_{l,i+1}, \quad q_{l,i+1/2} = q_{l,i} + 0.5h_{l,i+1}, \\ i = 0, \dots, N_l - 1, \quad q_{l,0} = 0, \quad q_{N_l} = q_{sl}, \quad h_{l,0} = 0, \quad h_{l,N_l+1} = 0 \end{array} \right\},$$

$$\omega_s = \left\{ \begin{array}{l} q_{s,i}, q_{s,i+1/2}; \quad q_{s,i+1} = q_{s,i} + h_{s,i+1}, \quad q_{s,i+1/2} = q_{s,i} + 0.5h_{s,i+1}, \\ i = 0, \dots, N_s - 1, \quad q_{s,0} = q_{sl}, \quad q_{N_s} = q_s, \quad h_{s,0} = 0, \quad h_{s,N_s+1} = 0 \end{array} \right\}.$$

При разностной аппроксимации уравнений к узлам с целочисленными индексами относятся сеточные функции u , Q , x , к точкам с полуцелыми индексами ($q_{m+1/2}$, τ^j) — сеточные функции ρ , P , H , T .

Для дифференциальной системы (23), (24) семейство разностных схем имеет вид

$$\left\{ \frac{(\psi\rho)_{i+1/2}^{j+1} - (\psi\rho)_{i+1/2}^j}{\Delta\tau^{j+1}} + \frac{[\rho(u+Q)]_{i+1}^{j+1} - [\rho(u+Q)]_i^{j+1}}{h_{i+1}} = 0 \right\}_k, \quad (32)$$

$$\left\{ \frac{(\psi\rho u)_{i+1/2}^{j+1} - (\psi\rho u)_{i+1/2}^j}{\Delta\tau^{j+1}} + \frac{[\rho u(u+Q)]_{i+1}^{j+1} - [\rho u(u+Q)]_i^{j+1}}{h_{i+1}} = -\frac{p_{i+1}^{j+1} - p_i^{j+1}}{h_{i+1}} \right\}_k, \quad (33)$$

$$\left\{ \frac{[\psi\rho(\varepsilon + u^2/2)]_{i+1/2}^{j+1} - [\psi\rho(\varepsilon + u^2/2)]_{i+1/2}^j}{\Delta\tau^{j+1}} + \frac{[\rho(u+Q)(\varepsilon + u^2/2)]_{i+1}^{j+1} - [\rho(u+Q)(\varepsilon + u^2/2)]_i^{j+1}}{h_{i+1}} = \right. \quad (34)$$

$$\left. = -\frac{(pu)_{i+1}^{j+1} - (pu)_i^{j+1}}{h_{i+1}} + \frac{1}{h_{i+1}} \left(\frac{\lambda_{i+1}^{j+1}}{\psi_{i+1}^{j+1}} \frac{T_{i+3/2}^{j+1} - T_{i+1/2}^{j+1}}{0.5(h_{i+1} + h_i)} - \frac{\lambda_i^{j+1}}{\psi_i^{j+1}} \frac{T_{i+1/2}^{j+1} - T_{i-1/2}^{j+1}}{0.5(h_i + h_{i-1})} \right) \right\}_k,$$

$$\left[\frac{\psi_{i+1/2}^{j+1} - \psi_{i+1/2}^j}{\Delta\tau^{j+1}} = -\frac{Q_{i+1}^{j+1} - Q_i^{j+1}}{h_{i+1}} \right]_k, \quad \left[Q_i^{j+1} = -D_i^j \frac{\psi_{i+1/2}^{j+1} - \psi_{i-1/2}^{j+1}}{(h_i + h_{i+1})/2} \right], \quad (35)$$

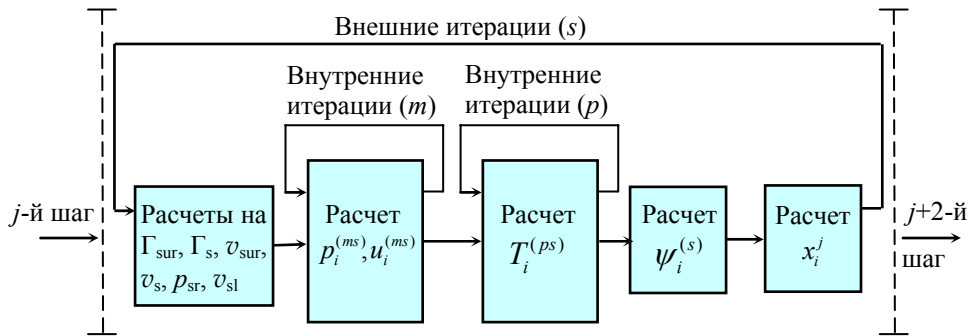


Рис. 4. Блок-схема вычислительного процесса

$$\left[\frac{x_{i+1}^{j+1} - x_i^{j+1}}{h_{i+1}} = \psi_{i+1/2}^{j+1} \right]_k, \quad (36)$$

где $i = 0, \dots, N_1 - 1$ при $k = 1$, $i = 0, \dots, N_s - 1$ при $k = s$.

Величины в полуцелых узлах для сеточных функций, отнесенных к целым точкам, вычисляются как полусумма значений в ближайших узлах. При определении величин в узлах с целочисленными индексами для функций, отнесенных к полуцелым точкам, используется линейная интерполяция

$$y_m = \frac{y_{m-1/2} \psi_{m+1/2} + y_{m+1/2} \psi_{m-1/2}}{\psi_{m+1/2} + \psi_{m-1/2}}.$$

Численная реализация разностных схем (32)–(36) осуществлялась при помощи специального алгоритма, состоящего из нескольких вложенных итерационных циклов ([11, 16]). Схематически вычислительный процесс для одного шага по времени представлен на рис. 4. Согласно этой схеме, алгоритм состоит из трех внутренних и одной внешней итерационных процедур. Вычисления при переходе с j -го на $j+1$ -й временной слой выполняется в следующей очередности. Вначале на границах Γ_{sl} и Γ_{lv} итерационным методом Ньютона решаются нелинейные уравнения (26)–(31) и по известным величинам Q_{sl} и Q_{lv} в каждой из фазовых областей выполняются внутренние итерационные циклы. В итерационном цикле с индексом m вычисляются невязки гидродинамических функций ρ_i^m , u_i^m , а из второго итерационного цикла с индексом p на каждой итерации с помощью прогонки определяются невязки функции T_i^p .

По достижении сходимости во внутренних циклах начинает выполняться внешний итерационный цикл, в котором с помощью уравнения (32) определяются значения функции ψ_i^j и по известным значениям функций ρ_i^m , u_i^m , T_i^p переопределяются значения скоростей на межфазных границах Γ_{sl} и Γ_{lv} . Значения функций считались вычисленными на временном шаге τ^{j+1} , если сошелся внешний итерационный цикл. При переходе на следующий вре-

менной слой из соотношения (36) переопределяются координаты x_i^j узлов сетки в физическом пространстве.

Разбиение вычислительного процесса на отдельные итерационные циклы существенно ускоряет сходимость итераций и позволяет в несколько раз уменьшить время счета по сравнению с вычислениями по единой итерационной схеме. Основное преимущество используемого алгоритма заключается в том, что переход к произвольной нестационарной системе координат позволяет избавиться от трудностей, связанных с подвижными границами, и производить расчеты по формулам сквозного счета.

4. Анализ результатов моделирования

В случае сильно поглощающих сред и в отсутствие в зоне прогрева фазовых превращений фотоакустический сигнал (рис. 5) примерно пропорционален производной по времени от температуры облучаемой поверхности и имеет характерную биполярную форму, у которой амплитуда положительной фазы приблизительно в 2 раза превосходит амплитуду отрицательной фазы, если лазерный импульс имеет гауссову форму [1].

Плавление существенно меняет вид фотоакустического сигнала. На рис. 6–8 показано поведение импульса давления $P(t)$, скорости фронта плавления $v_{sl}(t)$ и температуры поверхности $T_{sur}(t)$ алюминиевой мишени, облучаемой лазерным импульсом с $\tau_l = 20$ нс и пиковыми интенсивностями 25 (рис. 6), 50 (рис. 7) и 100 МВт/см² (рис. 8) при постоянной поглощательной способности $A = 1$. Положение импульса давления на оси времени соответствует нулевой длительности звуковой задержки, т.е. отнесено к положению облучаемой поверхности.

Резкое возрастание давления на рис. 6а и 7а соответствует моменту начала плавления и связано, в основном, с изменением плотности, которая у алюминия уменьшается при плавлении. Такой вывод основан на удовлетворительном согласовании величины этого скачка с максимальным значением скорости фронта плавления по элементарной оценке $P = \Delta\rho v_{sl}^2$ [1]. На поведение фотоакустического сигнала заметное влияние оказывает также изменение эн-

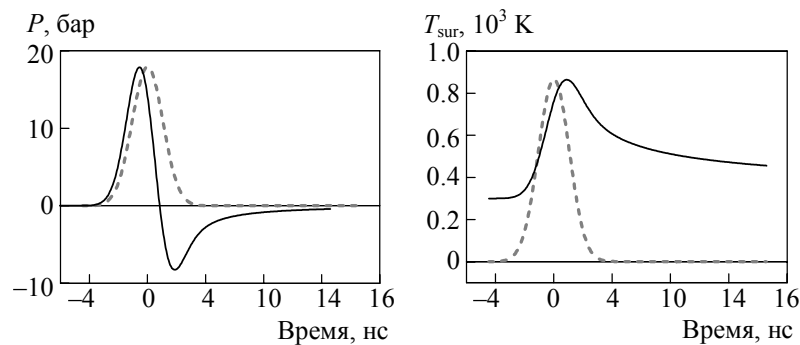


Рис. 5. Временные зависимости давления $P(t)$ и температуры $T_{sur}(t)$ (сплошные линии), а также поглощенная интенсивность в относительных единицах (штриховая линия) в алюминии при $G_0 = 30$ МВт/см² и $\tau_l = 3 \cdot 10^{-9}$ с

тальпии и других теплофизических параметров при фазовом переходе твердое тело–жидкость.

Увеличение пикового значения поглощаемой интенсивности от 50 до 100 МВт/см² сопровождается почти 30-кратным ростом давления (рис. 8а), величина которого обусловлена теперь испарительным процессом. Дальнейшее увеличение интенсивности может приводить к образованию плазмы в потоке испаренного вещества, которое в данной работе не рассматривается.

Предположение о постоянной поглощательной способности $A = 1$ можно считать удовлетворительным для достаточно коротковолнового излучения. В инфракрасной и видимой областях спектра отличием величины A от единицы уже нельзя пренебрегать, поскольку ее изменение в процессе воздействия лазерного импульса существенно влияет на форму и величину фотоакустического сигнала.

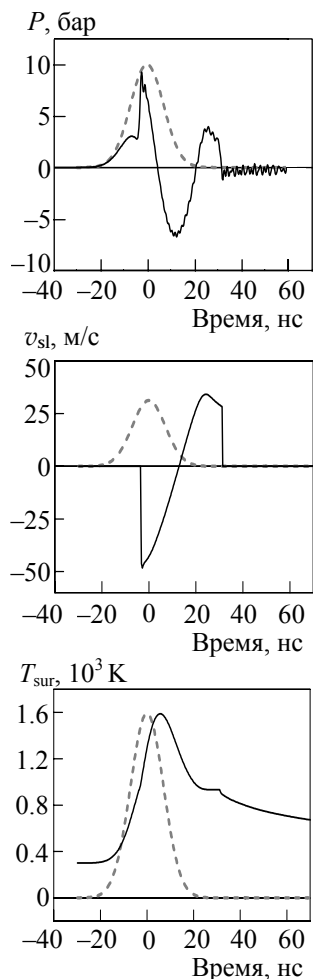


Рис. 6

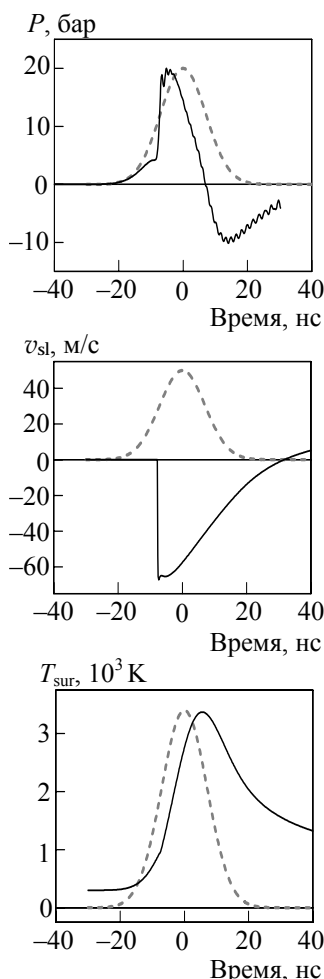


Рис. 7

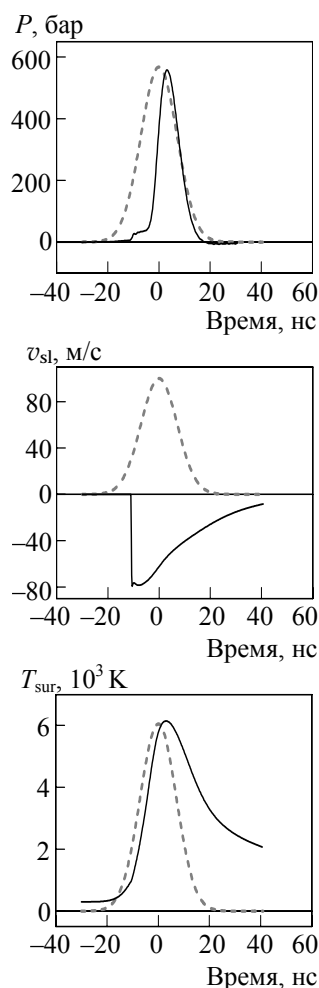


Рис. 8

11а показывает, что увеличение A при плавлении приводит к увеличению скачка давления, обусловленного плавлением, и к сокращению его длительности, которая оказывается примерно на порядок меньше длительности лазерного импульса. Аналогичные изменения претерпевает и зависимость скорости фронта плавления от времени. Такие изменения в поведении фотоакустического сигнала $P(t)$ и скорости фронта плавления $v_{sl}(t)$ связаны фактически с эффективным укрупнением переднего фронта поглощаемого лазерного импульса, которое происходит при быстром возрастании A .

Очевидно, что относительное увеличение и укорочение фотоакустического сигнала $P(t)$ вместе с сокращением длительности процессов плавления и затвердевания будет иметь место также при переходе к более коротким лазерным импульсам. При $\tau_1 = 3$ нс поведение давления, скорости фронта плавления–затвердевания и температуры облучаемой поверхности алюминия показано на рис. 12–17 в диапазоне интенсивности 110–500 МВт/см².

По мере увеличения интенсивности максимальное значение скорости фронта и длительность фазы плавления также растут. Однако максимальное значение скорости фронта затвердевания при этом уменьшается, а длительность фазы затвердевания увеличивается быстрее, чем интенсивность лазерного импульса. Увеличение положительной фазы фотоакустического сигнала, связанное с сокращением длительности лазерного импульса, приводит к тому, что этот сигнал остается заметным и при сравнительно больших значениях испарительного давления (рис. 12а–14а). Необходимо отметить при этом, что

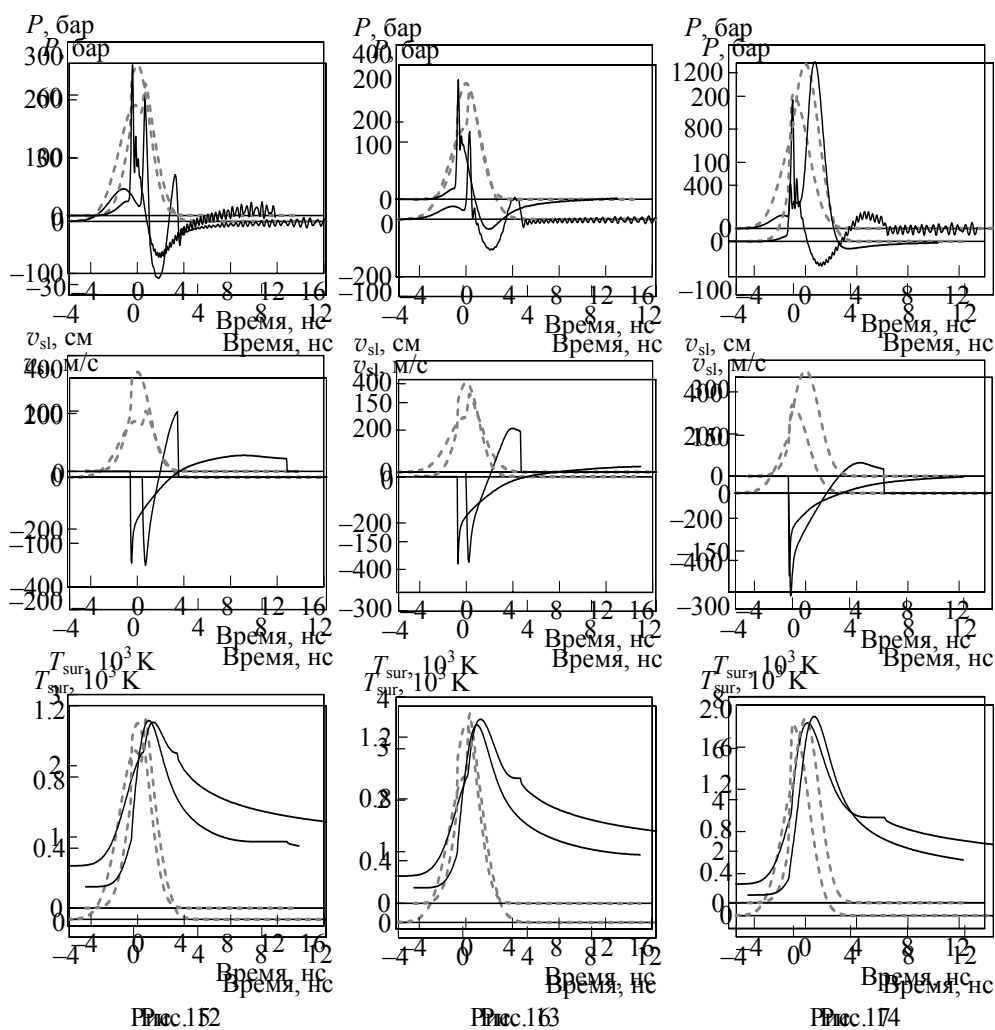


Рис. 15. Временные зависимости давления $P(t)$, скорости плавления $v_{sl}(t)$, температуры $T_{sur}(t)$ (сплошные линии) и поглощенная интенсивность в относительных единицах (штриховые линии) в алюминии при $G_0 = 200$ МВт/см², $A = A(T_{sur})$ и $\tau_1 = 3 \cdot 10^{-9}$ с

Рис. 16. То же, что на рис. 15, при $G_0 = 250$ МВт/см²

Рис. 17. То же, что на рис. 15, при $G_0 = 500$ МВт/см²

экспериментальное наблюдение субнаносекундной структуры импульсов давления может оказаться весьма непростой задачей. Напомним также, что при определенных условиях достаточно резкое уменьшение давления в облучаемом веществе оказывается стимулирующим фактором для начала распада перегретой метастабильной фазы [1].

Как уже отмечалось выше, дополнительный по сравнению с однофазным случаем скачок давления на фотоакустическом сигнале в алюминии обусловлен уменьшением его плотности и отражательной способности при плавлении

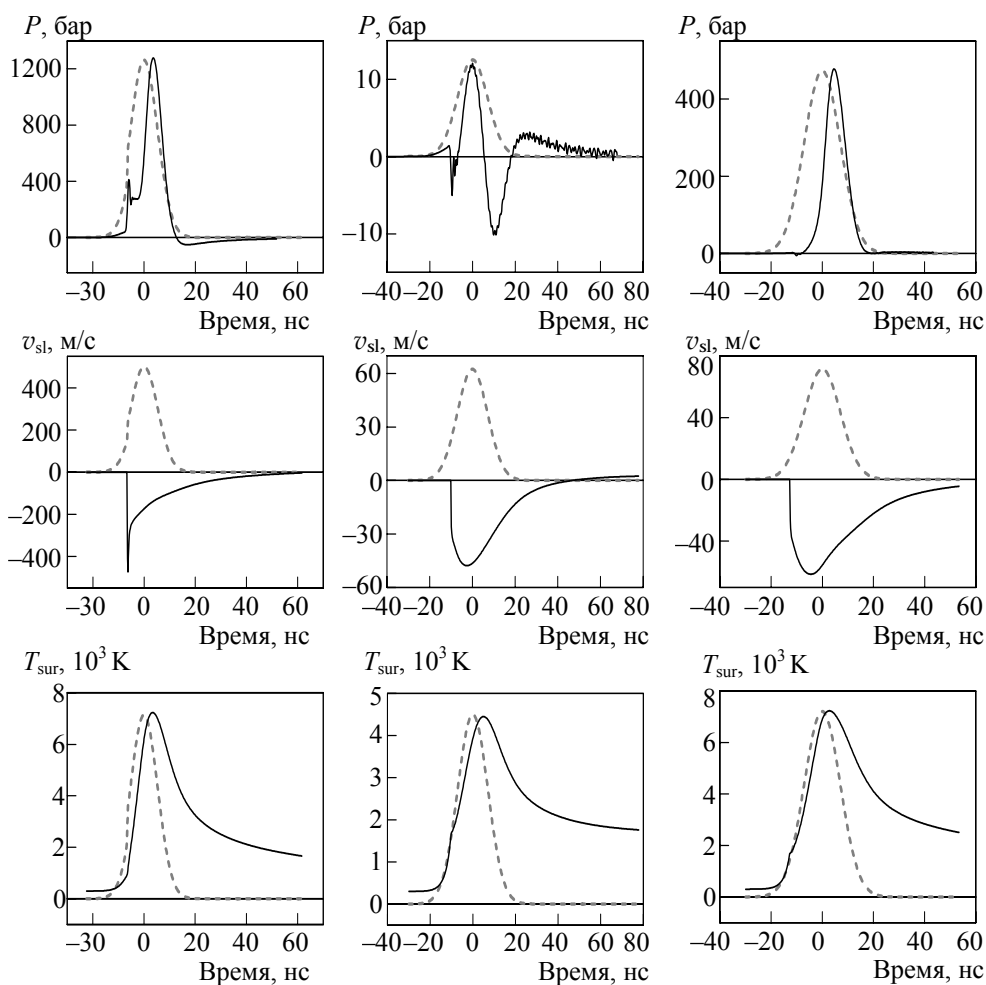


Рис. 18

Рис. 19

Рис. 20

Рис. 18. Временные зависимости давления $P(t)$, скорости плавления $v_{sl}(t)$, температуры $T_{sur}(t)$ (сплошные линии) и поглощенная интенсивность в относительных единицах (штриховые линии) в алюминии при $G_0 = 25$ МВт/см², $A = 100\%$ и $\tau_1 = 2 \cdot 10^{-8}$ с

Рис. 19. То же, что на рис. 18, при $G_0 = 50$ МВт/см²

Рис. 20. То же, что на рис. 18, при $G_0 = 100$ МВт/см²

нии. Вклад противоположного знака в этот эффект вносит скачок энтальпии при фазовом переходе, т.е. поглощение энергии на фронте плавления. В ту же сторону будет действовать увеличение отражательной способности и плотности облучаемого вещества при плавлении, которое имеет место, например, для кремния. В этом случае вместо положительного скачка давления на фоне фотоакустического сигнала должен наблюдаться сравнительно узкий провал.

Поведение $P_{ph}(t)$, $v_{sl}(t)$ и $T_{sur}(t)$ для кремния при воздействии лазерного импульса с $\tau_l = 20$ нс в диапазоне интенсивностей $G_0 = 25\text{--}100$ МВт/см² и в предположении постоянной поглощательной способности $A = 1$ показано на рис. 18–20. Провал у фотоакустического сигнала оказывается наиболее заметным при небольших превышениях интенсивности над порогом плавления (рис. 18а и 19а), а при $G_0 = 100$ МВт/см² (рис. 20а) влияние плавления, в отличие от случая алюминия, уже практически неразличимо на фоне испарительного давления (ср. рис. 8а и 10а).

5. Заключение

Результаты численного моделирования фотоакустического сигнала при наличии фазовых переходов первого рода в облучаемой мишени показывают, в частности, что по дополнительному импульсу давления, связанному с плавлением, можно определять скорость фронта плавления. Ширина этого дополнительного импульса оказывается весьма малой по сравнению с длительностью лазерного импульса. По этой причине для экспериментальной регистрации подобных особенностей фотоакустического сигнала требуется достаточно однородное (постоянное) распределение интенсивности по пятну облучения.

Приведенные результаты не претендуют на исчерпывающее описание процесса плавления, поскольку при их получении не учитывались, например, особенности динамики фронта плавления, связанные с возможным начальным перегревом твердой фазы и другими динамическими и неравновесными эффектами на фронте перехода (об этих эффектах см., например, [18–20] и цитированную там литературу). Учет этих эффектов, в принципе, может быть выполнен в рамках изложенного подхода. Однако подобный детальный анализ более целесообразно проводить в непосредственной связи с соответствующими экспериментальными данными, которые пока еще не получены. Мы надеемся, что результаты данной работы будут способствовать проведению таких экспериментов.

Работа поддержана грантом РФФИ № 04-02-16452-а.

ABSTRACT

The results of mathematic modeling of photoacoustic signals in laser-irradiated samples are presented for the cases when melting and vaporization occur. It is shown, in particular, that the fast melting processes induced by nanosecond laser pulses give rise to rather narrow pressure peak or dip in photoacoustic pressure signals, which are due to the density change at the moving melting front. Amplitudes

of these peak or dips depend on melting front velocity, as well as on magnitude of the density change. For experimental detection of this effect with piezoelectric transducer, it is necessary to have nearly constant laser intensity distribution across the irradiation spot.

ЛИТЕРАТУРА

1. Действие лазерного излучения на поглощающие конденсированные среды / Под ред. В.Б. Федорова. М.: Наука, 1988. 119 с. (Труды ИОФАН; Т. 13.).
2. Гусев В.Э., Карабутов А.А. Лазерная оптоакустика. М.: Наука, 1991. 304 с.
3. Paltauf G., Dyer P.E. Photomechanical processes and effects in ablation // Chem. Rev. 2003. Vol. 103. P. 487–517.
4. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964. 448 с.
5. Masters J.I. Problem of intense surface heating of a slab accompanied by change of phase. // J. Appl. Phys. 1956. Vol. 27. P. 477–484.
6. Mazhukin V.I., Samarskii A.A. Mathematical modeling in the technology of laser treatments of materials // Surveys on Mathematics for Industry. 1994. Vol. 4, N 2. P. 85–149.
7. Crout D. An application of kinetic theory to the problems of evaporation and sublimation of monatomic gases // J. Math. Phys. 1936. Vol. 15. P. 1–54.
8. Mazhukin V.I., Prudkovskii P.A., Samokhin A.A. About gas-dynamical boundary conditions on evaporation front // Mathematical Modeling. 1993. Vol. 5, N 3. P. 3–10.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 623 с.
10. Александров А.Ф., Богданкевич Л.С., Рухадзе А.А. Основы электродинамики плазмы. М.: Высшая школа, 1978. 407 с.
11. Носов В.В., Мажукин В.И. Влияние процессов плавления и кристаллизации на форму оптоакустического сигнала при лазерном воздействии на сильно поглощающие конденсированные среды // Математическое моделирование. 1994. Т. 6, № 1. С. 3–53.
12. Самарский А.А., Моисеенко Б.Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // ЖВМ и МФ. 1965. Т. 5, № 5. С. 816–827.
13. Будаков Б.М., Соловьева Е.Н., Успенский А.Б. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задачи Стефана // ЖВМ и МФ. 1965. Т. 5, № 5. С. 828–840.
14. Meyer G.H. The numerical solution of Stefan problems with front-tracking and smoothing methods // Appl. Math. Comput. 1978. Vol. 4. P. 283–306.
15. Бреславский П.В., Мажукин В.И. Математическое моделирование процессов импульсного плавления и испарения металла с явным выделением фазовых границ // Инж.-физ. журн. 1989. Т. 57, № 1. С. 107–114.
16. Бреславский П.В., Мажукин В.И. Алгоритм численного решения гидродинамического варианта задачи Стефана при помощи адаптирующихся сеток // Математическое моделирование. 1991. Т. 3, № 10. С. 104–115.
17. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989. 616 с.
18. Бреславский П.В., Мажукин В.И., Самохин А.А. О гидродинамическом варианте задачи Стефана для вещества в метастабильном состоянии // ДАН СССР. 1991. Т. 320, № 3. С. 1078–1092.
19. Charach Ch., Rubinstein I. Pressure-temperature effects in planar problems with density change // J. Appl. Phys. 1992. Vol. 73, N 3. P. 1128–1137.
20. Vetsigian K., Goldenfeld N. Computationally efficient phase-field model with interface kinetics // Phys. Rev. E. 2003. Vol. 68. 060601(4).