

České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská  
Katedra fyzikální elektroniky

# Hydrodynamické simulace ablace a expanze plazmatu při pulzní laserové depozici

Bakalářská práce

Autor práce: **Jan Nikl**  
Vedoucí práce: **Ing. Milan Kuchařík, PhD.**  
Konzultant: **Ing. Michal Novotný, PhD., FZÚ AV ČR**  
Školní rok: **2014/2015**

Před svázáním místo této stránky **vložíte zadání práce** s podpisem děkana (v jedné kopii práce bude list s originálem podpisu).

Toto bude jediný oboustranný list ve Vaší práci!

## **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem předloženou práci vypracoval samostatně a že jsem uvedl veškerou použitou literaturu.

V Praze dne 01.07. 2015

Jan Nikl

## **Poděkování**

Děkuji svému školiteli Ing. Milanu Kuchaříkovi, PhD. za četné konzultace, ochotu, vstřícnost a odborné i praktické rady při vedení mé bakalářské práce. Dále bych chtěl poděkovat svému konzultantovi Ing. Michalu Novotnému, PhD. za dlouhodobě vstřícný přístup a mnohý věnovaný čas.

Jan Nikl

*Název práce:*

## **Hydrodynamické simulace ablace a expanze plazmatu při pulzní laserové depozici**

*Autor:* Jan Nikl

*Obor:* Informatická fyzika

*Druh práce:* Bakalářská práce

*Vedoucí práce:* Ing. Milan Kuchařík, PhD.

*Konzultant:* Ing. Michal Novotný, PhD., FZÚ AV ČR

*Abstrakt:*

V této práci se studují numerické metody pro simulaci průběhu metody PLD. Je zvolen langrangeovský hydrodynamický popis a použito kompatibilní numerické schéma se střídavou prostorovou výpočetní sítí a konečnými diferencemi. Simulace probíhají se stavovou rovnicí ideálního plynu nebo QEOS. Vedení tepla je řešeno implicitním schématem s omezením tepelného toku a absorpce laserového záření metodou absorpce na kritické hustotě nebo kódem založeným na řešení stacionárních Maxwellových rovnic. Byly identifikovány některé problémy při nízkých intenzitách laseru, navržena vylepšení modelu držení fáze, vytvořen empirický model změny fáze a metoda reinicializace simulace. Všechny modely byly implementovány v nově vyvinutém 1D simulačním kódu. Byla provedena sada simulací fyzikálních úloh a dosažena dobrá shoda s publikovanými výsledky.

*Klíčová slova:* langrangeovská hydrodynamika, laserové plazma, numerické metody, PLD

*Title:*

## **Hydrodynamic simulations of plasma ablation and expansion for pulsed laser deposition**

*Author:* Jan Nikl

*Abstract:*

Numerical methods for simulation of the PLD process are studied in this thesis. Lagrangian hydrodynamic description is chosen and a compatible numerical scheme based on finite differences and a staggered spatial computational grid is used. Simulations run with the equation of state of ideal gas or QEOS. Heat conduction is solved by an implicit scheme with flux limiting and absorption of laser irradiation is solved by the method of absorption on critical density or by a code based on solving of the stationary Maxwell equations. Some problems in case of low laser intensity were identified, improvements of a model for phase holding were proposed, an empirical model of phase transition and a method of simulation reinitialisation were created. All models were implemented in a newly developed 1D simulation code. A set of simulations of physical problems was carried out and a good agreement with published results was achieved.

*Key words:* Lagrangian hydrodynamic, laser plasma, numerical methods, PLD

# Obsah

Úvod	8
<b>1 Modelování pulzní laserové depozice</b>	<b>9</b>
1.1 Ablace terče	10
1.2 Vznik plazmatu a interakce s laserovým zářením	11
1.3 Expanze plazmatu do vakua	12
<b>2 Řešení rovnic hydrodynamiky</b>	<b>13</b>
2.1 Lagrangeovské souřadnice	13
2.2 Eulerovy rovnice	13
2.3 Stavová rovnice	15
2.4 Numerické schéma	16
2.4.1 Prostorová diskretizace	16
2.4.2 Časová diskretizace	17
2.4.3 Umělá viskozita	18
2.4.4 Určení časového kroku	18
2.5 Testy hydrodynamického kroku	19
2.5.1 Sodův problém	19
2.5.2 Nohův problém	20
2.5.3 Sedovova exploze	22
<b>3 Základní fyzikální modely</b>	<b>26</b>
3.1 Absorpce laserového záření	26
3.1.1 Parametry laserového pulzu	26
3.1.2 Model absorpce	28
3.2 Vedení tepla	29
3.2.1 Numerické schéma	30
3.2.2 Omezení toku tepla	32
3.2.3 Testovací úloha	32
<b>4 Rozšíření fyzikálních modelů</b>	<b>35</b>
4.1 Držení pevné a kapalně fáze	35
4.1.1 Omezení rychlosti	36
4.1.2 Omezení přírůstku rychlosti	36
4.1.3 Omezení sil	37
4.1.4 Vylepšený koeficient držení	37
4.2 Cylindrická a sférická geometrie	38
4.3 Model fázového přechodu	39
4.3.1 Numerické schéma	39
4.3.2 Aplikace	41
4.4 Reinicializace simulace	43

<b>5 Simulace laserové ablace a expanze plazmatu</b>	<b>45</b>
5.1 Expanze do vakua . . . . .	45
5.2 Jednoduchá ablace – porovnání s PALE . . . . .	46
5.3 Experiment: Wu, Shin (2007) . . . . .	49
5.4 Experiment: Mazhukin, Nosov (2005) . . . . .	51
5.5 Experiment: Bogaerts et al. (2003) . . . . .	52
<b>Závěr</b>	<b>56</b>
<b>Literatura</b>	<b>57</b>

# Úvod

Tato práce se zabývá počítačovou simulací *pulzní laserové depozice* (PLD), která se hojně využívá k přípravě *tenkých vrstev*. Termínem tenké vrstvy v tomto kontextu míníme vrstvy určitého materiálu o tloušťce v řádu nanometrů až mikrometrů, které jsou obvykle naneseny na vhodném substrátu. Vlastnosti materiálu jako celku jsou pak ovlivněny nejenom samotným substrátem, ale i tenkou vrstvou na povrchu. Ta díky své mikroskopické struktuře ve spojení s vlastnostmi substrátu může materiálu propůjčovat jedinečné vlastnosti ať už elektrické, mechanické, optické, chemické nebo mnohé další. Z tohoto důvodu se tenké vrstvy dnes využívají v mnohých odvětvích průmyslu (optika, strojírenství, elektronika, medicína atd.) a jsou předmětem intenzivního vědeckého bádání. Mezi v současnosti nejvíce zkoumanou oblast patří také například vývoj inovativních solárních článků.

Pro návrh a realizaci přípravy nových tenkých vrstev je však žádoucí znát průběh depozice, aby bylo možné optimalizovat parametry depozice pro dosažení kýžených výsledků. Vzhledem k tomu, že jsou ale procesy v průběhu depozice metodou PLD velmi rychlé, je prakticky nemožné (nebo velmi komplikované) detailně měřit všechny klíčové veličiny a natožpak predikovat výsledek experimentální depozice. Z těchto důvodů je vhodné použití numerických simulací, které dokážou kompletně simulovat průběh depozice a umožňují tak snadnou predikci a optimalizaci výsledků.

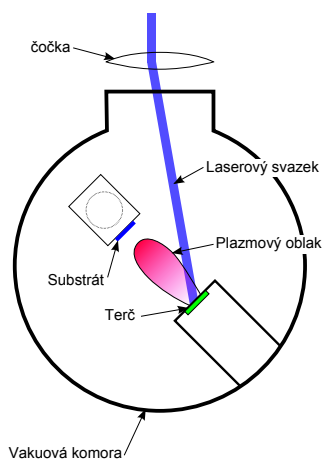
Cílem této práce je tedy seznámit se s metodou PLD a jejími fyzikálními modely. Na základě této rešerše pak sestavit, implementovat a ověřit jednodimenzionální hydrodynamický simulační kód pro metodu PLD, který je schopen numericky propočítat dva důležité procesy probíhající během depozice a to sice laserovou ablaci materiálu a expanzi plazmatu. Reálnost výsledků celého modelu je pak ověřena srovnáním s experimentálními daty v dostupné literatuře. Pro vylepšení výsledků jsou též navrženy nové rozšiřující modely.

V první kapitole je popsána metoda PLD a provedena rešerše na téma jejího modelování, jejíž výsledkem je mimo jiné možnost použití hydrodynamického modelu. Tento model je odvozen a sestaven v kapitole druhé, v jejímž závěru jsou vlastnosti modelu ověřeny v analytických hydrodynamických testech. Navazuje dále kapitola třetí, která přidává základní fyzikální modely pro popis laserového plazmatu. Problematiku ablace pevného terče pak dále rozvíjí čtvrtá kapitola, kde jsou uvedeny námi navržené rozšiřující modely umožňující získání reálných výsledků numerických simulací. V poslední kapitole jsou srovnány výsledky našich simulací s výsledky dostupných simulačních kódů a také s daty publikovanými v literatuře.



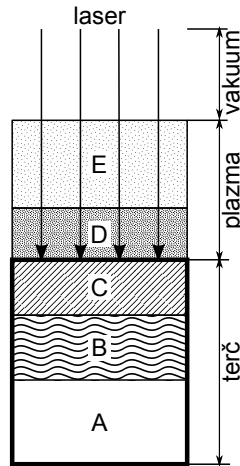
# 1 Modelování pulzní laserové depozice

Metoda *pulzní laserové depozice* (PLD) je jednou z vakuových metod experimentální přípravy tenkých vrstev, která spadá do širší skupiny fyzikálních metod přípravy z plynné fáze (angl. Physical Vapour Deposition - PVD). Tato metoda získala na oblibě především v posledních 20–30 letech díky své jednoduchosti, variabilitě a flexibilitě v kombinaci s faktem, že je možné tuto metodu aplikovat na téměř libovolný materiál počínaje čistými kovy [1], kterými se zabýváme především v této práci, a konče keramikami [2] či dokonce organickými látkami [3]. Samotná metoda je však o mnoho starší a její začátky sahají do let 60. minulého století, kdy se rozvíjela oblast výkonných pulzních laserových systémů [4]. Svou renesanci pak metoda zažila na konci let 80. s objevem vysokoteplotních supravodičů, které bylo možné přímo připravit touto metodou [5]. Metoda PLD prochází stálým vývojem a využívá se dodnes v mnoha odvětvích výzkumu a aplikací [6].



Obrázek 1: Schématické znázornění průběhu metody PLD a depoziční komory

Hlavním prvkem PLD je vysoko-výkonový pulzní zdroj laserového záření ( $\gtrsim 10^8 \text{ W/cm}^2$ ). Laserový svazek je zaveden do vakuové komory (Obr. 1), která může být vyplněna inertním plynem (nejčastěji argon) s obvykle nízkým tlakem ( $\lesssim 100 \text{ Pa}$ ), ale někdy se depozice provádí i za tlaků vyšších [7]. Někdy je také využito reaktivního plynu [8], ale těmito variantami se zde zabývat nebudeme a omezíme se pouze na základní případ vysokého vakua v depoziční komoře. Laserový svazek je tam fokusován na povrch masivního pevnolátkového terče (zde kovového). V tomto místě pak dochází při dosažení prahové fluence laseru k ablaci materiálu terče a vzniku plazmového oblaku nad povrchem. Tento oblak následně expanduje a šíří se vysokou rychlostí ( $\sim 10^6 \text{ cm/s}$ ) komorou. Po dosažení připraveného substrátu (z křemíku, safíru atp.) dochází ke kondenzaci na jeho povrchu a růstu tenké vrstvy. Výhodou celého procesu je zachování stechiometrie látky a současné dosažení dobré depoziční rychlosti při dostatečné intenzitě laseru [9]. Naopak nevýhodou metody je vznik vzorku o relativně malé homogenitě ( $\sim 1 \text{ cm}^2$ ) [10] a dále existence kapének či klastrů, které se mohou také přenášet s oblakem a narušit výslednou vrstvu [11].



Obrázek 2: Schéma ablace pevnolátkového terče a expanze vzniklého plazmatu (A – neovlivněná část terče, B – šíření tepelné vlny, C – absorpce laseru v terči, D – vysoce husté plazma, E – řídké plazma)

Podrobnější analýzou průběhu ablace a expanze (Obr. 2) docházíme k tomu, že nejprve dochází k absorpci laseru v pevném terči (C). Tím se prudce zahřívá terč a šíří se tepelné vlny (B), důsledkem čehož vzniká (nadkriticky) husté plazma nad povrchem terče (D) s nímž přicházející laserový svazek interaguje. Část energie je tak absorbována již v této oblasti, což anglicky nazýváme „plasma shielding“ [12]. Nakonec dochází k expanzi plazmatu do vakua (E). Obvykle se tedy průběh metody PLD dělí na tyto části:

- i) ablace terče
- ii) vznik plazmatu a jeho interakce s laserovým zářením
- iii) expanze plazmatu do vakua
- iv) depozice na substrátu

V této práci se budeme zabývat pouze částmi i)–iii), pro něž sestavíme příslušné fyzikální modely a budeme simulovat jejich průběh pomocí numerických metod. Výchozím předpokladem přitom bude použití nanosekundových laserových pulzů o špičkové intenzitě  $\sim 1 \text{ GW/cm}^2$  a vlnové délce v blízké UV oblasti jakou mají běžně používané lasery například typu KrF či Nd:YAG na 4. harmonické frekvenci (blíže k parametrům viz. kapitola 5).

## 1.1 Ablace terče

Během ablace terče dopadá laserové záření na terč, přičemž část je odražena a část intenzity o velikosti  $(1 - R)$  prochází do samotného terče, kde  $R$  značí odrazivost tohoto kovového terče. Zde dochází k exponenciálnímu útlumu intenzity s hloubkou, který můžeme popsat *Beer-Lambertovým* zákonem:

$$I(x) = (1 - R)I_0 e^{-\alpha x} , \quad (1)$$

kde  $I_0$  značí intenzitu dopadajícího záření a  $\alpha$  absorpční koeficient materiálu terče [13]. Vzhledem k tomu, že hloubka průniku, která je převrácenou hodnotou absorpčního koeficientu, je velmi malá ( $\sim 10$  nm) oproti poloměru spotu laserového paprsku ( $\sim 1$  mm), je teplotní gradient výrazně větší ve směru kolmém na vzorek. Díky tomu můžeme popisovat ohřev materiálu terče jednorozměrně, pokud hlavním cílem je určení tepelné bilance při povrchu terče, z které vyplyne ablační rychlost (množství odebraného materiálu ablací za čas).

Jelikož předpokládáme použití nanosekundových laserových pulzů, můžeme zcela zanedbat mikroskopické procesy elektron–fononové interakce a přejít zcela k popisu makroskopickému [14]. Vedení tepla se pak řídí *Fourierovým zákonem* udávajícím parabolickou rovnicí vedení tepla:

$$C \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) + S . \quad (2)$$

Veličina  $C = C(T)$  představuje tepelnou kapacitu materiálu,  $\kappa = \kappa(T)$  koeficient tepelné vodivosti a  $T = T(x, t)$  teplotu (na dané souřadnici v prostoru a čase) a  $S = S(x, t)$  nezávislý zdrojový člen (v tomto případě určený absorpcí laseru).

Pokud uvažujeme nižší intenzitu laseru, kdy nedochází při ohřevu k překročení kritického bodu látky, lze jasně definovat a oddělit jednotlivá skupenství materiálu [15]. Z tohoto důvodu většina autorů odděluje model ablace terče od ostatních částí modelu. Využívají zde přístupů založených na určení jednoduché bilance energie při jednom pulzu [16] a nebo zahrnou do rovnice vedení tepla (2) člen odpovídající úbytku energie v důsledku změny fáze [17]. Naopak pro vyšší intenzity ( $\gtrsim 1$  GW/cm<sup>2</sup>) je vhodnější simulovat vývoj rovnicemi hydrodynamiky [18, 19]. V této práci použijeme právě tento druhý zmíněný přístup, ale s úpravami pro simulace podmínek, které jsou na pomezí předešlých dvou.

## 1.2 Vznik plazmatu a interakce s laserovým zářením

Pro podkritický ohřev materiálu je rychlost odpařování analyticky určena Hertz–Knudsenovou rovnicí a tlak par v termodynamické rovnováze nad povrchem Clausius–Clapeyronovou rovnicí [17]. Namísto tohoto přístupu v této práci ošetříme tuto oblast modelem změny fáze, který bude integrován do numerického schématu (blíže kapitola 4). Celkově se tedy bude jednat stále o hydrodynamickou simulaci, kde popisované kontinuum však bude obsahovat různé fáze materiálu.

Dále se vymezuje také tzv. Knudsenova vrstva, kde jsou nerovnovážné podmínky, protože emitované částice mají rychlost orientovanou přibližně kolmo od terče. Tato oblast představuje z hlediska dynamiky kontinua oblast se silnou diskontinuitou [15]. Takováto vrstva má velikost ovšem pouze několika středních volných drah než vlivem srážek se rozdělovací funkce izotropizuje. Důsledkem je při proměnné intenzitě zdroje zpětný pohyb částic a rekondenzace. Těmito jevy se však zde zabývat nebudeme, protože jsou do velké míry lokální a na celkový výsledek mají relativně malý vliv.

Pro určení intenzity dopadajícího záření  $I_0$  musíme však zahrnout do modelu absorpci v hustém plazmatu. V této práci je jako hlavní absorpční mechanismus použito *inverzní brzdné záření* [16] a dochází tak opět k exponenciálnímu tlumení podle (1) s příslušným absorpčním koeficientem. Konkrétně se zde používá jednotný algoritmus pro výpočet absorpce v terči i v plazmatu, který zahrnuje do srážkové frekvence i elektron–fononovou interakci a dokáže tak dobře postihnout absorpci v kovovém terči (blíže kapitola 3.1.2).

### 1.3 Expanze plazmatu do vakua

Pro expanzi plazmatu do vakua po skončení pulzu je znám analytický model adiabatické expanze vycházející z řešení rovnic dynamiky plynu. Předpokládá se krátká doba trvání samotného pulzu oproti celkovému času šíření plazmového oblaku a pak je predikováno šíření oblaku ve formě soustředných elipsoidů [20]. Tento model podává však spíše pouze kvalitativní informaci o depozici za reálných podmínek [13].

Další možností je použití rovnic hydrodynamiky, buďto *Eulerových rovnic* nevazké stlačitelné tekutiny resp. rovnic dynamiky plynu [15, 18, 21] a nebo Navier–Stokesových rovnic, které jsou vhodné pro delší simulovaný čas ( $\gtrsim 1 \mu\text{s}$ ) či nezanedbatelný tlak ambientního plynu ( $\gtrsim 10^{-2} \text{ Pa}$ ) [22]. Obvykle jsou tyto modely ovšem omezeny na nízké tlaky ( $< 100 \text{ Pa}$ ), protože neuvažují přímo mikroskopickou interakci s ambientním plynem, ale existují na tomto poli i modely, které toto chování částečně zachycují [23].

Poslední variantou je použití simulace typu Monte Carlo, které dokážou uvedený problém řešit od nižších tlaků [24] až po vyšší ( $\sim 100 \text{ Pa}$ ) [25], ale bohužel obvykle pouze v oblasti několika centimetrů od terče. Vznikly proto kombinované modely obsahující jak část hydrodynamickou/rovnice dynamiky plynu, tak metodu Monte Carlo [26].

Vzhledem k uvedeným předpokladům na vakuum a v návaznosti na předešlé části modelu zde volíme přístup ryze hydrodynamický a popisujeme tak expandující plazma jako nevazkou stlačitelnou tekutinu.

## 2 Řešení rovnic hydrodynamiky

### 2.1 Lagrangeovské souřadnice

Pro popis dynamiky kontinua lze použít dva přístupy. Jednak přístup eulerovský, kdy uvažujeme, že veškeré veličiny jsou funkcemi nezávislých proměnných, kterými jsou prostorové souřadnice a čas. Tato práce se však zabývá především tzv. lagrangeovským popisem, což je druhý běžně používaný popis dynamiky kontinua.

V tomto přístupu volíme jako nezávislou proměnnou též čas  $t$ , ale namísto prostorové souřadnice  $x$  přecházíme k souřadnici materiálové  $X$ . Z toho plyne, že obecně poloha není v tomto popisu nezávislou proměnnou. Vzájemný vztah souřadnic vychází z jednoduché představy, že můžeme zavést trajektorii infinitesimálního hmotnostního elementu  $\Delta M$  jako  $\tilde{x} = \tilde{x}(X, t)$ . Přičemž platí, že na počátku se prostorová souřadnice elementu shoduje se souřadnicí materiálovou, tj.  $X = \tilde{x}(X, 0)$ . Dále musí platit, že trajektorie se vzájemně neprotínají v jednom bodě prostoru i času, což implikuje bijektivnost transformačního zobrazení  $\psi$  mezi eulerovskými a lagrangeovskými souřadnicemi zavedeného následující definicí:

$$\begin{aligned} \psi &: (X, t) \longrightarrow (x, t) \\ (X, t) &\longmapsto \psi(X, t) := (\tilde{x}(X, t), t) . \end{aligned} \quad (3)$$

Aby byla transformace dobře definována, celkově požadujeme, aby zobrazení  $\psi$  bylo difeomorfní.

Pro transformaci výrazů do lagrangeovských souřadnic pak lze odvodit vztah pro totální časovou derivaci funkce v lagrangeovských souřadnicích (ve smyslu derivace  $f \circ \psi$ ), za předpokladu, že rychlostí  $u$  si označíme právě rychlost pohybu hmotnostního elementu tj.  $u := \frac{\partial \tilde{x}}{\partial t}$ :

$$\frac{df(\tilde{x}(X, t), t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{x}}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} . \quad (4)$$

Za tímto účelem se zavádí následující diferenciální operátor materiálové derivace, který můžeme použít i v eulerovských souřadnicích:

$$\frac{D}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} . \quad (5)$$

### 2.2 Eulerovy rovnice

Hydrodynamický popis je přibližně aproximován modelem stlačitelné nevazké tekutiny v jednodimenzionálním přiblížení, jejíž hydrodynamiku matematicky formulují jednorozměrné Eulerovy rovnice:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial[(E + p)u]}{\partial x} = 0. \quad (8)$$

Ty vycházejí postupně z diferenciálních tvarů zákonů zachování hmotnosti, hybnosti a energie. Zde je  $\rho = \rho(x, t)$  hustota,  $u = u(x, t)$  rychlost toku hmoty,  $p = p(x, t)$  tlak a  $E = E(x, t)$  objemová hustota celkové energie.

Tuto soustavu rovnic pak můžeme převést do lagrangeovských souřadnic pomocí vztahů uvedených v minulé kapitole. Při této transformaci je však vhodné přepsat hustotu celkové energie  $E$  pomocí specifické vnitřní energie  $\varepsilon$ :

$$E = \rho\varepsilon + \frac{1}{2}\rho u^2. \quad (9)$$

Po úpravě dostáváme Eulerovy rovnice v lagrangeovských souřadnicích:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (10)$$

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = - \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (11)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -p \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (12)$$

Všechny veličiny jsou nyní v tomto zkráceném zápise funkcemi  $(X, t)$ .

Tuto soustavu navíc musíme doplnit o vztah pro polohu, jelikož ta není nezávislá v těchto souřadnicích (viz. předchozí kapitola):

$$\tilde{x}(X, t) = X + \int_0^t u(X, \tau) d\tau. \quad (13)$$

Rovnice (10) popisuje již dříve zmíněný zákon zachování hmotnosti v diferenciálním tvaru. Ukážeme, že tato rovnice je splněna automaticky. Zintegrujeme-li nejprve funkci hustoty přes libovolný objem v materiálových souřadnicích, získáme tak hmotnost tohoto objemu:

$$\int_{\tilde{x}(X_1, t)}^{\tilde{x}(X_2, t)} \rho(x, t) dx = M_{\langle X_1, X_2 \rangle}(t). \quad (14)$$

Tato hmotnost je ovšem, jak bylo naznačeno při zavádění souřadnic v předchozí kapitole, v lagrangeovských souřadnicích v čase konstantní resp. tyto souřadnice jsou voleny tak, aby toto bylo splněno. Z toho plyne pro integrál rovnice (10) podle polohy přes libovolný langrangeovský objem následující:

$$\begin{aligned} & \int_{\tilde{x}(X_1,t)}^{\tilde{x}(X_2,t)} \left( \frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} \right) dx = \int_{\tilde{x}(X_1,t)}^{\tilde{x}(X_2,t)} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u \rho}{\partial x} \right) dx = \\ & = \int_{\tilde{x}(X_1,t)}^{\tilde{x}(X_2,t)} \frac{\partial \rho}{\partial t} dx + [u \rho]_{(X_1,t)}^{(X_2,t)} = \frac{d}{dt} \int_{\tilde{x}(X_1,t)}^{\tilde{x}(X_2,t)} \rho dx = \frac{dM_{(X_1,X_2)}}{dt} = 0 . \end{aligned}$$

Po odstranění integrálu (platí pro všechny objemy) a současnou transformaci do lagrangeovských souřadnic získáme automatické splnění rovnice (10).

## 2.3 Stavová rovnice

Soustava Eulerových rovnic uvedených v předchozí kapitole není uzavřená a není proto možné ji jako takovou řešit (obsahuje více neznámých než rovnic). Pro její uzavření potřebujeme znát vztah mezi tlakem, specifickou vnitřní energií a hustotou tj.  $p = p(\varepsilon, \rho)$ . Tento vztah udává (mimo jiné) právě stavová rovnice. V této práci jsou použity dvě stavové rovnice, jednak stavová rovnice ideálního plynu a také Quotidian Equation of State (QEOS). V obou případech aproximujeme plazma modelem jedno-teplotní stlačitelné tekutiny, tj. nerozlišujeme mezi teplotou iontů a elektronů, což je dostatečně dobré přiblížení v případě nanosekundových pulzů [13].

V nejjednodušším případě používáme stavovou rovnici ideálního plynu, ze které získáváme hledaný vztah pro tlak ( $\gamma$  zde označuje Poissonovu konstantu plynu):

$$p = \varepsilon \rho (\gamma - 1) . \quad (15)$$

Dále pro teplotu  $T = T(\varepsilon)$  platí následující vztah, který využijeme později pro vedení tepla (kapitola 3.2):

$$T = \frac{A}{Z + 1} \frac{m_u}{k_B} \varepsilon (\gamma - 1) . \quad (16)$$

Zde  $A$  značí nukleonové číslo,  $m_u$  atomovou hmotnostní jednotku,  $k_B$  Boltzmannovu konstantu a  $Z$  stupeň ionizace plynu, která je u ideálního plynu konstantní.

Posledním důležitým vztahem plynoucím ze stavové rovnice je výraz pro rychlost zvuku  $v_S = v_S(\varepsilon)$ :

$$v_S = \sqrt{(\gamma - 1) \gamma \varepsilon} . \quad (17)$$

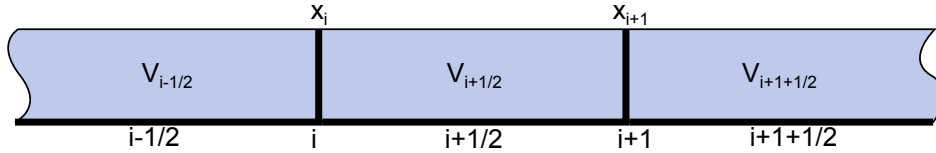
Druhá zmíněná stavová rovnice QEOS je použita pro získání přesnějších výsledků, jelikož lépe aproximuje chování plazmatu. Ukazuje se totiž, že volba stavové rovnice může do velké míry ovlivnit dynamiku simulace [27]. QEOS využívá pro určení tepelných vlastností elektronů Thomas-Fermiho statistického modelu [28], který je rozšířen o semi-empirické vazebné korekce [29]. Pro ionty je použit Cowanův model [30]. Celkově je tato stavová rovnice platná pro široké rozsahy teplot a oblastí vyšších hustot, proto je často používána v hydrodynamických simulacích [31].

## 2.4 Numerické schéma

Pro hydrodynamickou simulaci počítačových experimentů je implementováno numerické řešení Eulerových rovnic v lagrangeovském tvaru (10), (11), (12) s použitím metody konečných diferencí. Kompatibilní numerické schéma je konstruováno s ohledem na algebraické zachování celkové energie a vychází z [32].

### 2.4.1 Prostorová diskretizace

Pro diskretizaci v prostoru je použito střídavé (staggered) schéma, které umožňuje snadné vytvoření schématu 2. řádu v prostoru i při aproximaci funkcí stupňovitými (po částech konstantními) funkcemi. Schéma rozděljuje oblast na  $N \in \mathbb{N}$  podintervalů nazývaných *buňky* a na  $N + 1$  jejich hraničních bodů nazývaných *uzly*. Skalární materiálové veličiny jsou konstantní v buňkách a jednotlivé diskrétní hodnoty značeny poločíselnými indexy, naopak kinematické vektorové veličiny (popř. i jiné toky ve smyslu transportních rovnic) jsou umístěny v uzlech a jejich diskrétní hodnoty jsou značeny celočíselnými indexy (Obr. 3).



Obrázek 3: Střídavá (staggered) prostorová diskretizace

V jednorozměrném popisu je objem buňky definován vztahem:

$$V_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i . \quad (18)$$

Hmotnosti buněk pak budou mít v souladu s (14) tvar:

$$m_{i+1/2} = \rho_{i+1/2} V_{i+1/2} . \quad (19)$$

Pro odvození budeme dále potřebovat *duální objemy*, což jsou okolí uzlů tvořící lagrangeovské objemy (v limitě). Podobně jako buňky budou pokrývat výpočetní oblast a proto je pro jednoduchost zavedeme jako oblasti od středu levé buňky (vzhledem k uzlu) do středu pravé buňky. Pro duální objem a hmotnost tedy bude platit:

$$V_i = \frac{V_{i+1/2} + V_{i-1/2}}{2} , \quad (20)$$

$$m_i = \frac{m_{i+1/2} + m_{i-1/2}}{2} . \quad (21)$$

Pro odvození rovnic pro vývoj diskretizovaných veličin budeme buňky uvažovat jako (v limitě) lagrangeovské objemy a příslušné vztahy pro ně získáme integrací Eulerových rovnic v lagrangeovských souřadnicích. První rovnice (10) je splněna automaticky, jak bylo odvozeno v kapitole 2.2. Druhou rovnici (11) zintegrujeme přes duální objem a získáme tak předpis pro vývoj rychlosti uzlu (22):



$$m_i \frac{du_i}{dt} = F_i . \quad (22)$$

Zde veličina  $F_i$  představuje výslednici sil v uzlu:

$$F_i = F_{i-1/2,i} + F_{i+1/2,i} , \quad (23)$$

kde  $F_{i-1/2,i}$  a  $F_{i+1/2,i}$  jsou síly působící na uzel  $i$  z buňky  $i - 1/2$  resp.  $i + 1/2$  a platí pro ně:

$$F_{i-1/2,i} = p_{i-1/2} , \quad (24)$$

$$F_{i+1/2,i} = -p_{i+1/2} . \quad (25)$$

Obdobně po integraci přes objem buňky třetí rovnice (12) získáváme vztah pro vývoj vnitřní energie buňky:

$$m_{i+1/2} \frac{d\varepsilon_{i+1/2}}{dt} = P_{i+1/2} , \quad (26)$$

$$P_{i+1/2} = -F_{i+1/2,i+1}u_{i+1} - F_{i+1/2,i}u_i , \quad (27)$$

kde  $P_{i+1/2}$  se někdy označuje jako tepelný výkon (z termodynamického hlediska se však jedná o mechanický výkon).

#### 2.4.2 Časová diskretizace

Finální numerické schéma získáme diskretizováním odvozených vztahů (22) a (26) v čase pomocí časových diferencí. Pro rozlišení hodnot veličin v jednotlivých diskrétních časových hladinách budeme značit tuto hladinu horním celočíselným indexem počínaje nulou. Při použití jednoduché dopředné diference (při délce kroku  $\Delta t$ ) získáváme z rovnosti (22) následující (hmotnost je konstantní, viz. kapitola 2.2):

$$m_i \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = F_i^n . \quad (28)$$

Pro obdobnou úpravu rovnice (26) si zavedeme rychlost středovanou v čase:

$$u_i^{n+1/2} = \frac{u_i^{n+1} + u_i^n}{2} . \quad (29)$$

Tuto rychlost použijeme namísto rychlosti v čase  $t^n$ , aby schéma bylo druhého řádu v čase a také konzervativní (viz. kapitola 4.1). Po této úpravě získáváme následující rovnici:

$$m_{i+1/2} \frac{\varepsilon_{i+1/2}^{n+1} - \varepsilon_{i+1/2}^n}{\Delta t} = -F_{i+1/2,i+1}^n u_{i+1}^{n+1/2} - F_{i+1/2,i}^n u_i^{n+1/2} . \quad (30)$$

Pro úplnost pak ještě uvedme rovnici pro změnu polohy uzlu:

$$\frac{x_i^{n+1} - x_i^n}{\Delta t} = u_i^{n+1/2} . \quad (31)$$

Celkově získáváme z rovnic (28), (30) a (31) explicitní numerické schéma, které je uzavřeno výpočtem tlaků  $p_{i+1/2}^{n+1}$  pomocí stavové rovnice ze specifické vnitřní energie  $\varepsilon_{i+1/2}^{n+1}$  a hustoty  $\rho_{i+1/2}^{n+1} = m_{i+1/2}/V_{i+1/2}^{n+1}$ .

Aby bylo schéma kompletně druhého řádu, je využito pro časovou integraci metody *prediktor–korektor*. V prvním kroku této metody se vypočítají podle schématu nejdříve pouze odhady tlaků  $\tilde{p}_{i+1/2}^{n+1}$ . Veličiny v časové vrstvě  $n+1$  se pak vypočítají opět podle stejného schématu, ale namísto starého tlaku  $p_{i+1/2}^n$  se používají tlaky středované v čase  $(\tilde{p}_{i+1/2}^{n+1} + p_{i+1/2}^n)/2$ , čímž jsou středovány i působící síly ve vztahu (28).

### 2.4.3 Umělá viskozita

Pro zajištění stability schématu v oblastech prudké komprese, je též využito umělé viskozity. Ta je přičtena k tlakům  $p_{i+1/2}^n$  (mluvíme o tzv. zobecněném tlaku) v celém schématu a působí disipativně (přeměňuje kinetickou energii na vnitřní) při kompresi a zabraňuje tak nárůstu oscilací [33]. Konkrétně je v simulacích použita *lineárně-kvadratická* umělá viskozita:

$$q_{i+1/2}^n = C_1 \rho_{i+1/2}^n \delta u_{i+1/2}^n v_{s_{i+1/2}}^n + C_2 \rho_{i+1/2}^n (\delta u_{i+1/2}^n)^2, \quad (32)$$

$$\delta u_{i+1/2}^n = \begin{cases} 0 & u_{i+1}^n - u_i^n \geq 0 \\ u_i^n - u_{i+1}^n & u_{i+1}^n - u_i^n < 0 \end{cases}. \quad (33)$$

Veličina  $v_{s_{i+1/2}}^n$  je zde rychlost zvuku vypočítaná ze stavové rovnice (viz. kapitola 2.3) a  $C_1, C_2$  jsou konstanty volené ve většině simulací v této práci  $C_1 = 1, C_2 = 1$ . Mimo to je též implementována Kurapatěnkova umělá viskozita [34], která se ovšem za běžných podmínek chová přibližně podobně jako lineárně-kvadratická a proto se v simulacích nevyužívá.

### 2.4.4 Určení časového kroku

Pro zaručení stability schématu musí být splněna tzv. *CFL podmínka* (Courant-Friedrichs-Lewyho),

$$\forall i \quad \Delta t < \frac{1}{4} \frac{V_{i+1/2}}{v_{s_{i+1/2}}}, \quad (34)$$

která omezuje délku časového kroku  $\Delta t$  tak, aby jakákoliv vygenerovaná rázová vlna nezpůsobila překrytí buněk resp. vznik buněk o záporném objemu [32].

Vzhledem k velké rychlosti plazmového oblaku se prakticky ukázalo vhodné navíc k rychlosti zvuku připočítávat i rychlosti uzlů a získáváme tak rovnost:

$$\Delta t = C_{CFL} \min_{\forall i} \left( \frac{V_{i+1/2}}{v_{s_{i+1/2}} + \max(|u_i|, |u_{i+1}|)} \right), \quad (35)$$

určující přímo dynamicky délku časového kroku při vhodné volbě konstanty  $C_{CFL}$  většinou v simulacích nastavenou  $C_{CFL} = 0.25$ . Počáteční délka časového kroku je načítána

ze vstupního souboru a obvykle je volena výrazně menší než běžná hodnota  $\Delta t$  vypočtená pomocí (35) během simulace. Pro postupný přechod mezi těmito hodnotami (popř. i jinými výrazně se lišícími) je dodržováno omezení růstu  $\Delta t$  vždy na maximálně 1.2-násobek minulé hodnoty.

## 2.5 Testy hydrodynamického kroku

Pro ověření správnosti a funkčnosti numerického schématu resp. jeho implementace bylo provedeno několik standardních úloh, pro které známe analytické řešení a můžeme ho tak porovnat s výsledky simulace.

### 2.5.1 Sodův problém

Jedním ze základních testů je známý *Sodův problém* [35]. Jedná se o klasický Riemannův problém, kdy je úloha zadána okrajovou podmínkou na nulovou rychlost a homogenní počáteční podmínkou s diskontinuitou v jednom bodě ( $x = 0.5$ ) v tomto případě hustotě i tlaku. Konkrétní hodnoty parametrů jsou uvedeny níže (Tab. 1). Pro výpočet byla nastavena konstanta  $C_{CFL} = 0.25$  koncový čas byl vždy 0.2 s a výpočetní síť obsahovala 400 rovnoměrně rozmístěných buněk. Umělá viskozita pak byla nastavena  $C_1 = 1.0$  a  $C_2 = 0.1$ .

Tabulka 1: Počáteční podmínky Sodova problému

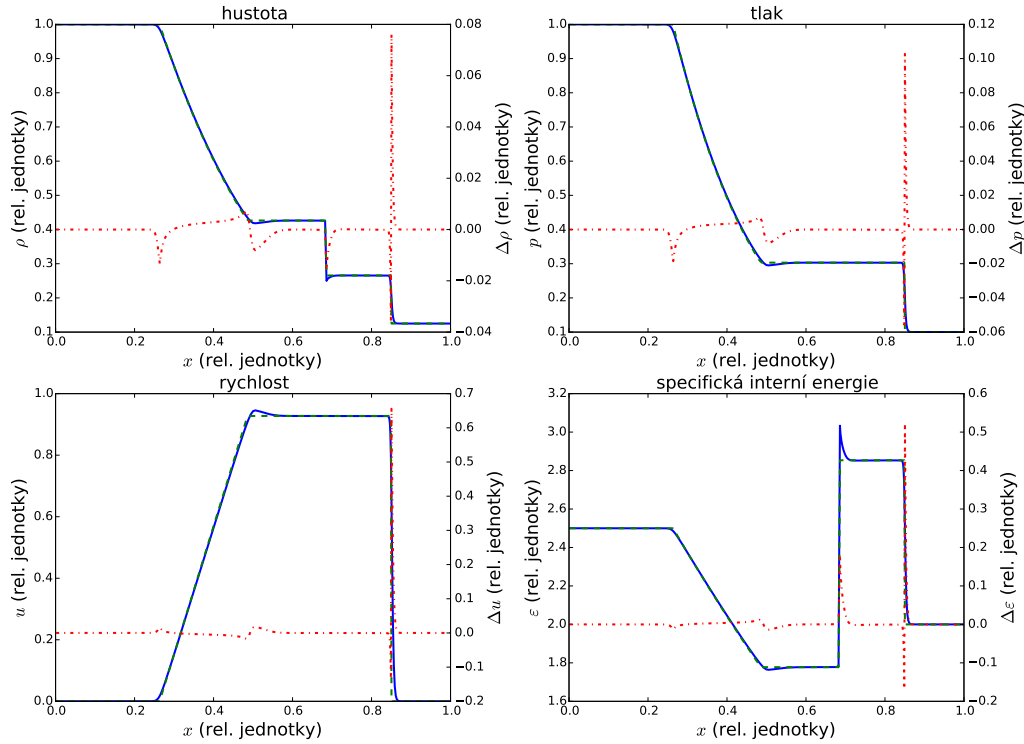
oblast	$\rho$	$p$	$u$	$\gamma$
$0 < x < 0.5$	1.000	1.0	0.0	1.4
$0.5 < x < 1.0$	0.125	0.1	0.0	1.4

Důsledkem těchto počátečních podmínek je generace vln trojího druhu, zprava je to vlna rázová, kontaktní nespojitost a zředění, jak můžeme vidět v grafech (Obr. 4). Ze srovnání simulace s analytickým řešením je vidět, že lagrangeovský hydrodynamický výpočet, kdy se výpočetní síť pohybuje s hmotou, dokáže relativně dobře sledovat čela vln. Zřetelný je také vliv umělé viskozity, která v simulaci působí difuzně, ale zabraňuje nestabilitě a oscilacím především u čela rázové vlny.

Pro zhodnocení výsledků budeme používat  $L_1$  normu odchylky a  $L_\infty$  normu odchylky relativně vzaté vůči příslušné normě analytické hodnoty, které značíme jako „ $L_1$  chyba“ a „ $L_\infty$  chyba“. Tyto chyby pro diskrétní hodnoty veličin  $f_i$  a analytické hodnoty  $f_i^a = f^a(x_i)$  pro  $i \in \{1, \dots, N\}$  se tedy počítají následovně:

$$L_1 \text{ chyba} = \frac{\sum_{i=1}^N |f_i - f_i^a|}{\sum_{i=1}^N |f_i^a|}, \quad (36)$$

$$L_\infty \text{ chyba} = \frac{\max_{i \in \{1, \dots, N\}} |f_i - f_i^a|}{\max_{i \in \{1, \dots, N\}} |f_i^a|}. \quad (37)$$



Obrázek 4: Srovnání numerické simulace s analytickým řešením Sodova problému (plně – simulace, čárkovaně – analytické řešení, čerchovaně – vzájemný rozdíl)

Přehled úhrnných chyb vybraných veličin je uveden níže (Tab. 2). Téměř v celé oblasti je chyba relativně malá (Obr. 4) a tím i chyba  $L_1$ , to ale neplatí u čela rázové vlny, kde je díky difuzi chyba větší, což se pak projevuje nárůstem maximové chyby  $L_\infty$ .

Tabulka 2: Chyba numerické simulace Sodova problému oproti analytickému řešení

veličina	$L_1$ chyba	$L_\infty$ chyba
hustota	$2.8 \cdot 10^{-3}$	$7.6 \cdot 10^{-2}$
tlak	$3.0 \cdot 10^{-3}$	$1.0 \cdot 10^{-1}$

Posledním důležitým výsledkem simulace je, jak se zachovává celková energie systému resp. jak je numerické schéma konzervativní. V tomto případě vychází relativní chyba řádu  $10^{-14}$ , což lze považovat už za strojovou chybu při výpočtu.

## 2.5.2 Nohův problém

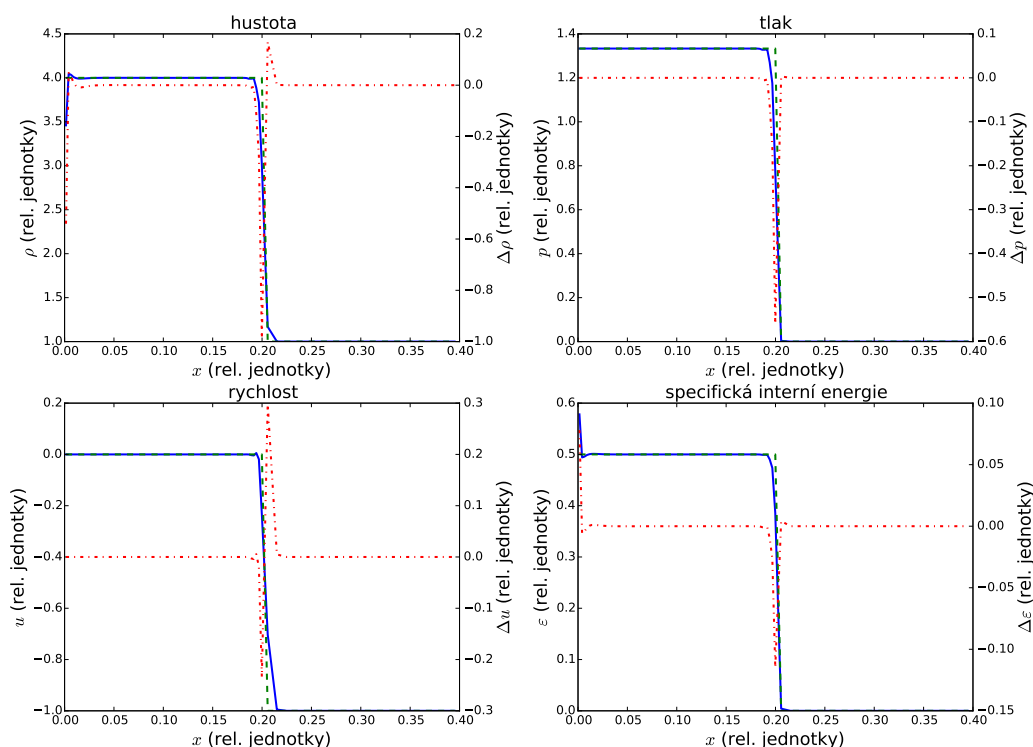
Dalším testem hydrodynamiky je tzv. *Nohův problém* [36]. Okrajová podmínka je opět na nulovou rychlost na levém okraji ( $x = 0$ ) ovšem tentokrát pravá ( $x = 1$  v  $t = 0$ )

okrajová podmínka rychlosti nastavena na  $u = -1.0$  stejně jako rychlost v počáteční podmínce (Tab. 3), která je nyní homogenní v celé oblasti. Výpočet probíhal se 100 rovnoměrně rozmístěnými buňkami do finálního času 0.6 s. Ostatní parametry zůstávají stejné jako v případě Sodova problému (kapitola 2.5.1).

Tabulka 3: Počáteční podmínky Nohova problému

oblast	$\rho$	$p$	$u$	$\gamma$
$0 < x < 1$	1.0	$1.0 \cdot 10^{-6}$	-1.0	5/3

Výsledkem simulace (Obr. 5) je za těchto podmínek kumulace hmoty u levého okraje výpočetní oblasti a šíření rázové vlny v opačném směru (doprava), za jejímž čelem by měla být hustota konstantní.



Obrázek 5: Srovnání numerické simulace s analytickým řešením Nohova problému (plně – simulace, čárkovaně – analytické řešení, čerchovaně – vzájemný rozdíl)

Ve vzájemném srovnání vidíme opět výrazný vliv umělé viskozity, v této simulaci na šířku čela rázové vlny. Vzhledem k malému počtu buněk (100) se navíc projevuje i rozlišení sítě, které také přispívá k rozšíření hrany. Jistá chyba také vzniká u levého okraje, jde o tzv. „wall heating“. V této oblasti dochází k zvýšení vnitřní energie a tedy

ohřevu buňky. Tato chyba vzniká na počátku simulace stlačením několika prvních buněk, ale protože řešení rovnic hydrodynamiky vede na ustálení rovnováhy tlaků a nikoli vnitřní energie a hustoty, zůstává chyba zachována po celou dobu simulace. Nicméně podstatným výsledkem tohoto testu je, že nedochází k nestabilitám a oscilacím ani při velké kompresi buněk právě díky funkční umělé viskozitě. Ta zcela správně působí disipativně při kompresi a tím v zhuštěné oblasti kompletně zastavila buňky výpočetní sítě i při zachování správné rychlosti rázové vlny.

Pro úplnost uvedme úhrnné chyby simulace (Tab. 4). Chyba  $L_1$  je poměrně malá i přes malý počet buněk, ale znatelně se liší od maximové chyby  $L_\infty$ , která je ovlivněna rozšířením čela rázové vlny. Chyba v zachování celkové energie se pohybovala opět na úrovni strojové chyby.

Tabulka 4: Chyba numerické simulace Nohova problému oproti analytickému řešení

veličina	$L_1$ chyba	$L_\infty$ chyba
hustota	$6.6 \cdot 10^{-3}$	$2.4 \cdot 10^{-1}$
tlak	$7.4 \cdot 10^{-3}$	$4.1 \cdot 10^{-1}$

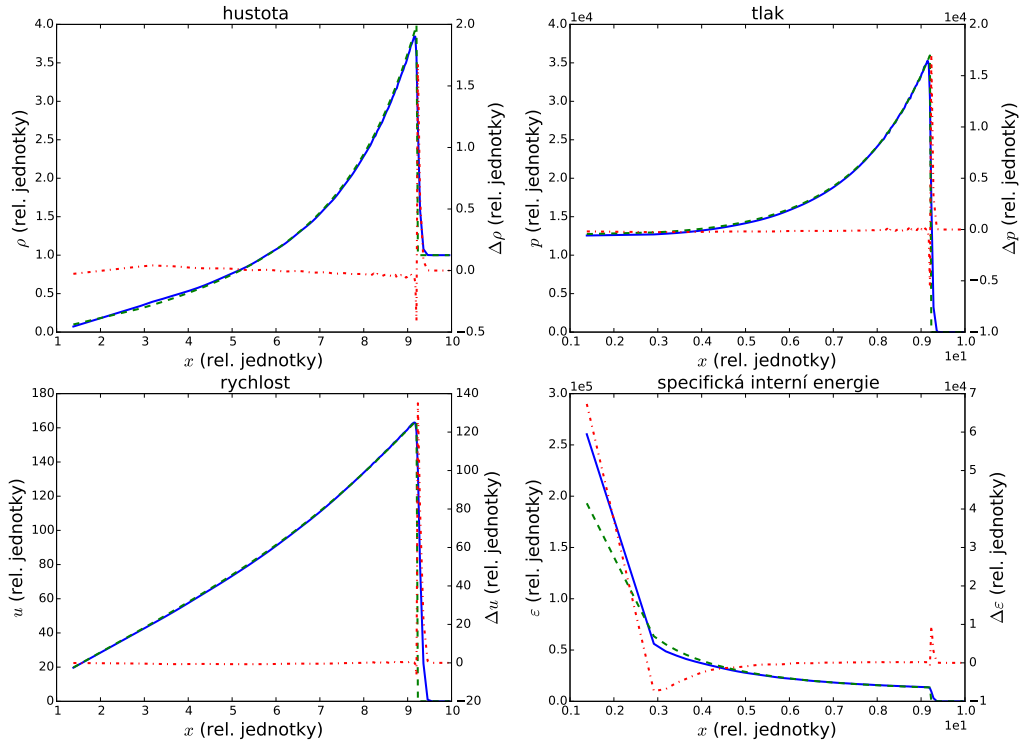
### 2.5.3 Sedovova exploze

Posledním prováděným testem je tzv. *Sedovova exploze* [37]. Teoreticky je úloha zadána tak, že by mělo být uloženo velké množství energie do jediného bodu, který po začátku simulace vytvoří velkou rychle se šířící rázovou vlnu. Takto není možné nastavit počáteční podmínku při zde používané prostorové diskretizaci (viz. kapitola 2.4.1). Z tohoto důvodu je úloha aproximována tím, že je jedné buňce nastaven velký tlak a zbytku tlak naopak velmi malý (Tab. 5). Přesto jde o pro hydrodynamickou simulaci velmi náročnou úlohu i při použité šířce první buňky 0.2 (při celkovém počtu 100 buněk, které jsou kromě první rovnoměrně rozmístěny od  $x = 0.2$  do  $x = 12.0$ ) a umělé viskozitě nastavené  $C_1 = 1.0$  a  $C_2 = 1.0$ .

Tabulka 5: Počáteční podmínky Sedovovy exploze

buňka	$\rho$	$p$	$u$	$\gamma$
1	1.0	$1.0 \cdot 10^{+6}$	0.0	5/3
2 – N	1.0	$1.0 \cdot 10^{-6}$	0.0	5/3

Ze srovnání (v čase  $t = 0.028$  s) s analytickým řešením [38] (Obr. 6) je zřejmé, že opět dochází zejména v rychlosti k znatelnému rozšíření čela tlakové vlny díky umělé viskozitě, která však musí být v této úloze volena poměrně silná, vzhledem k velkému gradientu tlaku. Zdánlivě také dochází k větší chybě ve vnitřní energii v levé části grafu, ale je třeba si uvědomit, že v této oblasti se nachází už pouze jedna jediná buňka (původně s vysokým tlakem), která silně expandovala. Také je třeba mít na paměti, že je vynášena specifická vnitřní energie, takže musíme sledovat i vývoj hustoty, která



Obrázek 6: Srovnání numerické simulace s analytickým řešením Sedovovy exploze (plně – simulace, čárkovaně – analytické řešení, čerchovaně – vzájemný rozdíl)

je v tomto místě naopak velmi malá, takže se tyto křivky kompenzují podobně jako u Nohova problému.

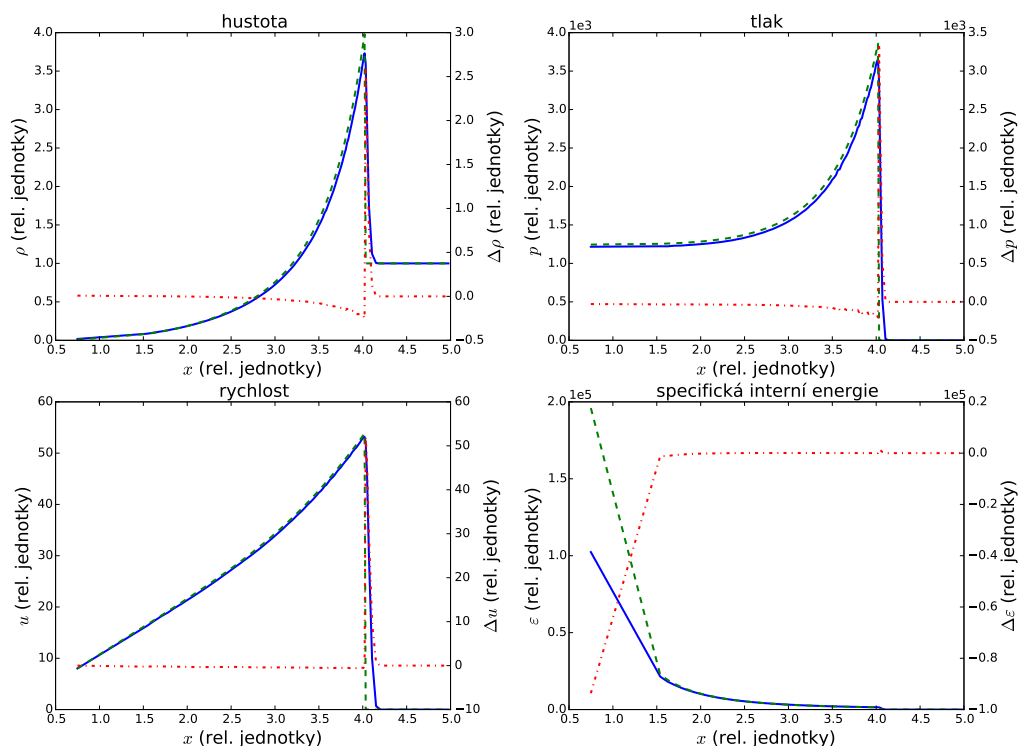
V přehledu úhrnných chyb (Tab. 6) je vidět, že chyba  $L_1$  je v tomto testu větší než v ostatních, což dokazuje, že se jedná o pro hydrodynamickou simulaci těžkou úlohu. Naopak maximová chyba  $L_\infty$  je zde srovnatelná s ostatními testy, což je opět dáno širším čelem vlny. Chyba v zachování celkové energie se pohybovala i v tomto případě na úrovni strojové chyby.

Tabulka 6: Chyba numerické simulace Sedovovy exploze oproti analytickému řešení

veličina	$L_1$ chyba	$L_\infty$ chyba
hustota	$3.4 \cdot 10^{-2}$	$5.8 \cdot 10^{-1}$
tlak	$3.0 \cdot 10^{-2}$	$7.3 \cdot 10^{-1}$

Díky dobré symetrii úlohy lze Sedovovu explozi počítat i v jiné než pouze planární geometrii. Tím je myšleno, že buňky nebudou zaujímat tvar kvádrů v prostoru, ale zde například tvar cylindrických či sférických slupek. Simulace však zůstává jednodimenzionální a proto je zcela nezbytné, aby byla úloha plně symetrická a nedocházelo tak k angulárním tokům atp. Integrace rozšíření o různé geometrie do numerického

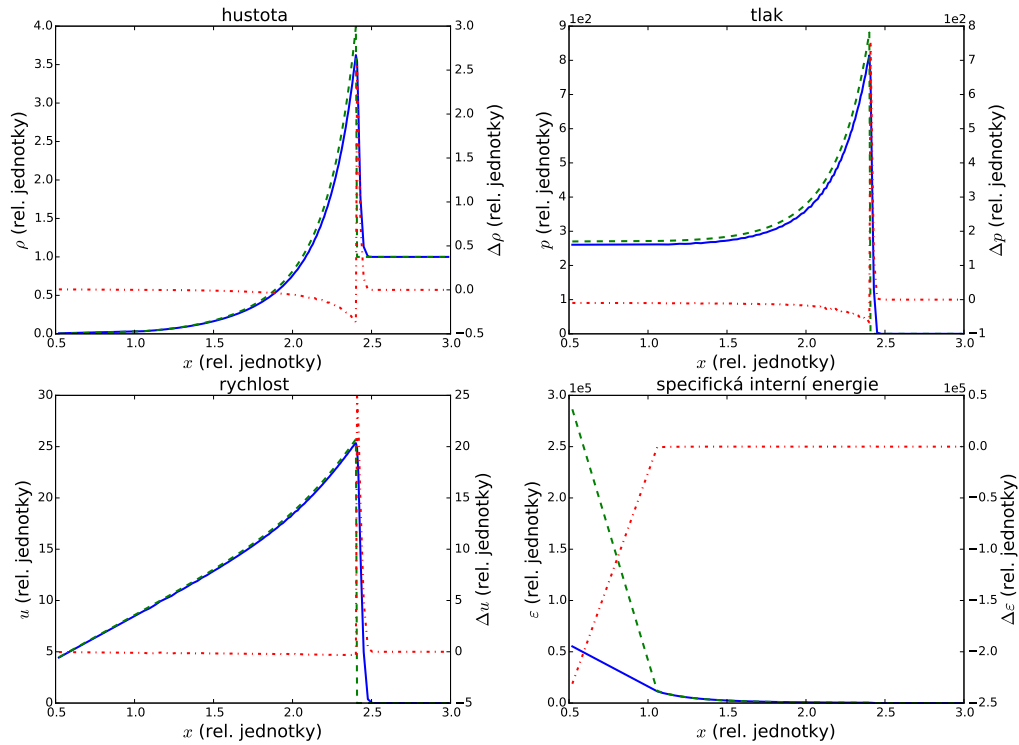
schématu a dokázání konzervativity je rozebráno v kapitole 4.2. Zde uvedme výsledky simulace Sedovovy exploze pro cylindrickou (Obr. 7) a sférickou geometrii (Obr. 8). Všechny parametry simulace jsou shodné s planární geometrií jen s tím rozdílem, že vzhledem k značnému zpomalení rázové vlny je pravý koncový uzel u cylindrické geometrie v  $x = 6.0$  a u sférické  $x = 3.0$ .



Obrázek 7: Srovnání numerické simulace s analytickým řešením Sedovovy exploze v cylindrické geometrii (plně – simulace, čárkovaně – analytické řešení, čerchovaně – vzájemný rozdíl)

Výsledky v obou geometriích jsou celkově kvalitativně velice podobné těm v planární geometrii (Obr. 6). Pozorované chyby jsou však v těchto geometriích spíše větší, což je ovšem logické vzhledem k tomu, že veličiny zde závisí na (vyšších) mocninách polohy. Chyba v poloze se pak významně projeví ve veličinách uvnitř buňky a naopak, takže celkově je systém více provázan a má vyšší nároky na přesnost výpočtu jednotlivých veličin. Nejvýraznější je opět i zde chyba v první buňce, která je ve sférické geometrii extrémní, nicméně nevypovídající příliš o přesnosti schématu, která se zdá být jinak velice dobrá. Přesnost též můžeme zhodnotit podle přehledů úhrnných chyb (Tab. 7), (Tab. 8). Zde je patrný především nárůst  $L_1$  chyby, což odpovídá předešlé analýze, naopak maximová chyba  $L_\infty$  je přibližně podobná, protože opět k největším chybám (ve smyslu funkční hodnoty) dochází difuzí na čele rázových vln. Bilance celkové energie kromě toho ukazuje, že ani v těchto úlohách není porušena konzervativita a chyba se tak pohybuje na úrovni strojové přesnosti.





Obrázek 8: Srovnání numerické simulace s analytickým řešením Sedovovy exploze ve sférické geometrii (plně – simulace, čárkovaně – analytické řešení, čerchovaně – vzájemný rozdíl)

Tabulka 7: Chyba numerické simulace Sedovovy exploze v cylindrické geometrii oproti analytickému řešení

veličina	$L_1$ chyba	$L_\infty$ chyba
hustota	$9.4 \cdot 10^{-2}$	$6.8 \cdot 10^{-1}$
tlak	$9.9 \cdot 10^{-2}$	$2.6 \cdot 10^{-1}$

Tabulka 8: Chyba numerické simulace Sedovovy exploze ve sférické geometrii oproti analytickému řešení

veličina	$L_1$ chyba	$L_\infty$ chyba
hustota	$1.1 \cdot 10^{-1}$	$6.4 \cdot 10^{-1}$
tlak	$9.5 \cdot 10^{-2}$	$8.6 \cdot 10^{-1}$

### 3 Základní fyzikální modely

V této kapitole jsou popsány základní rozšíření hydrodynamického modelu, které umožňují numericky simulovat fyzikální úlohy z oblasti fyziky laserového plazmatu. Nejprve je to absorpce laserového záření (kapitola 3.1) a dále model vedení tepla (kapitola 3.2).

#### 3.1 Absorpce laserového záření

Pro popis laserové ablace terče musíme do sestaveného modelu doplnit absorpci laserového svazku, jelikož samotný hydrodynamický popis plazmatu nezahrnuje interakci s vnějším elektromagnetickým polem. Za tímto účelem zavedeme do třetí Eulerovy rovnice (8), deklarující zachování energie v systému, tzv. zdrojový člen  $S = S(x, t)$ . Po přechodu do langrangeovských souřadnic získáme modifikovanou rovnici (12) ve tvaru:

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -p \frac{\partial u}{\partial x} - S . \quad (38)$$

Zde uvedený obecný tvar zdrojového členu má v případě absorpce laserového svazku tvar  $S = \frac{\partial L}{\partial x}$ , kde  $L = L(x, t)$  je hustota toku absorbované energie laserového svazku. Tuto veličinu diskretizujeme obdobně jako ostatní veličiny v prostoru i čase (viz. kapitola 2.4) jako  $L_i^n$ . Příslušným způsobem pak doplníme numerické schéma, takže ze vztahu pro změnu specifické vnitřní energie (30) získáme:

$$m_{i+1/2} \frac{\varepsilon_{i+1/2}^{n+1} - \varepsilon_{i+1/2}^n}{\Delta t} = -F_{i+1/2, i+1} u_{i+1} - F_{i+1/2, i} u_i - (L_{i+1}^n - L_i^n) . \quad (39)$$

Příspěvek laseru zde necentrujeme v čase (resp. funkční hodnotě) jako rychlost, protože předpokládáme hladký průběh veličiny v čase a v prostoru popř. absorpci v jediné buňce (viz. dále).

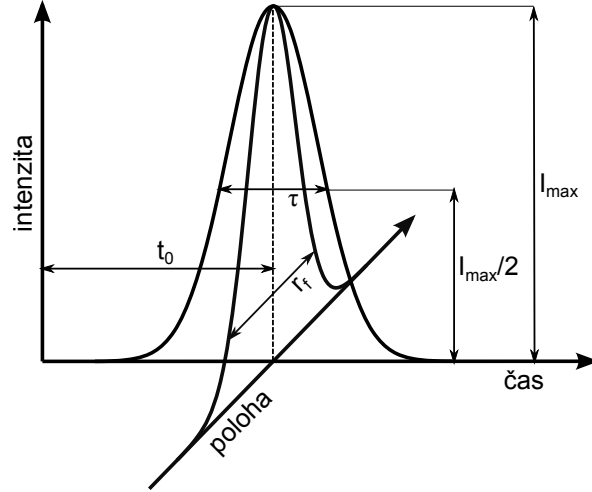
##### 3.1.1 Parametry laserového pulzu

V modelu absorpce potřebujeme znát intenzitu laserového svazku vstupujícího do výpočetní oblasti jako funkci času. V této práci budeme používat výhradně gaussovský profil intenzity v čase a prostoru (Obr. 9), jehož parametrizace bude vycházet z [39]. Intenzita v závislosti na vzdálenosti od středu terče  $r$  a čase  $t$  pak vypadá následovně:

$$I(r, t) = \tilde{I}_{max} \exp \left( - \left( \frac{2(t - t_0) \sqrt{\ln 2}}{\tau} \right)^2 - \left( \frac{r}{r_0} \right)^2 \right) . \quad (40)$$

Zde  $\tilde{I}_{max}$  představuje vstupní parametr špičkové intenzity v pulzu,  $t_0$  posunutí středu pulzu oproti počátku simulace a  $\tau$  šířku pulzu (šířka pulzu v  $\tilde{I}_{max}/2$ ; angl. FWHM – full width at half maximum).

Celkovou energii pulzu  $E_L$  pak získáme integrací přes prostor i čas v polárních souřadnicích:



Obrázek 9: Časový a prostorový profil intenzity laserového pulzu

$$E_L = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} r I(r, t) d\varphi dr dt = \tilde{I}_{max} \tau \pi^{\frac{3}{2}} r_0^2 . \quad (41)$$

Provedeme-li tuto integraci pouze do konečného poloměru ozn.  $r_f$ , pak dostaneme energii prošlou touto kruhovou oblastí:

$$E_f = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{r_f} \int_0^{2\pi} r I(r, t) d\varphi dr dt = \tilde{I}_{max} \tau \pi^{\frac{3}{2}} r_0^2 \left( 1 - \exp\left(-\frac{r_f^2}{r_0^2}\right) \right) . \quad (42)$$

Bude-li  $r_f$  označovat poloměr „spotu“, tedy kruhu do něž dopadá 80 % energie, pak lze určit  $r_0 = r_f / \sqrt{\ln 5}$ . Pokud budeme uvažovat poloměr terčiku (resp. jeho simulované části)  $r_d$  obecně odlišný od  $r_f$ , bude nás zajímat vzájemný poměr energií na terči  $E_d$  (získáme z (42) dosazením  $r_d$  za  $r_f$ ) a v celém pulzu  $E_L$  z poměru uvedených poloměrů. Tento tzv. *geometrický koeficient* získáme úpravou předešlých vztahů jako:

$$C_d = \frac{E_d}{E_L} = 1 - 5^{-\frac{r_d^2}{r_f^2}} . \quad (43)$$

V běžných případech však budeme uvažovat  $r_f = r_d$  a koeficient  $C_d$  je pak roven hodnotě 0.8.

Nyní již můžeme přejít k funkci intenzity závislé pouze na čase, která bude mít stejný časový průběh jako  $I(r, t)$  ze vztahu (40), ale zřejmě jinou maximální intenzitu  $I_{max}$ . Tato obecně funkce času bude odrážet poměr výkonů celkového a dopadajícího na terč v každém časovém okamžiku, což můžeme ovšem splnit konstantou vzhledem k tvaru  $I(r, t)$ . Výsledný vztah pro intenzitu závislou na čase je tedy následovný:

$$I(t) = I_{max} \exp\left(-\frac{4 \ln 2}{\tau^2} (t - t_0)^2\right) . \quad (44)$$

Pro  $I(t)$  musí platit, že bude časový integrál,

$$E_d = \int_{-\infty}^{+\infty} I(t) dt = I_{max} \frac{\tau}{2\sqrt{\ln 2}} \pi^{\frac{3}{2}} r_d^2, \quad (45)$$

dávat opět stejnou hodnotu celkové dopadající energie  $E_d$  jako dříve, takže  $E_d = C_d E_L$ . Tato podmínka pak určuje vztah pro maximální intenzitu  $I_{max}$  v závislosti na energii pulzu  $E_L$ :

$$I_{max} = C_d \frac{2\sqrt{\ln 2}}{\tau} \frac{E_L}{\pi^{\frac{3}{2}} r_d^2}. \quad (46)$$

### 3.1.2 Model absorpce

V této práci se používají dva modely absorpce laserového záření. Jednak je to model absorpce na kritické hustotě a za druhé pak kód založený na řešení Maxwellových rovnic. Oba tyto modely uvažují jako hlavní absorpční mechanismus *inverzní brzdné záření* a tím předpokládají prakticky veškerou absorpci laseru v oblasti kritické hustoty. Podle [40] lze kritickou hustotu  $\rho_c$  v nejjednodušším případě v jednotkách  $\text{g/cm}^3$  pro vlnovou délku laseru  $\lambda$  v  $\mu\text{m}$  vypočítat následovně:

$$\rho_c = 1.86 \cdot 10^{-3} \frac{A}{Z\lambda^2}, \quad (47)$$

kde nukleonové číslo  $A$  vyjadřuje závislost na konkrétním materiálu.

Zmíněný model absorpce na kritické hustotě pak pouze určuje, že energie se absorbuje v jediné buňce, jejíž hustota přesáhne hustotu kritickou vypočtenou podle (47). Konkrétně algoritmus prochází jednotlivé buňky zprava (tj. po směru šíření laseru) a nastavuje tok absorbované energie  $L_i$  následovně:

$$L_i = \begin{cases} -C_a I & \text{dokud } \rho_{i+1/2} < \rho_c \\ 0 & \text{po nalezení první buňky s } \rho_{i+1/2} \geq \rho_c \end{cases}. \quad (48)$$

Zde je bezrozměrná konstanta  $C_a$  celkový absorpční koeficient. Záporné znaménko značí, že laserový paprsek přichází zprava. Celkově je tento model velmi zjednodušující a vzhledem k absorpci v jediné buňce vyžaduje značnou difuzi energie v simulaci. Ačkoliv bylo implementováno vedení tepla (viz. následující kapitola), výsledky s tímto modelem byly nerealistické a proto v simulacích v této práci nebyl využíván, nicméně díky své jednoduchosti slouží k referenčnímu srovnání s jinými kódy.

Druhým integrovaným modelem absorpce laserového záření je 1D kód vycházející z algoritmu popsáno v [40], který implementoval Tomáš Kapin a je popsán v [41]. Výhodou tohoto algoritmu je, že díky řešení stacionárních Maxwellových rovnic dokáže simulovat odrazy vlny a její propagaci v absorbujičím prostředí, takže už obvykle nedochází k absorpci v jediné buňce. Navíc počítá se zpřesněnou srážkovou frekvencí podle [42], která zahrnuje elektron–fononovou interakci a dokáže tak lépe simulovat absorpci v pevném terči (popř. odraz od něho).

## 3.2 Vedení tepla

Doposud sestavený fyzikální model nezahrnuje nikterak vedení tepla. Pro rozšíření modelu o tento druh šíření tepla (konvekce je již možná vzhledem k lagrangeovskému přístupu) je nutné do třetí Eulerovy rovnice (8) zavést parabolický člen, kterým bude divergence tepelného toku  $W = W(x, t)$ . Získáváme tak (i se začleněním absorpce laseru) v lagrangeovských souřadnicích rozšířenou rovnici (12) ve tvaru:

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -p \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{\partial W}{\partial x} . \quad (49)$$

Tepelný tok  $W$  je určen Fourierovým zákonem vedení tepla:

$$W = -\kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x} . \quad (50)$$

Funkce teploty  $\kappa(T)$  zde označuje koeficient tepelné vodivosti. V oblasti terče (pevné a kapalně výpočetní buňky, viz. 4.3) bereme hodnotu konstantně rovnu tabulkové hodnotě (pro hliník  $2.75 \cdot 10^{11} \text{ erg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{eV}^{-1}$ ). Naopak v oblasti vzniklého plazmového oblaku, jehož simulací se v této práci zabýváme především, můžeme v Spitzer-Härmově aproximaci [43] tento koeficient vypočítat (v jednotkách soustavy cgs s teplotou v eV) jako:

$$\kappa(T) = 3.144 \cdot 10^9 \frac{Z + 0.24}{1.0 + 0.24Z} \frac{T^{\frac{5}{2}}}{Z \ln \Lambda} . \quad (51)$$

Ve vztahu vystupující coulombovský logaritmus  $\ln \Lambda$  je určen následovně:

$$\ln \Lambda = \ln(\max(10, \min(\lambda_1, \lambda_2))) , \quad (52)$$

$$\lambda_1 = 1.5526 \cdot 10^{10} \frac{T^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{n_e}} , \quad (53)$$

$$\lambda_2 = 8.7 \cdot 10^{10} \frac{T}{\sqrt{n_e}} . \quad (54)$$

Veličina  $n_e$  značí elektronovou hustotu, kterou vypočítáme (za předpokladu kvazineutrálnosti) vzorcem:

$$n_e = \frac{Z \rho}{A m_u} , \quad (55)$$

kde konstanta  $m_u$  zde představuje atomovou hmotnostní jednotku ( $m_u = 1.6605 \cdot 10^{-24} \text{ g}$ ).

Jelikož takto postavený model může v simulacích predikovat nereálně velký tepelný tok, nepoužívá se přímo hodnota vypočtená podle (50), ale omezuje se následující hodnotou:

$$W^{max} = f^{max} \frac{k_B}{m_u} \sqrt{\frac{k_B}{m_e}} \frac{Z}{A} \rho T^{\frac{3}{2}} , \quad (56)$$

kde  $k_B$  je Boltzmannova konstanta ( $k_B = 1.6022 \cdot 10^{-12}$  erg/eV) a  $m_e$  hmotnost elektronu ( $m_e = 9.1094 \cdot 10^{-28}$  g). Tento omezovač tepelného toku (angl. flux limiter) vychází z představy, že se nemůže přenést více energie než je tepelná energie všech elektronů v daném objemu. Násobící faktor  $f^{max}$  by čistě z teoretického hlediska měl být  $f^{max} = 1$ , ovšem reálnější výsledky získáváme pro hodnoty  $f^{max} \approx 0.05$  [44].

### 3.2.1 Numerické schéma

Řešení hyperbolického systému rovnic (10), (11) a (12) resp. (po zahrnutí absorpce laseru) (38) bylo již rozebráno v kapitolách 2.4 a 3.1. Nicméně po zavedení vedení tepla do tohoto systému novou rovnicí zachování energie (49) a (50) je tento systém diferenciálních rovnic už obecně parabolický (obsahuje hyperbolickou a parabolickou část) a nelze pro něj tedy použít sestavené schéma. Z tohoto důvodu použijeme tzv. *metodu rozkladu*, kdy rozdělíme rovnici zachování energie na hyperbolickou část:

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -p \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial L}{\partial x} \quad (57)$$

a část parabolickou:

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = - \frac{\partial W}{\partial x} . \quad (58)$$

Obě tyto části řešíme postupně metodou konečných diferencí. Nejprve použijeme odvozené numerické schéma na hyperbolický systém rovnic (10), (11) a (57). Tím při časovém kroku  $\Delta t$  získáváme z hodnot  $(\rho^n, u^n, \varepsilon^n)$  nové hodnoty hledaných funkcí, které označíme  $(\rho^*, u^*, \varepsilon^*)$ . Poté řešíme rovnice (58) a (50) se stejným časovým krokem  $\Delta t$ , přičemž vycházíme z dříve vypočtených hodnot  $(\rho^*, u^*, \varepsilon^*)$  resp. teploty  $T^* = T^*(\varepsilon^*, \rho^*)$  získané ze stavové rovnice (viz. kapitola 2.3). Po provedení tohoto kroku máme k dispozici novou hodnotu specifické vnitřní energie, kterou nyní už umístíme do časové hladiny  $n + 1$ , takže jsem dostali  $\varepsilon^{n+1}$ . Ostatní veličiny zůstaly nezměněné, takže  $u^{n+1} = u^*$  a  $\rho^{n+1} = \rho^*$ . Celkově jsme tímto postupem provedli dopředný časový krok o délce  $\Delta t$  a získali veličiny  $(\rho^{n+1}, u^{n+1}, \varepsilon^{n+1})$ .

Samotné numerické schéma řešící rovnice vedení tepla (58) a (50) je převzato z [44](kapitola 2.3.5 „Neiterační řešení“) a vychází z mimetické aproximace diferenciálního operátoru [45]. Jedná se o nepodmíněně stabilní implicitní schéma, takže mimo jiné nevyžaduje úpravu časového kroku (časový krok je stejný pro vedení tepla i hydrodynamický krok), což je z hlediska výpočetní náročnosti výhodné, jelikož obecně explicitní schéma řešící parabolický systém rovnic by vyžadovalo, aby  $\Delta t \sim \Delta x^2$ . Celkově už autor ukázal, že schéma je relativně velmi přesné, a i zde přesnost ověříme na testovací úloze v následující kapitole.

Přejdeme nyní k odvození a popisu schématu. Nejprve převedeme rovnice (58) a (50) do společné veličiny teploty  $T$ . Specifickou vnitřní energii můžeme vyjádřit při použití stavové rovnice jako  $\varepsilon = \varepsilon(T, \rho)$ , takže pro časovou derivaci platí (při konstantní hustotě a poloze):

$$\left( \frac{\partial \varepsilon(T, \rho)}{\partial t} \right)_{x, \rho} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} . \quad (59)$$

Po dosazení do (58) a označení:

$$a(T, \rho) = \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial T}(T, \rho) , \quad (60)$$

dostáváme konečný tvar řešené soustavy rovnic vedení tepla:

$$a \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} = 0 , \quad (61)$$

$$W = -\kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x} . \quad (62)$$

Jelikož podle (51) je  $\kappa(T) \sim T^{\frac{5}{2}}$ , transformujeme celou soustavu tak, abychom tuto závislost odstranili z koeficientu tepelné vodivosti a získali tak diferenciální rovnici s konstantními koeficienty. Vyjádříme si tedy tento koeficient jako:

$$\kappa(T) = cT^p , \quad (63)$$

kde v našem případě  $p = \frac{5}{2}$ . Poznamenejme, že v oblasti terče, kde je původní koeficient  $\kappa$  konstantní, bude naopak po této transformaci koeficient  $c$  závislý na teplotě, na což při diskretizaci nebudeme brát zřetel. Tím se dopouštíme menší chyby, ale detailní znalost šíření tepla v terči není v této práci klíčová.

Transformovat budeme posléze teplotu podle následujícího předpisu:

$$\theta = T^{p+1} . \quad (64)$$

Po úpravě získáváme transformovanou soustavu rovnic (61) a (62) ve tvaru:

$$\bar{a} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} = 0 , \quad (65)$$

$$W = -\bar{\kappa} \frac{\partial \theta}{\partial x} , \quad (66)$$

kde jsme si označili:

$$\bar{a} = \frac{a}{(p+1)\theta^{\frac{p}{p+1}}} , \quad (67)$$

$$\bar{\kappa} = \frac{c}{p+1} . \quad (68)$$

Podle převzatého numerického schématu nejprve vypočítáme tepelné toky podle transformované rovnice (66), ale poté použijeme netransformovanou rovnici (61) pro výpočet teploty. Tepelné toky jsou podle tohoto schématu určeny rovnicí:

$$\begin{aligned}
& - \frac{\Delta t}{V_{i-1/2} \bar{a}_{i-1/2}^n} W_{i-1}^{n+1} + \\
& + \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{V_{i+1/2}}{\bar{\kappa}_{i+1/2}} + \frac{V_{i-1/2}}{\bar{\kappa}_{i-1/2}} \right) + \Delta t \left( \frac{1}{\bar{a}_{i-1/2}^n V_{i-1/2}} + \frac{1}{\bar{a}_{i+1/2}^n V_{i+1/2}} \right) \right] - \\
& - \frac{\Delta t}{V_{i+1/2} \bar{a}_{i+1/2}^n} W_{i+1}^{n+1} = \theta_{i-1/2}^n - \theta_{i+1/2}^n . \quad (69)
\end{aligned}$$

Hledané tepelné toky v časové hladině  $n+1$  tedy získáme řešením globálního lineárního systému s tridiagonální maticí, který řešíme funkcí pro *LU rozklad* z numerické knihovny NAG [46].

Nové teploty pak už vypočítáme dosazením tepelných toků do schématu:

$$T_{i+1/2}^{n+1} = T_{i+1/2}^n - \frac{\Delta t}{a_{i+1/2}^n} \frac{W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}}{V_{i+1/2}} . \quad (70)$$

### 3.2.2 Omezení toku tepla

Omezení toku tepla, které bylo popsáno na začátku kapitoly, zahrneme do schématu následujícím způsobem. Nejdříve vypočítáme maximální hodnotu toku tepla v každém uzlu výpočetní sítě  $W_i^{max}$  podle (56) a provedeme krok vedení tepla, čímž obdržíme neomezené toky tepla  $W_i^*$ . Z těchto hodnot pak vypočítáme nové koeficienty tepelné vodivosti  $\kappa_{i+1/2}^*$  následovně:

$$\bar{\kappa}_{i+1/2}^* = \bar{\kappa}_{i+1/2} \min \left( 1.0, \frac{W_i^{max}}{W_i^*}, \frac{W_{i+1}^{max}}{W_{i+1}^*} \right) . \quad (71)$$

S těmito koeficienty pak provádíme opětovně krok vedení tepla, jehož výsledkem jsou díky linearitě již omezené tepelné toky.

### 3.2.3 Testovací úloha

Funkčnost kroku vedení tepla ověříme na úloze s nelineární tepelnou vlnou, jejíž řešení známe analyticky [44, 47]. Abychom získali soustavu s konstantními koeficienty, položíme pevně  $a = 1$  a  $\kappa(T) = kT^\alpha$ . Tím dostáváme soustavu (61), (62) ve tvaru:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} = 0 , \quad (72)$$

$$W = -kT^\alpha \frac{\partial T}{\partial x} . \quad (73)$$

Řešením je funkce zmíněné nelineární tepelné vlny:



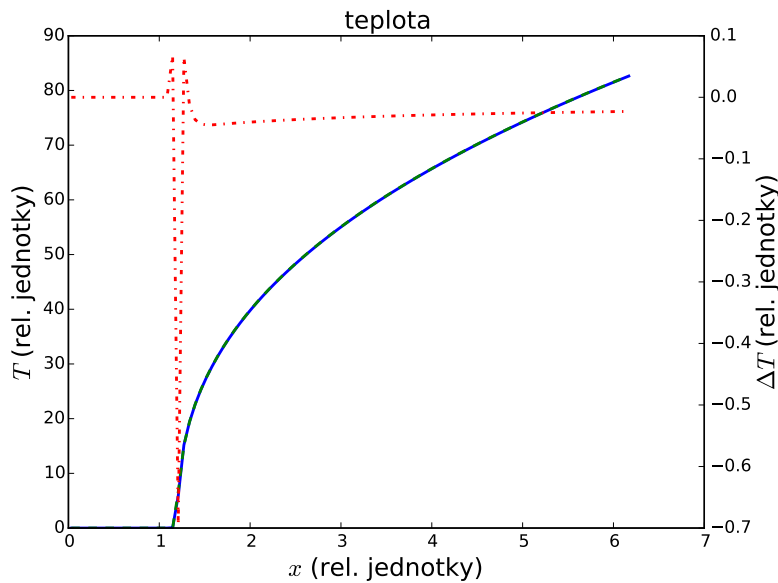
$$T(x, t) = \begin{cases} \left(\frac{\alpha D}{k}(Dt + s + x)\right)^{\frac{1}{\alpha}} & x > -Dt - s \\ 0 & x < -Dt - s \end{cases}, \quad (74)$$

kteřá je definována všude kromě čela vlny v  $x = -Dt - s$ , ale pro praktické účely ji zde můžeme spojitě dodefinovat nulou (předpokládáme totiž, že numerické schéma konverguje ke spojitému řešení). Počáteční podmínka je dána analytickým řešením  $T(x, 0)$  a podmínka okrajová tepelným tokem vypočítaným podle (73) na okrajích výpočetní oblasti též z analytického řešení.

Konkrétně pro simulaci byly použity parametry:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{5}{2}, & k &= 1.0 \cdot 10^{-3}, & t &= 0.8, \\ D &= 5.0, & s &= 1, & x &\in (0.0, 6.2), \end{aligned} \quad (75)$$

kde je záměrně zvolen řád závislosti na teplotě koeficientu tepelné vodivosti  $\alpha$  shodný s řádem ve vztahu pro  $\kappa(T)$  používaným pro fyzikální simulace (51). Tím se i tato teoretická úloha podobá reálnému případu šíření tepelné vlny.



Obrázek 10: Srovnání numerické simulace s analytickým řešením nelineární tepelné vlny (plně – simulace, čárkovaně – analytické řešení, čerchovaně – vzájemný rozdíl)

Tabulka 9: Chyba v teplotě nelineární tepelné vlny oproti analytickému řešení

veličina	$L_1$ chyba	$L_\infty$ chyba
teplota	$6.8 \cdot 10^{-4}$	$8.4 \cdot 10^{-3}$

Z výsledků pro 100 rovnoměrně rozmístěných buněk (Obr. 10), je vidět, že numerické schéma je relativně velmi přesné. Drobná chyba vzniká jen u čela vlny, kde je

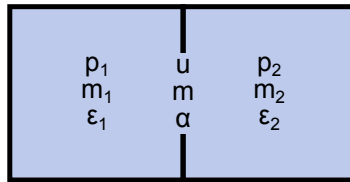
velký gradient hodnot a nedostatečná hustota výpočetní mřížky. Přesnost potvrzují i úhrnné chyby (Tab. 9).

## 4 Rozšíření fyzikálních modelů

Tato kapitola obsahuje navržená vylepšení fyzikálních modelů a jejich začlenění do numerického schématu pro získání reálnějších výsledků počítačových experimentů obsahujících laserovou ablaci pevnolátkového terče.

### 4.1 Držení pevné a kapalné fáze

Při lagrangeovském popisu laserové ablace pevného terče je nutné, aby fyzikální model dokázal alespoň přibližně obsáhnout chování jednotlivých fází materiálu a přechod mezi nimi (viz. kapitola 4.3). Hlavní fyzikální nesrovnalostí doposud sestaveného modelu je, že při výpočtu pohybu uzlů výpočetní sítě používá přímo tlak vypočtený ze stavové rovnice (viz. kapitola 2). To má za následek samovolnou expanzi pevné (popř. kapalné) fáze do vakua jako kdyby se jednalo o plyn, protože nejsou zohledněny mikrostrukturální vazby mezi atomy a tím i makroskopické vazby mezi výpočetními buňkami (resp. uzly). Pro odstranění tohoto problému bylo do modelu přidáno několik jednoduchých metod omezení pohybu uzlů v závislosti na teplotě.



Obrázek 11: Systém pro kontrolu konzervativity

Důležitým kritériem při hodnocení dané metody je její konzervativita, pokud je totiž metoda (a tím i schéma) nekonzervativní, může se během simulace nezanedbatelně vytrácet energie ze systému (za reálných podmínek bylo zjištěno, že i v řádu desítek procent). Ověření konzervativity provedeme postupně u všech zde uvedených metod. Za tímto účelem uvažujme simulovaný systém tvořený pouze dvěma buňkami a jedním uzlem mezi nimi (Obr. 11). Za předpokladu okrajové podmínky na nulovou rychlost a libovolné počáteční podmínky na  $p_1^n, p_2^n, \epsilon_1^n, \epsilon_2^n, u^n$  provedeme aplikaci dříve zavedeného numerického schématu (kapitola 2.4) vývoj systému do časové hladiny  $n + 1$  (bez změny tlaku). Při tomto kroku ověříme, zdali se nezměnila hodnota celkové energie (při konstantním objemu):

$$E = m_1 \epsilon_1 + m_2 \epsilon_2 + \frac{1}{2} m u^2 . \quad (76)$$

Vzhledem k tomu, že všechny metody budou modifikovat pouze 2. Eulerovu rovnici (11) resp. (28), můžeme do předpisu dosadit explicitní vztah pro vnitřní energii  $\epsilon_i^{n+1}$  (30). Z ověřované rovnosti  $E^n = E^{n+1}$  pak po úpravě dostaneme, že musí být splněno následující:

$$F^n (u^{n+1} + u^n) \Delta t = m \left( (u^{n+1})^2 - (u^n)^2 \right) , \quad (77)$$

kde  $F^n = F_1^n + F_2^n$  je celková síla působící na uzel.

Pokud nepoužijeme žádnou z metod držení a dosadíme tedy za  $u^{n+1}$  z (28),

$$-F^n \left( \frac{F^n}{m} \Delta t + 2u^n \right) \Delta t + m \left( \frac{F^n}{m} \Delta t + u^n \right)^2 - m(u^n)^2 = 0 ,$$

získáme nepodmíněné splnění rovnosti, čímž jsme ověřili konzervativitu této části schématu.

#### 4.1.1 Omezení rychlosti

Tato metoda je převzata z [44, 47] (kapitola 2.5 resp. 2.6 „Jednoduchý model pro změny fáze“) a spočívá v omezení rychlosti  $u_i^{*n+1}$  vypočítané z (28) následujícím způsobem:

$$u_i^{n+1} = \alpha_i^n u_i^{*n+1} , \quad (78)$$

$$\alpha_i^n = \begin{cases} 0 & T_i^n \leq T_m \\ \frac{T_i^n - T_m}{T_b - T_m} & T_m < T_i^n < T_b \\ 1 & T_b \leq T_i^n \end{cases} , \quad (79)$$

kde  $T_m$  značí teplotu tání,  $T_b$  teplotu varu a  $T_i^n$  teplotu uzlu, kterou položíme  $T_i^n = \max(T_{i-1/2}, T_{i+1/2})$ . Takovéto omezení tedy znemožňuje pohyb uzlů v pevné fázi a naopak umožňuje neomezený pohyb pro plynou fázi. Omezení pohybu kapalná fáze pak představuje lineární přechod mezi těmito extrémy.

Nedostatkem této metody je nekonzistentnost s (11) v tom smyslu, že pro konstantní  $T_m < T_i < T_b$  v limitě  $\Delta t \rightarrow 0$  dostaneme  $u \rightarrow 0$  namísto toho, aby rychlost konvergovala k obecně nenulovému řešení. Jinak řečeno výsledek pro kapalná uzly závisí na délce časového kroku resp. počtu iterací. Dalším problémem je nekonzervativita metody, kterou shledáváme po dosazení do (77) ( $\alpha = \alpha^n$ ):

$$\begin{aligned} -F^n \left( \alpha \frac{F^n}{m} \Delta t + (1 + \alpha)u^n \right) \Delta t + \alpha^2 \frac{(F^n \Delta t)^2}{m} + 2\alpha^2 F^n u^n \Delta t + m(\alpha^2 - 1)(u^n)^2 = \\ = \alpha(\alpha - 1) \frac{(F^n \Delta t)^2}{m} + (2\alpha^2 - \alpha - 1)F^n u^n \Delta t + m(\alpha^2 - 1)(u^n)^2 . \end{aligned}$$

Tento výraz je totiž obecně nenulový pro  $\alpha \neq 1$  a proto je metoda nekonzervativní.

#### 4.1.2 Omezení přírůstku rychlosti

Nekonzistentnost předešlé metody s matematickým modelem můžeme odstranit omezením nikoliv samotné rychlosti, ale pouze jejího přírůstku:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \alpha_i^n F_i^n \Delta t . \quad (80)$$

Tato metoda již nezávisí na délce kroku  $\Delta t$  a za předpokladu nulových počátečních rychlostí znemožňuje pohyb pevné fáze a omezuje pohyb (zrychlení) fáze kapalná.

Bohužel se ovšem ukazuje, že i tato metoda je nekonzervativní:

$$\begin{aligned} & -F^n \left( \alpha \frac{F^n}{m} \Delta t + 2u^n \right) \Delta t + \alpha^2 \frac{(F^n \Delta t)^2}{m} + 2\alpha F^n u^n \Delta t = \\ & = \alpha(\alpha - 1) \frac{(F^n \Delta t)^2}{m} + 2(\alpha - 1) F^n u^n \Delta t \neq 0 \quad \text{pro } \alpha \neq 1 . \end{aligned}$$

### 4.1.3 Omezení sil

Poslední metodou, která odstraňuje nedostatky předešlých dvou, je omezení sil působících na uzel. Redefinujeme tedy vztah pro tuto sílu (24),(25) následovně:

$$F_{i-1/2,i} = \alpha_i^n \tilde{F}_{i-1/2,i} , \quad (81)$$

$$F_{i+1/2,i} = \alpha_i^n \tilde{F}_{i+1/2,i} , \quad (82)$$

kde  $\tilde{F}_{i-1/2,i}$  resp.  $\tilde{F}_{i+1/2,i}$  značí sílu získanou z původní definice.

Stejně jako v předchozím případě i tato metoda omezuje akceleraci uzlu, metoda je nyní ovšem zcela konzervativní:

$$-\alpha \tilde{F}^n \left( \alpha \frac{\tilde{F}^n}{m} \Delta t + 2u^n \right) \Delta t + \alpha^2 \frac{(\tilde{F}^n \Delta t)^2}{m} + 2\alpha \tilde{F}^n u^n \Delta t = 0 .$$

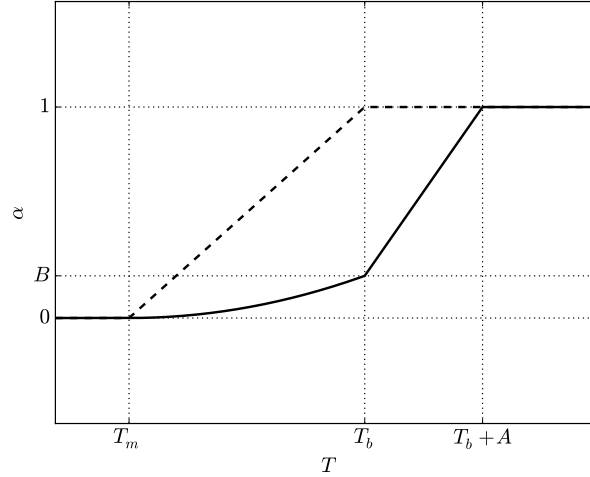
Důvodem je kompatibilita rychlostí a sil v rovnici zachování energie (30).

### 4.1.4 Vylepšený koeficient držení

Koeficient  $\alpha$  definovaný vztahem (79) nemodeluje příliš dobře kapalnou fázi materiálu, protože umožňuje její přílišný pohyb. Byl proto navržen zobecněný předpis koeficientu  $\alpha$ :

$$\alpha_i^n = \begin{cases} 0 & T_i^n \leq T_m \\ B \left( \frac{T_i^n - T_m}{T_b - T_m} \right)^E & T_m < T_i^n \leq T_b \\ \frac{T_i^n - T_b}{A} (1 - B) + B & T_b < T_i^n < T_b + A \\ 1 & T_i^n \geq T_b + A \end{cases} , \quad (83)$$

který má více nastavitelných parametrů ( $A$ ,  $B$ ,  $E$ ), ale přitom je zpětně kompatibilní s původním tvarem (79) při volbě  $A = 0$ ,  $B = 1$ ,  $E = 1$ . Konstanty  $A$  a  $B$  jsou však při použití modelu fázového přechodu (viz. kapitola 4.3) obvykle voleny následovně:  $A$  rovno polovině šířky fázového přechodu,  $B \ll 1$  a  $E > 1$ . Je tak umožněn pouze pomalý pohyb kapalně fáze a naopak rychlá expanze plynné fáze, kde je výhodné lineární zvyšování  $\alpha$ , které nezpůsobuje přílišné oscilace. Porovnání obou koeficientů (Obr. 12) ukazuje tato vylepšení oproti původnímu předpisu.



Obrázek 12: Porovnání koeficientů držení (čárkovaně – původní, plně – nový s  $B = 0.2$  a  $E = 2$ )

## 4.2 Cylindrická a sférická geometrie

Přestože používáme jednodimenzionální přiblížení problému, je možné v dostatečně symetrické úloze, jakou je například Sedovova exploze (kapitola 2.5.3), použít i jinou než kartézskou geometrii jako kupříkladu cylindrickou či sférickou. Simulujeme pak vlastně radiální vývoj systému za předpokladu, že se systém vyvíjí ve všech úhlech shodně.

Přejdeme od polohové souřadnice  $x$  k poloměru  $r$  a všechny veličiny uvažujme jako funkce  $(r, t)$ . Navíc všechny fyzikálně objemové veličiny berme jako jejich skutečné objemové analogy (objemová hustota  $\rho(r, t)$ , objem radiální slupky  $V = V(r_1, r_2)$  atd.) a fyzikálně veličiny toků jako jejich radiální obdoby. Také zavedme povrch radiální slupky  $\Omega = \Omega(r)$  (pro cylindrickou geometrii  $\Omega = 2\pi r$  a sférickou  $\Omega = 4\pi r^2$ ). Po trojrozměrné integraci Eulerových rovnic a diskretizaci podobně jako v kapitole 2.4 získáme formálně velmi podobné schéma:

$$F_{i-1/2,i}^n = \Omega_i^n p_{i-1/2}^n, \quad (84)$$

$$F_{i+1/2,i}^n = -\Omega_i^n p_{i+1/2}^n, \quad (85)$$

$$\frac{r_i^{n+1} - r_i^n}{\Delta t} = u_i^{n+1/2}, \quad (86)$$

$$m_i \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = F_i^n = F_{i-1/2,i}^n + F_{i+1/2,i}^n, \quad (87)$$

$$m_{i+1/2} \frac{\varepsilon_{i+1/2}^{n+1} - \varepsilon_{i+1/2}^n}{\Delta t} = -F_{i+1/2,i+1}^n u_{i+1}^{n+1/2} - F_{i+1/2,i}^n u_i^{n+1/2}. \quad (88)$$

Vidíme, že zde z numerického hlediska přibyl pouze člen  $\Omega_i^n$  závislý na  $r_i^n$  v definici sil (84), (85), který ale středujeme v čase souběžně s tlaky metodou prediktor–korektor (viz. 2.4.2). Navíc tento člen formálně odpovídá v předešlé kapitole zavedenému koefi-

cientu  $\alpha$  v definici sil (81), (82), takže důkaz konzervativity pro tento člen platí též (člen závisí pouze na poloze, nikoliv na rychlosti či energii).

### 4.3 Model fázového přechodu

Nedílnou součástí lagrangeovského kódu pro simulaci ablace pevnolátkového terče je, jak bylo řečeno, model fázového přechodu. Nejprve musíme definovat fázi výpočetní buňky resp. uzlu, ve které se materiál příslušné buňky/uzlu nachází. Při rozeznávání fází se omezíme velmi přibližně pouze na teplotu nezávisle na tlaku a hraniční hodnoty budou vycházet přímo z hodnot tabulkových (tj. při normálním tlaku). Takovéto ohraničení je hrubé, ale předpokládáme, že se materiál bude nacházet v oblasti fázového přechodu jen velmi krátce a proto jeho přesná poloha nebude hrát větší roli. Aby dělení dobře odpovídalo zavedenému koeficientu pro držení pevné a kapalně fáze  $\alpha$  podle (83), definujeme konkrétně fázi výpočetního uzlu podle něho jako pevnou pro  $\alpha = 0$ , kapalnou pro  $0 < \alpha < 1$  a plynnou pro  $\alpha = 1$ .

Jak je známo z klasické termodynamiky, dochází při fázovém přechodu 1. druhu, jakým jsou změny skupenství, ke skokové změně entropie (při konstantním tlaku a teplotě) doprovázené změnou objemu. Projevem tohoto děje je tzv. *latentní teplo*  $\Delta H$ , které musí být látce dodáno resp. odebráno. Modelování zcela skokového fázového přechodu ovšem není ve své podstatě možné při použití diferenciálního přístupu vývoje termodynamického systému v teplotě. Z tohoto důvodu budeme modelovat fázový přechod s konečnou šířkou v teplotě, kterou označíme  $2A$  (prakticky se osvědčila hodnota  $A = 0.08$  eV). Stejně tak je i parametrizován teplotou s ohledem na definici fází. Celkově cílem modelu není popsat detailně průběh změny fáze, ale zahrnout do simulace důsledky tohoto procesu, konkrétně tedy nezanedbatelné latentní teplo odpařování (bereme tabulkovou hodnotu, např. pro hliník  $\Delta H = 10.9 \cdot 10^{10}$  erg/g). Latentní teplo tání (tím i model tání) naopak zanedbáme zcela, protože je řádově menší než u odpařování.

#### 4.3.1 Numerické schéma

Principiálně jsou v tomto modelu rozděleny celkové příspěvky ke specifické vnitřní energii  $\Delta\tilde{\varepsilon}$  na část plynoucí do specifické vnitřní energie  $\Delta\varepsilon$  a na část přispívající ke změně fáze  $\Delta\varepsilon_f$ :

$$\Delta\tilde{\varepsilon} = \Delta\varepsilon_f + \Delta\varepsilon . \quad (89)$$

Integrál příspěvků  $\Delta\varepsilon_f(T)$  by pak měl dávat právě latentní teplo odpařování  $\Delta H$ . Skokovou funkci (Heavisideovu) představující ideální průběh  $\varepsilon_f(T)$  zde aproximujeme spojitě sinem podle následujícího předpisu:

$$\varepsilon_f(T) = \begin{cases} 0 & T < T_b - A \\ \frac{\Delta H}{2}(\sin(\frac{\pi}{2}(T - T_b)/A) + 1) & |T - T_b| < A \\ \Delta H & T > T_b + A \end{cases} . \quad (90)$$

Po linearizaci příspěvků  $\Delta\tilde{\varepsilon}$  ve veličinách používaných ve schématu, tj. teplotě a hustotě, dostáváme:

$$\Delta\tilde{\varepsilon} \approx \varepsilon_{fT}\Delta T + \varepsilon_T\Delta T + \varepsilon_\rho\Delta\rho, \quad (91)$$

kde  $\varepsilon_{fT} = d\varepsilon_f/dT$ ,  $\varepsilon_T = (\partial\varepsilon/\partial T)_\rho$  a  $\varepsilon_\rho = (\partial\varepsilon/\partial\rho)_T$ .

Po úpravě získáváme předpis pro změnu  $\varepsilon_f$ :

$$\Delta\varepsilon_f = (\Delta\tilde{\varepsilon} - \varepsilon_\rho\Delta\rho) \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon_T}{\varepsilon_{fT}}}, \quad (92)$$

který dále diskretizujeme:

$$\varepsilon_{f_{i+1/2}}^{n+1} - \varepsilon_{f_{i+1/2}}^n = \left( \Delta\tilde{\varepsilon}_{i+1/2}^n - \varepsilon_{\rho_{i+1/2}}^n (\rho_{i+1/2}^{n+1} - \rho_{i+1/2}^n) \right) \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon_{T_{i+1/2}}^n}{\varepsilon_{f_{T_{i+1/2}}^n}}}. \quad (93)$$

Příspěvek  $\Delta\tilde{\varepsilon}_{i+1/2}^n$ , který zde vystupuje, představuje rozdíl  $\varepsilon_{i+1/2}^{n+1} - \varepsilon_{i+1/2}^n$  podle původního vztahu pro změnu vnitřní energie (39), který nyní už ve schématu jako celek nevyužijeme.

Dále  $\varepsilon_{f_{T_{i+1/2}}}^{n+1/2}$  značí, že je veličina počítána z korigované teploty  $T_{i+1/2}^{n+1/2}$  metodou prediktor–korektor podobně jako jiné veličiny zmíněné v 2.4.2. Ostatní derivace vycházející ze stavové rovnice ( $\varepsilon_\rho$ ,  $\varepsilon_T$ ) se počítají na časové hladině  $n$ , protože se předpokládá jen jejich malá změna, a snižuje se takto výpočetní náročnost.

Celkově jsme tak obdrželi explicitní vztah pro  $\varepsilon_{f_{i+1/2}}^{n+1}$  a tím i pro  $\varepsilon_{i+1/2}^{n+1}$ , protože pro dodržení konzervativity podle (89) použijeme:

$$\Delta\tilde{\varepsilon}_{i+1/2}^n = \left( \varepsilon_{f_{i+1/2}}^{n+1} - \varepsilon_{f_{i+1/2}}^n \right) + \left( \varepsilon_{i+1/2}^{n+1} - \varepsilon_{i+1/2}^n \right). \quad (94)$$

Tímto máme tedy rozšířeno numerické schéma hydrodynamického kroku. Výhodou tohoto přístupu je, že pokud je  $\varepsilon_{T_{i+1/2}}^n \ll \varepsilon_{f_{T_{i+1/2}}}^{n+1/2}$  v oblasti fázového přechodu, tak bez problémů může většina dodané energie laserem přejít přímo do  $\varepsilon_f$ .

Rozšířit musíme odpovídajícím způsobem také krok vedení tepla. To provedeme redefinicí koeficientu  $a$  (60) následovně:

$$a = \rho(\varepsilon_T + \varepsilon_{fT}). \quad (95)$$

Po provedení kroku vedení tepla pak musíme navíc dopočítat novou hodnotu  $\varepsilon_f$  podle:

$$\Delta\varepsilon_f = \varepsilon_{fT}\Delta T, \quad (96)$$

resp. po diskretizaci:

$$\left( \varepsilon_{f_{i+1/2}}^{n+1} - \varepsilon_{f_{i+1/2}}^n \right) = \varepsilon_{f_{T_{i+1/2}}}^n \left( T_{i+1/2}^{n+1} - T_{i+1/2}^n \right). \quad (97)$$

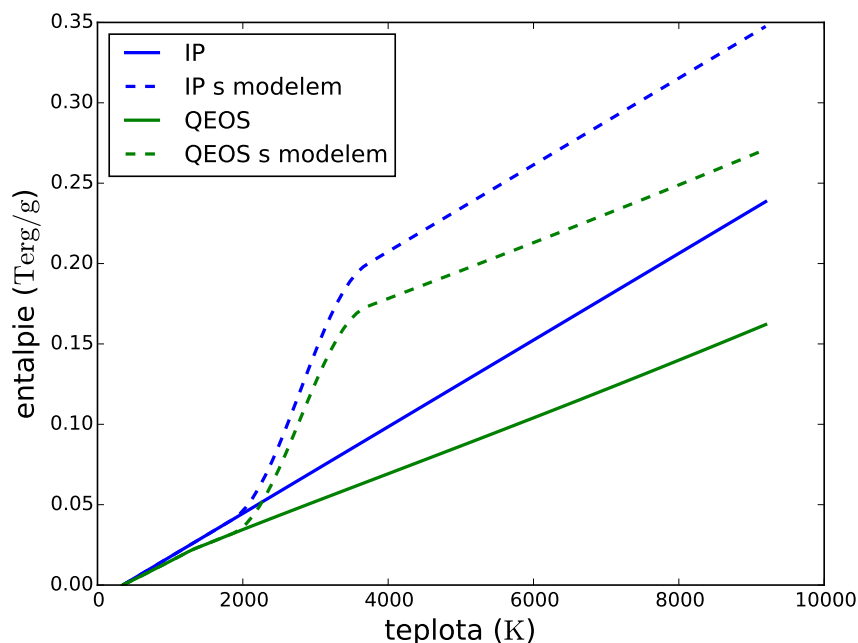
Zřejmým problémem nicméně je, že jsme zde použili  $\varepsilon_{fT}$  v časové hladině  $n$  a pouze linearizovanou změnu  $\varepsilon_f$  a to i přesto, že teoreticky máme k dispozici teplotu  $T^{n+1}$ . Jinak postupovat však nemůžeme, protože schéma vedení tepla (viz. 3.2.1) předpokládá konstantnost koeficientu  $a$ , což musíme dodržet, aby schéma bylo konzerva-



tivní, čímž musí být konstantní i  $\varepsilon_{fT}$ .

### 4.3.2 Aplikace

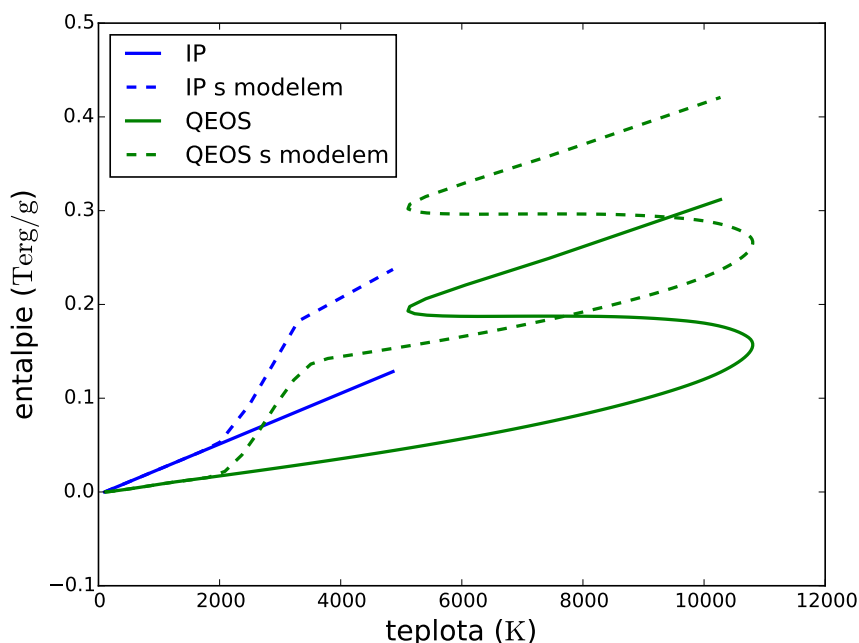
Průběh entalpie při isochorickém ohřevu (Obr. 13) ukazuje tvar fázového přechodu při použití vytvořeného modelu při (obvykle v práci používané) šířce přechodu  $A = 0.08$  eV a s tabulkovými konstantami odpovídajícími hliníku (hustota  $2.7 \text{ g/cm}^3$ ). Vynášené hodnoty jsou získané ze stavové rovnice, definice  $\varepsilon_f$  (90) a definice měrné entalpie  $h = \varepsilon + p/\rho$ . Z grafu vidíme, že model při těchto parametrech vytváří hladký přechod, který je přijatelně široký.



Obrázek 13: Entalpie v závislosti na teplotě při isochorickém ohřevu hliníku s/bez modelem fázového přechodu

Dalším zkoumaným termodynamickým procesem je isobarická expanze hliníku (Obr. 14) při tlaku 3 kbar, hustotě od  $3.0 \cdot 10^{-2} \text{ g/cm}^3$  do  $2.75 \text{ g/cm}^3$  a jinak stejném nastavení jako v předešlém případě. Opět je patrný vliv modelu fázového přechodu u obou stavových rovnic.

Mimo to se zde ovšem projevuje zásadní nedokonalost stavové rovnice QEOS v oblasti fázového přechodu mezi kapalným a plynným skupenstvím. Protože stavová rovnice vychází z výpočtů Helmholtzovy volné energie, vznikají v tomto místě nefyzikální *Van der Waalovy smyčky* [30], které jsou zřetelné v pravé části grafu. Jejich odstranění by znamenalo netriviální zásah do stavové rovnice a její speciální úpravu v oblasti fázového přechodu například podle článku [31], kde nalezneme i experimentálně ověřené srovnání pro graf izobarické expanze hliníku (Obr. 14). Námi navržený model je bohužel velmi přibližný a empirický, navíc s fixní polohou fázového přechodu,

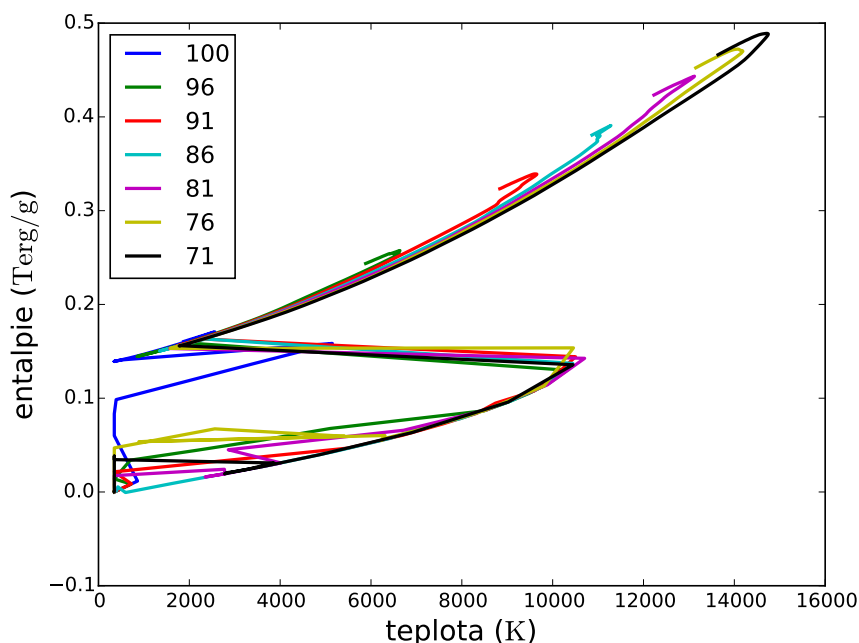


Obrázek 14: Entalpie v závislosti na teplotě při isobarické expanzi hliníku s/bez modelem fázového přechodu

takže nedokáže Van der Waalovy smyčky odstranit a naopak působí spíše „aditivně“. Z tohoto důvodu není nikdy v simulacích v této práci zapnut model fázového přechodu při současném použití stavové rovnice QEOS.

Poznamenejme, že mimo jiné je také v grafu patrné, že stavová rovnice ideálního plynu dává oproti stavové rovnici QEOS značně rozdílné hodnoty, přestože expanze probíhala v totožných mezích.

Problém Van der Waalových smyček bohužel není pouze hypotetický, materiál terče se při použití laserů s nižší intenzitou nezahřívá dostatečně, aby překročil *kritický bod*, kde by zákonitě Van der Waalovy smyčky vymizely stejně jako latentní teplo odpařování. Existenci smyček za reálných podmínek dokládá graf entalpie v závislosti na teplotě při experimentu podle [48] (Obr. 15). Jsou zde vynášeny křivky odpovídající jednotlivým výpočetním buňkám v různých časech (rovnoměrně vzorkované od počátku do konce experimentu). Kromě poslední buňky (sté), která je na rozhraní vakua, procházejí všechny buňky téměř totožnou Van der Waalovou smyčkou. Ta má za následek nefyzikální chování v této oblasti a tím i vznik poruch a numerických nepřesností, protože křivky rozhodně nelze považovat za hladké. Z tohoto důvodu nemá větší smysl vyhodnocovat průběh experimentu během pulzu u těchto laserů přinejmenším poblíž povrchu terče.



Obrázek 15: Entalpie v závislosti na teplotě během experimentu podle [48] s energií laseru  $7.2 \text{ J/cm}^2$  (legenda udává čísla sledovaných výpočetních buněk)

#### 4.4 Reinitializace simulace

Poslední metodou doplňující držení pevné a kapalně fáze (kapitola 4.1) a také model fázového přechodu (kapitola 4.3) je reinitializace simulace. Po ablaci materiálu z povrchu terče vzniká plazmový oblak, který se dále šíří a který chceme především zkoumat v této práci, ale také vzniká oblast nataveného materiálu terče, který po skončení laserového pulzu chladne a měl by ztuhnout. To se však neděje (z pohledu očekávaného mechanického chování), protože i přes pokles teploty model držení nedokáže pohybující se výpočetní uzly zastavit. Model totiž dává dobrý smysl pouze pokud předpokládáme nulovou počáteční rychlost a tavení materiálu, opačný proces tuhnutí z nenulové rychlosti bohužel možný není, protože model podle (81), (82) způsobuje pouze omezení akcelerace a nikoliv vznik nezávislé decelerace.

Řešením je právě použití reinitializace simulace, kdy při poklesu intenzity laseru pod určitou prahovou úroveň v čase  $t_p$  (obvykle je pro gaussovský časový profil pulzu práh dán časově jako  $t_p = t_0 + 2\tau$ ) lze předpokládat, že už materiál terče se při takto nízké intenzitě laseru nebude dále odpařovat a naopak bude postupně chladnout (viz. kapitola 5.5). Pak reinitializujeme simulaci tím způsobem, že výsledek v tomto čase  $t_p$  použijeme jako počáteční podmínku nové simulace ovšem s tou úpravou, že nastavíme nulovou rychlost všem kapalným výpočetním uzlům a zároveň jim (každému jednotlivě) znemožníme budoucí pohyb okrajovou podmínkou na nulovou rychlost v pozici každého uzlu. Tímto postupem se stává terč pro zbytek simulace kompletně nehybný a zabránili jsme tak nereálné expanzi kapalně fáze a přibližně nastolili stav po ztuhnutí povrchu terče (z mechanického pohledu). Takovýto zásah není konzervativní, ale výhodou je, že

dochází pouze k jednorázové ztrátě energie (obvykle menší než 1 % celkové energie), kterou můžeme přímo vyčíslit, protože se jedná o součet kinetických energií uzlů:

$$E_{ztrata} = \sum_{i \in \{\text{kapalné uzly}\}} \frac{1}{2} m_i u_i^2 . \quad (98)$$

Důležitým předpokladem pro tento zásah je to, že tím neovlivníme významně další vývoj simulace ve smyslu expanze plazmatu, který je hlavním předmětem popisu v této práci. Po skončení laserového pulzu je už totiž plazmový oblak zformován a výměna tepla je minimální vzhledem k tvaru koeficientu vedení tepla v plazmatu (51) a nižší teplotě u povrchu terče v tomto čase (viz. výsledky v kapitole 5).

Mimo to můžeme pro snížení výpočetní náročnosti s přihlédnutím k nízké intenzitě laseru zcela vyřadit model jeho absorpce. Stejně tak můžeme učinit i u modelu držení kapalné fáze, protože se v simulaci už nevyskytují žádné kapalné výpočetní buňky. Nicméně poznamenejme, že ostatní součásti zůstávají nadále v činnosti, takže dochází korektně k vedení tepla v terči nebo zachování celkové energie zahrnující  $\varepsilon_f$ .

## 5 Simulace laserové ablace a expanze plazmatu

V této kapitole je aplikováno dříve popsané numerické schéma na reálné úlohy laserové ablace a expanze. Tyto děje tvoří podstatnou část průběhu metody PLD (viz. kapitola 1) a kromě první podkapitoly, která se zabývá pouze samotnou expanzí, se zde jedná přímo o počítačové experimenty metody PLD.

### 5.1 Expanze do vakua

Expanze do vakua představuje úlohu, kdy je počáteční podmínkou oblast s homogenními vlastnostmi, nulovou počáteční rychlostí a okrajovou podmínkou na jedné straně na nulovou rychlost a naopak na druhé straně na nulový tlak. V průběhu simulace pak dochází k expanzi na straně vakua a šíření vlny zředění v opačném směru. Vedení tepla zde není použito vůbec a díky okrajovým podmínkám je termodynamický systém celkově izolovaný. Tato úloha tak napodobuje (z hlediska hydrodynamiky) adiabatickou expanzi plazmového oblaku do vakua během počítačového experimentu simulace pulzní laserové depozice [20].

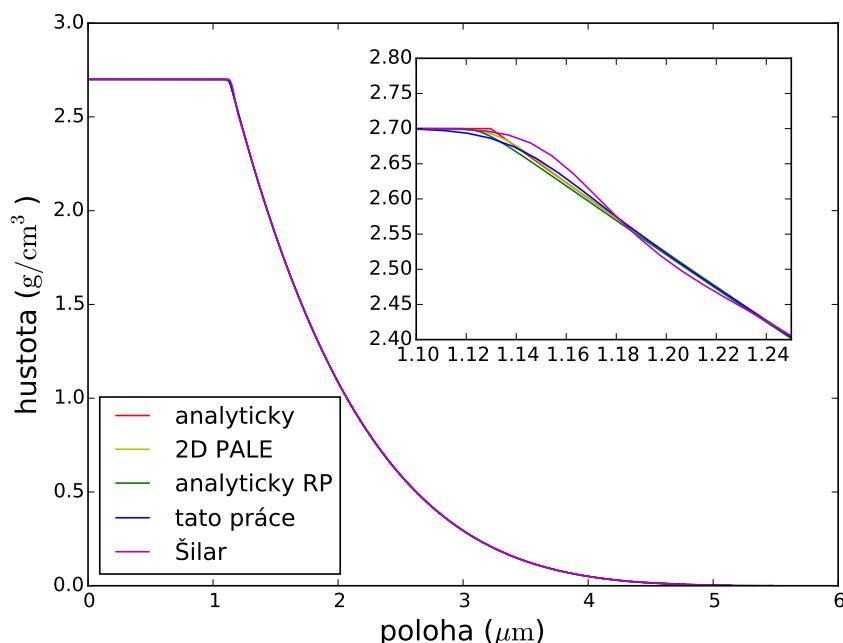
Konkrétně v simulaci byla nastavena počáteční podmínka na hustotu  $\rho = 2.7 \text{ g/cm}^3$  a teplotu  $T = 0.03 \text{ eV}$ . Výpočetní mříž čítala  $N = 400$  výpočetních buněk nerovnoměrně rozmístěných v počátečním intervalu od  $x_{min} = 0 \text{ cm}$  do  $x_{max} = 2 \text{ }\mu\text{m}$ . Použita byla stavová rovnice ideálního plynu podobně jako v kapitole 2.5, zde s parametry pro plně ionizovaný hliník a  $\gamma = 1.4$ .

Řečené nerovnoměrné rozmístění výpočetních buněk resp. uzlů se řídí tzv. mřížkovým koeficientem, který v tomto případě má hodnotu  $C_g = 0.99$ . Polohy uzlů s indexy 0 až  $N$  jsou pak dány předpisem:

$$x_i = x_{min} + (x_{max} - x_{min}) \frac{C_g^i - 1}{C_g^N - 1}. \quad (99)$$

V čase  $t = 600 \text{ ps}$  bylo provedeno srovnání závislosti hustoty na prostorové souřadnici (Obr. 16). K porovnání posloužil výsledek algoritmu analytického řešení expanze do vakua implementovaného podle [35] (označeno „analyticky“), dvourozměrný PALE kód [49], dále obecnější algoritmus analytického řešení Riemannova problému (viz. 2.5.1; zde označeno „analyticky RP“) a také lagrangeovský kód z práce Šilara [44]. Vidíme, že všechny kódy se liší pouze nepatrně v okolí čela vlny zředění (zvětšeno ve výřezu), kde se ale projevuje též detailní nastavení umělé viskozity. Nicméně lze říci, že lagrangeovský kód sestavený v této práci dosahuje i při relativně nízkém počtu buněk (tj. 400; PALE a analytické řešení Riemannova problému měly 1000 buněk, analytické řešení expanze do vakua 400 buněk, Šilarův kód 700 buněk) dobrých výsledků bez vzniku překmitů.

Pokud vezmeme jako referenční hodnoty výsledky analytického řešení, můžeme chybu lagrangeovského kódu přesně kvantifikovat. Srovnání je provedeno v tabulce výše (Tab. 10) pro různé počty výpočetních buněk sítě. Vidíme zde, že obě chyby monotónně klesají, přičemž u  $L_1$  chyby je pokles vždy větší než prvního řádu (v závislosti na počtu buněk) a spíše konverguje k druhému řádu. Naopak maximová chyba  $L_\infty$  klesá pomaleji a konverguje spíše k prvnímu řádu. Celkově tedy výsledky můžeme shrnout tak, že ve



Obrázek 16: Závislost hustoty na poloze při expanzi do vakua v čase  $t = 600$  ps

většině výpočetní oblasti konverguje simulace k referenčnímu řešení téměř s druhým řádem, což se odráží zejména v  $L_1$  chybě. Výjimku tvoří pouze čelo vlny zředění, kde je analytické řešení spojitě avšak nehladké, čímž je zhoršena konvergence v tomto místě a jelikož chyba zde vzniklá převyšuje ostatní, odráží se toto chování v maximové chybě  $L_\infty$ . Dalším důležitým výsledkem je, že ve všech případech se chyba v zachování celkové energie pohybovala na úrovni strojové přesnosti.

Tabulka 10: Srovnání chyb v hustotě při expanzi do vakua

počet buněk	$L_1$ chyba	řád	$L_\infty$ chyba	řád
10	$2.46 \cdot 10^{-2}$	1.20	$6.90 \cdot 10^{-2}$	0.76
20	$1.08 \cdot 10^{-2}$	1.09	$4.07 \cdot 10^{-2}$	0.31
40	$5.05 \cdot 10^{-3}$	1.27	$3.28 \cdot 10^{-2}$	0.90
80	$2.09 \cdot 10^{-3}$	1.54	$1.76 \cdot 10^{-2}$	0.92
160	$7.17 \cdot 10^{-4}$	1.89	$9.32 \cdot 10^{-3}$	0.92
320	$1.93 \cdot 10^{-4}$		$4.94 \cdot 10^{-3}$	

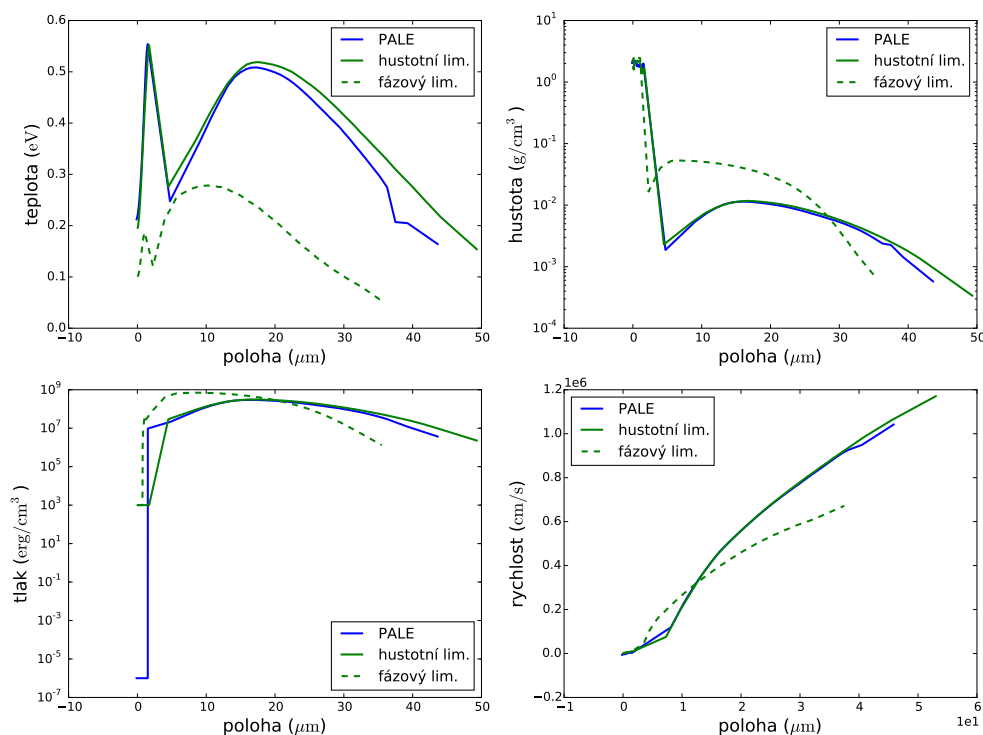
## 5.2 Jednoduchá ablace – porovnání s PALE

Doposud prováděné testy (kapitola 5.1, 2.5) vždy obsahovaly stavovou rovnici ideálního plynu a veskrze fyzikálně nereálné podmínky. Z tohoto důvodu byla vytvořena úloha ablace pevného terče ve vakuu za reálných podmínek odpovídajících PLD

a se stavovou rovnicí QEOS, v simulaci se tak využijí téměř všechny implementované součásti schématu. Pro porovnání byl použit zavedený dvourozměrný kód PALE podobně jako v předešlé kapitole. Aby byly výsledky porovnatelné, bylo však nutné se omezit na model absorpce na kritické hustotě (viz. kapitola 3.1.2).

Počáteční podmínku tvoří do počátku umístěný hliníkový terč o tloušťce  $d = 1.3 \mu\text{m}$  a teplotě  $T = 0.03 \text{ eV}$ . Výpočetní síť obsahuje 100 buněk nerovnoměrně rozmístěných s mřížkovým koeficientem 0.96. Vedení tepla je použito včetně omezení tepelného toku ( $f^{max} = 0.05$ ) a omezení koeficientu tepelné vodivosti  $\kappa$  v terči. Model držení pevné a kapalné fáze je nastaven na  $A = 0, B = 1, E = 1$ , takže koeficient  $\alpha$  má lineární průběh v teplotě (obdobný model je implementován i v kódu PALE).

Předpokládaným zdrojem laserových pulzů je Nd:YAG na 4. harmonické, který má vlnovou délku  $\lambda = 0.266 \mu\text{m}$ . Svazek je fokusován do spotu o poloměru  $r_d = 1.0 \text{ mm}$ . Laserový pulz má šířku FWHM  $\tau = 3.0 \text{ ns}$  a posunutí oproti startu simulace  $t_0 = 4.0 \text{ ns}$ , přičemž celková energie v pulzu je  $E_L = 100 \text{ mJ}$ . Pro absorpci na kritické hustotě je použita hodnota koeficientu absorpce  $C_a = 0.95$  (přibližně odpovídá absorpci s modelem založeným na řešení Maxwellových rovnic). Poznamenejme, že tyto parametry jsou velmi vzdáleny podmínkám PALS (Prague Asterix Laser System), pro které je kód PALE navržen, takže lze očekávat menší problémy tím vzniklé.

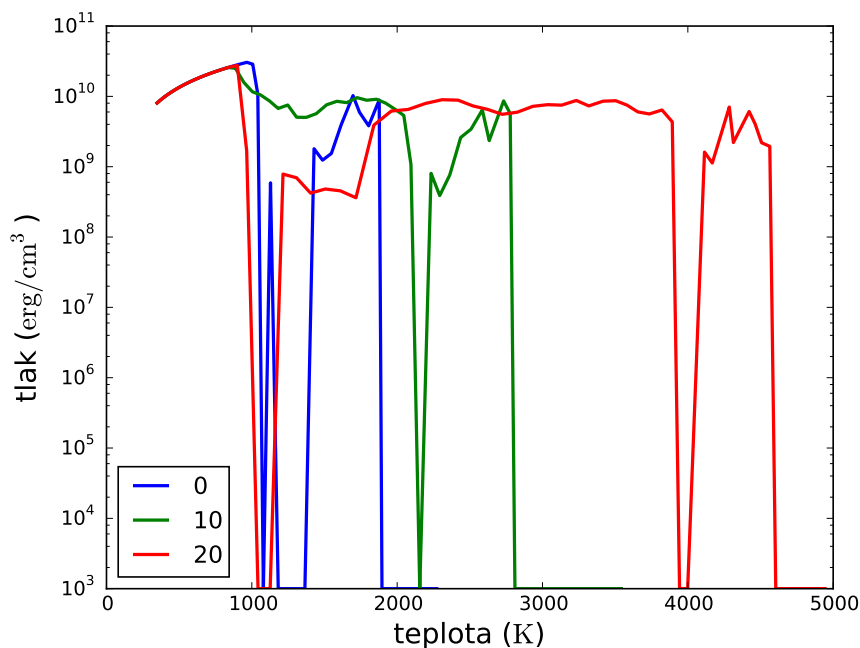


Obrázek 17: Porovnání výsledků simulace podle této práce a PALE kódu v čase 8 ns

Pro finální čas simulace  $t = 8 \text{ ns}$  bylo provedeno srovnání obou kódů (Obr. 17). Ukázalo se, že oba kódy omezují koeficient tepelné vodivosti  $\kappa$  v terči podobným způso-

bem, ale za jiných podmínek. V této práci je omezení tabulkovou hodnotou aplikováno na výpočetní buňky definované jako pevné či kapalné podle jejich teploty (viz. kapitola 3.2 a 4.3), ale kód PALE používá jinou metodiku a omezení koeficientu  $\kappa$  se týká buněk s hustotou nad  $0.05 \text{ g/cm}^3$ . Vzhledem k tomuto jsou v grafu uvedeny dvě varianty, kdy varianta označená jako „fázový lim.“ odpovídá původnímu návrhu schématu s rozlišením podle fáze buňky a varianta „hustotní lim.“ naopak rozeznává oblast terče podle hustoty podobně jako kód PALE.

Vidíme, že pokud je způsob omezení koeficientu  $\kappa$  shodný, jsou výsledky velmi podobné. Vzniká plazmový oblak, který se šíří vysokou rychlostí. U PALE se vyskytuje u čela oblaku menší porucha, která pochází z počátku simulace a proto nemá větší význam. Za povšimnutí celkově spíše stojí propad tlaku poblíž počátku způsobený Van der Waalsovými smyčkami, který je díky malé simulované tloušťce terče (ne zcela reálné) dobře patrný, protože se částečně zahřívá celý terč. Rozdílná hodnota minima je dána čistě technicky nastavením minimálního tlaku a zkosení hrany skoku v tlaku pak je pouze dáno rozlišením sítě v daném místě. Situace v okolí počátku je také zachycena v dalším grafu (Obr. 18), kde jsou zcela jasně vidět propady tlaku okolo teploty tání a teploty varu.



Obrázek 18: Pohyb v p-T prostoru vybraných výpočetních buněk terče (legenda označuje čísla sledovaných výpočetních buněk).

Vrátíme-li se k prvnímu grafu (Obr. 17), bohužel shledáváme, že jsou značné rozdíly ve výsledcích v závislosti na zvoleném kritériu definice oblasti s omezenou hodnotou koeficientu  $\kappa$  na tabulkovou hodnotu. Ani jedna metoda není ideální a obě značně zjednodušují fyzikální podstatu problému stejně jako samotné omezení konstantou, ale z důvodu zachování dobré kompatibility a jednotnosti s ostatními zde používanými mo-



děly budeme v této práci preferovat původní návrh s rozlišením podle teploty buňky. Jak ukáží následující kapitoly, sestavený model bude pak dávat velmi reálné výsledky.

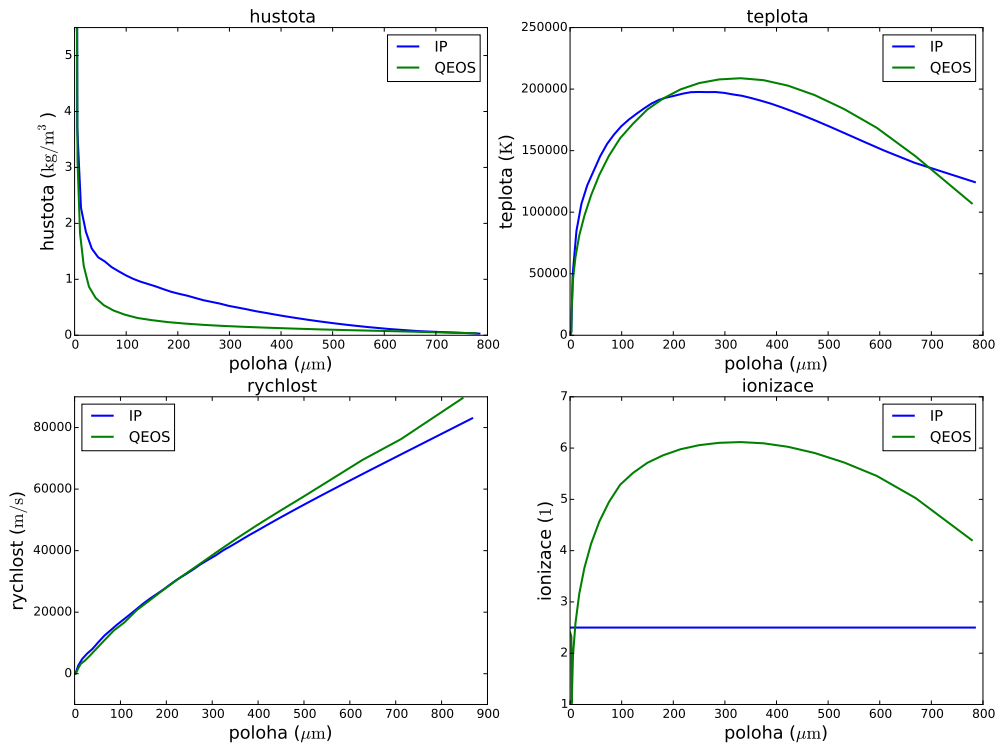
### 5.3 Experiment: Wu, Shin (2007)

Tato úloha se zabývá ablací pevného kovového terče s použitím nanosekundového laseru s vysokou intenzitou podle článku [18], kde autoři též používají stavovou rovnici QEOS a hydrodynamický přístup. Předpokládají totiž, že při ablací bude vzhledem k vysoké intenzitě laseru překonán kritický bod a je proto vhodné použití přímého hydrodynamického popisu během ablace. Stejně také rozdělují simulaci na dvě části v určitém čase (16 ns), kde první část je také jednorozměrná simulace rovnic hydrodynamiky. V druhé části ovšem přecházejí k analytickému modelu adiabatické expanze plazmového oblaku ve formě elipsoidů podle [20], ale v této práci se používá v druhé části totožný model jako v první, pouze jsou lokálně pozměněny některé veličiny a parametry (viz. kapitola 4.4).

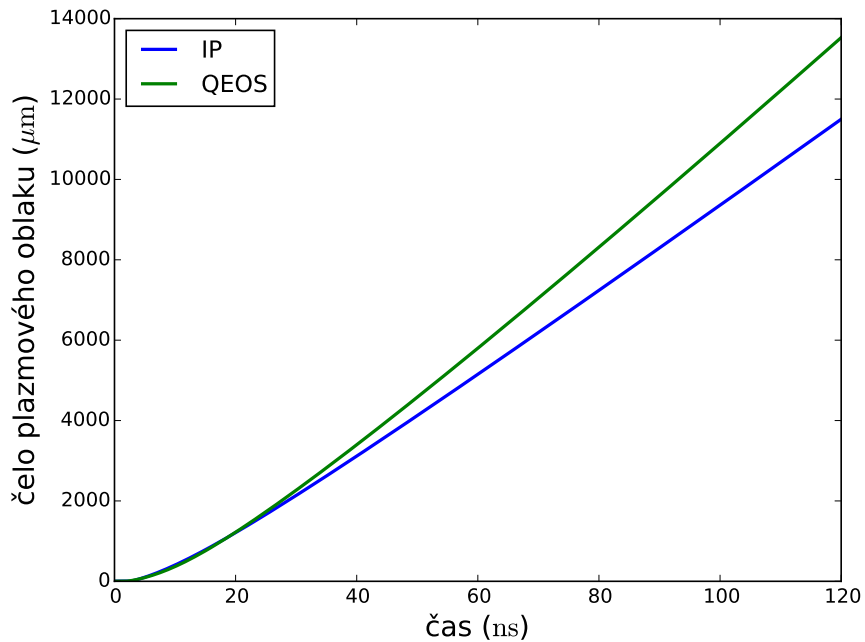
Simulace ablace probíhá s hliníkovým terčem o tloušťce  $d = 2.5 \mu\text{m}$  s počáteční pokojovou teplotou. Výpočetní síť je opět tvořena 100 výpočetními buňkami nerovnoměrně rozmístěnými s mřížkovým koeficientem 0.96. Čistě pro srovnání byla použita kromě stavové rovnice QEOS též stavová rovnice ideálního plynu (IP) s  $\gamma = 5/3$  a ionizací  $Z = 2.5$  odpovídající střední ionizaci terče. Schéma vedení tepla je použito s omezením koeficientu tepelné vodivosti i omezením tepelného toku ( $f^{max} = 0.01$ ). Dále model fázového přechodu je aplikován pouze se stavovou rovnicí ideálního plynu (viz. kapitola 4.3) a držení pevné a kapalně fáze je pro IP nastaveno  $A = 0.08$ ,  $B = 1.0 \cdot 10^{-5}$ ,  $E = 3.0$ , pro QEOS je nastavení stejné jako v předešlé kapitole. Laserový svazek má v tomto případě vlnovou délku  $\lambda = 1.06 \mu\text{m}$  a laserový pulz šířku FWHM  $\tau = 8.0 \text{ ns}$  s posunutím  $t_0 = 8.0 \text{ ns}$  a špičkovou intenzitou  $I_{max} = 4 \text{ GW/cm}^2$ . Koncový čas první části simulace je zmíněných  $t_1 = 16 \text{ ns}$  a druhé části  $t_2 = 120 \text{ ns}$ .

Výsledky první části simulace (Obr. 19) vykazují velmi dobrou shodu s grafy uvedenými v článku. Při ablací vzniká oblak plazmatu, který velmi rychle expanduje a překonává vzdálenost řádově stovek mikronů. Vzhledem k vysoké intenzitě dopadajícího laseru je také relativně vysoká teplota plazmového oblaku oproti ostatním počítačovým experimentům stejně tak jako rychlost. Všechny závislosti veličin jsou velice podobné těm uvedeným v článku, jistou odlišnost však nacházíme v prostorovém profilu veličin. Zde oblak expanduje neomezeně a důsledkem toho klesá hustota v jeho čele k nule, takže poslední buňka se vyskytuje okolo hranice  $800 \mu\text{m}$ . V článku ovšem nejspíše důsledkem určité blíže nespécifikované okrajové podmínky dochází ke kumulaci hmoty a tvorbě ostré hrany v hustotě a rychlosti už poblíž  $640 \mu\text{m}$ . Následkem toho se mírně liší i profil teploty a ionizace, kde tady má teplota a ionizace tendenci pozvolna klesat dále od terče, ale v článku klesají tyto veličiny prudce k nule u dříve zmíněné hranice. Nicméně jedná se pouze o otázku okrajové podmínky a jinak můžeme zhodnotit simulovaný průběh počítačového experimentu za správný.

Dále stojí za povšimnutí, že i simulace se stavovou rovnicí ideálního plynu dává přibližně správné výsledky, přestože má konstantní ionizaci a celkově je fyzikálně značně zjednodušující. Velký vliv zde má právě volba ionizace nastavené na hodnotu střední ionizace terče, díky tomu jsou přibližně správně termodynamické veličiny během ablace



Obrázek 19: Srovnání výsledků simulací se stavovou rovnicí IP a QEOS v čase  $t = 16$  ns



Obrázek 20: Vývoj polohy čela plazmového oblaku se stavovou rovnicí IP a QEOS

a také absorpce laserového záření. Pokud byla zvolena jiná hodnota ionizace, výsledky se značně oddalovaly.

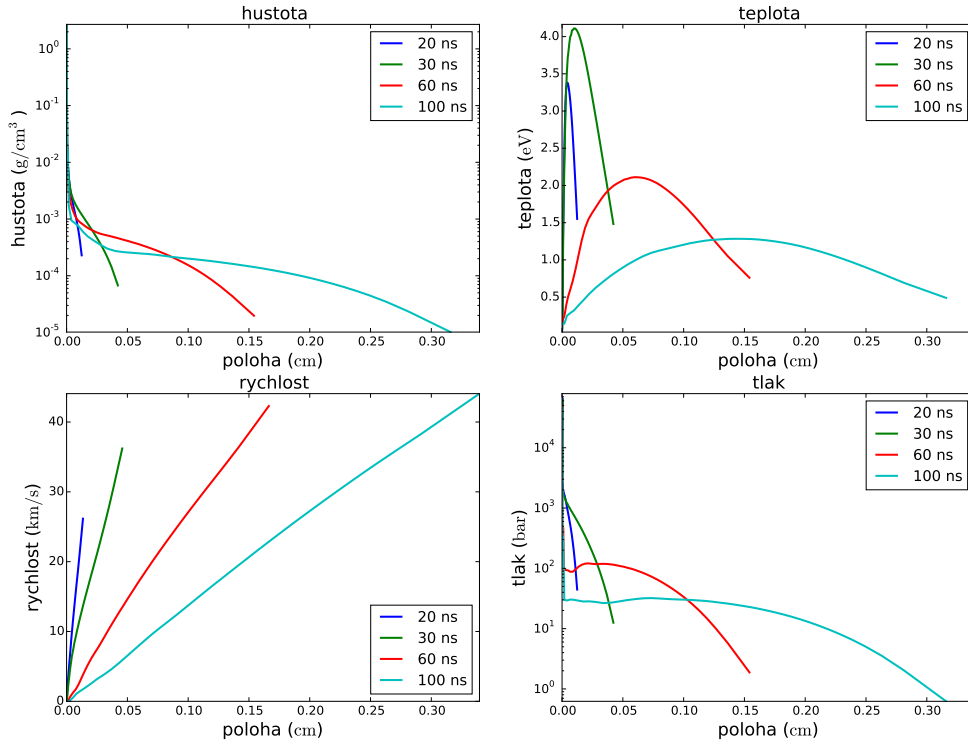
Z druhé části simulace můžeme porovnávat s článkem průběh polohy čela plazmového oblaku (Obr. 20), kterou definujeme jako polohu posledního výpočetního uzlu. Ačkoliv zde používáme stále jednorozměrnou simulaci na rozdíl od článku, kde je dvourozměrný analytický výpočet, dostáváme relativně podobné výsledky. Zde se jednorozměrným přístupem zachovává vyšší rychlost oblaku, protože nedochází k expanzi v kolmém směru na souřadnou osu, ale i tak není odchylka velká. Praktickým nedostatkem je, že u přímého výpočtu se stavovou rovnicí QEOS je délka výpočtu mnohokrát delší než lze očekávat u analytického výpočtu. Z grafu také vyplývá, že je zdánlivě simulace se stavovou rovnicí IP blíže článku, ale pravděpodobně bychom porovnáním dalších veličin, které bohužel nejsou v článku uvedeny, zjistily, že celkově tomu tak není, protože už v první části simulace se např. hustota a teplota nezanedbatelně lišily.

## 5.4 Experiment: Mazhukin, Nosov (2005)

V tomto (počítačovém) experimentu podle článku [15] se využívá KrF laseru, takže ablace probíhá s dopadajícím zářením v UV oblasti. Oproti předešlé kapitole má laser nižší intenzitu a autoři tak předpokládají podkritickou změnu fáze, takže striktně rozdělují simulaci pro pevný terč a zvláště pro ionizovaný plyn. Jelikož zde je popis jednotně hydrodynamický, projeví se vytvořená rozšíření schématu jako model držení pevné a kapalné fáze nebo omezení koeficientu tepelné vodivosti v terči, které upravují chování simulovaného kontinua tak, aby fyzikálně odpovídalo jednotlivým skupenstvím látky.

Terč je opět hliníkový o tloušťce  $d = 2.5 \mu\text{m}$ . Parametry výpočetní sítě a stejně tak ostatní parametry jsou stejné jako v předešlé kapitole. Vlnová délka laseru je v tomto případě  $\lambda = 0.248 \mu\text{m}$  a šířka pulzu (FWHM)  $\tau = 20 \text{ ns}$  při posunutí  $t_0 = 20 \text{ ns}$ . Velikost spotu bereme  $r_d = 0.25 \text{ mm}$  a špičkovou intenzitu  $I_{max} = 0.5 \text{ GW/cm}^2$ .

Grafy veličin v rozdílných časech (Obr. 21) ukazují relativně dobrou shodu s výsledky v článku, pokud uvažíme, že profil rychlosti nemůže přesně nabývat tvaru uvedeného v článku (přecházejícího od pilovitého profilu v kratších časech k trojúhelníkovému v časech delších), protože expanze je zde jednorozměrná a nikoliv dvourozměrná jako v článku (resp. trojrozměrná vzhledem k osové symetrii). Přesto vidíme, že náběh křivek rychlostí v článku přibližně odpovídá sklonu zde vynesných křivek. V hustotě jsou křivky v grafu výše než v článku, což lze přičíst zejména expanzi v kolmém směru na souřadnou osu, kdy stejné množství odpařeného materiálu zaujímá větší prostor a tím je nižší i jeho hustota. Vidíme totiž, že pro kratší časy odpovídají profily téměř naprosto, ale s časem neklesá hustota takovou rychlostí a tím se výsledky oddalují. Zásadně se také do grafu hustoty projevuje to, že v článku není uvažováno dokonalé vakuum, ale zbytková atmosféra o hustotě  $3.0 \cdot 10^{-6} \text{ g/cm}^3$ , takže v čase 100 ns dochází k částečné kumulaci hmoty u čela oblaku. Teplota je zde také mírně vyšší asi o 0.5 eV oproti článku, ale její vývoj v čase odpovídá velmi dobře.



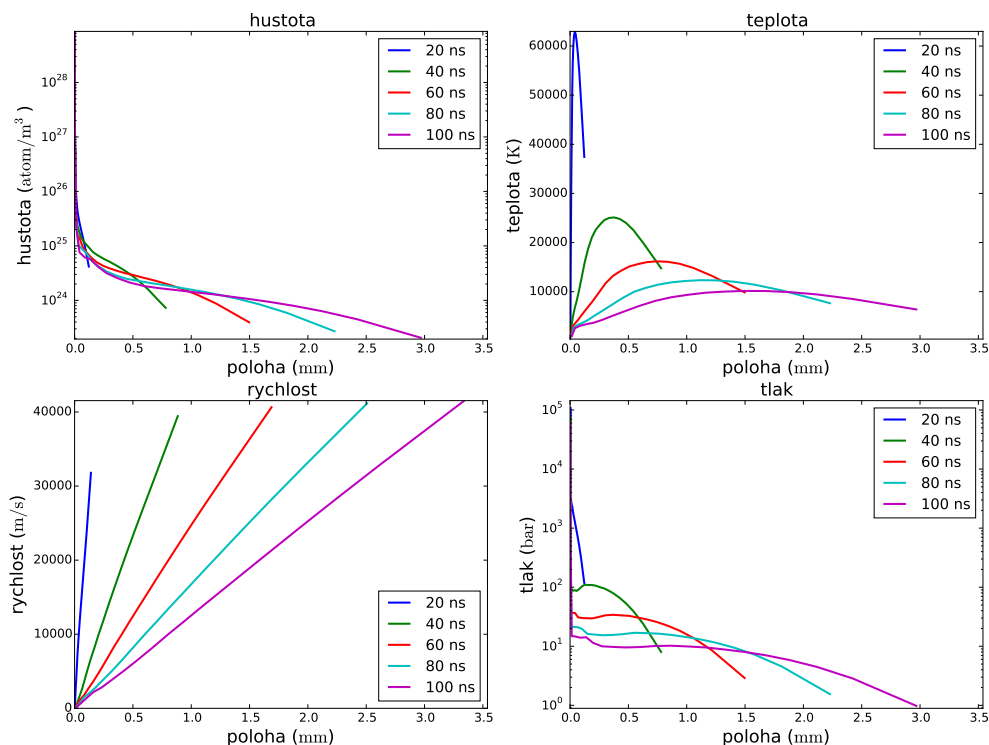
Obrázek 21: Srovnání prostorového průběhu veličin v různých časech

## 5.5 Experiment: Bogaerts et al. (2003)

Podmínky tohoto počítačového experimentu jsou převzaty z [21], kde autoři opět jako u minulého experimentu rozdělují simulaci na několik kroků. Nejprve řeší vedení tepla a absorpci laserového záření, pak tavení a odpařování, ale na závěr používají při expanzi plazmatu jednorozměrný hydrodynamický přístup podobný tomu zde sestavenému. Předností této úlohy je, že výsledky uvedené v článku obsahují nejenom vývoj základních veličin, ale i odvozených veličin v terči, takže můžeme detailněji analyzovat průběh simulace.

Oproti předešlým úlohám je nyní terč měděný, ale tloušťka zůstává  $d = 2.5 \mu\text{m}$  a stejně tak výpočetní síť má stejné parametry. Ostatní parametry jsou rovněž shodné, ale vzhledem k jinému použitému materiálu jsou přenastaveny termodynamické konstanty na příslušné tabulkové hodnoty. Zdroj laserového záření má tentokrát vlnovou délku  $\lambda = 0.266 \mu\text{m}$  při šířce pulzu (FWHM)  $\tau = 10 \text{ ns}$  a stejném časovém posunutí  $t_0 = 10 \text{ ns}$ , reinicializaci simulace provádíme pak symetricky vůči vrcholu pulzu v čase  $t_1 = 20 \text{ ns}$ . Špičková intenzita laseru nyní je  $I_{max} = 1 \text{ GW/cm}^2$ .

Grafy vybraných základních veličin (Obr. 22) vykazují relativně dobrou shodu s výsledky v článku, ale vidíme zde určité nadhodnocení rychlosti a teploty. Odsud lze usuzovat, že byla plazmovému oblaku předána vyšší energie buďto během vypařování a nebo během absorpce laserového svazku v nadkriticky hustém plazmatu. Nicméně

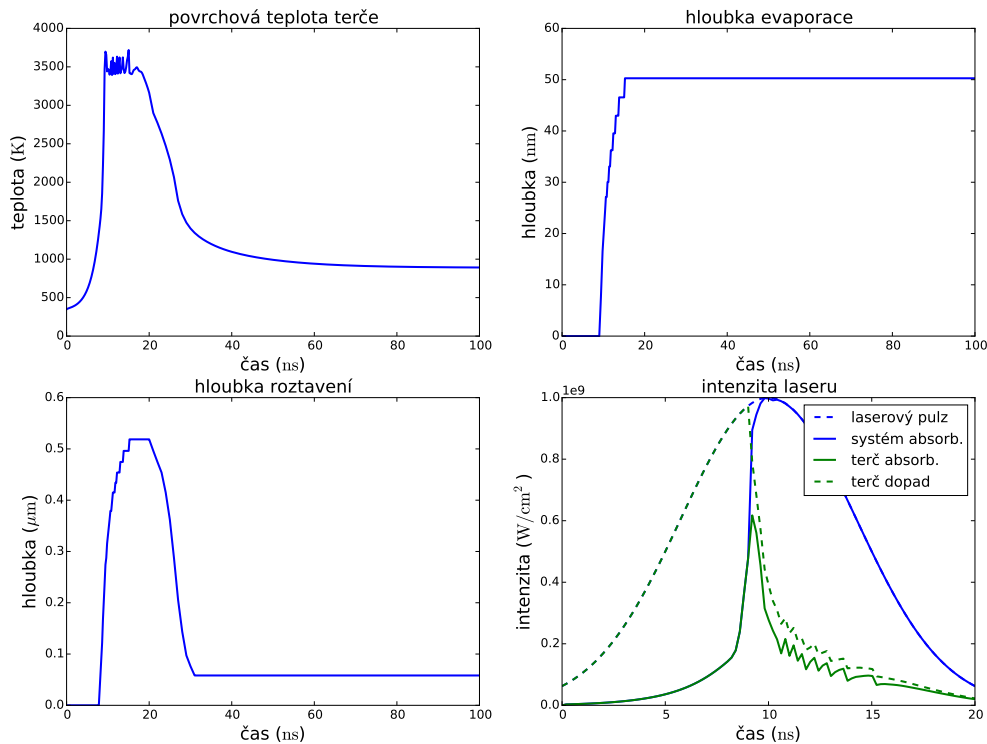


Obrázek 22: Srovnání prostorových závislostí veličin v různých časech simulace (časy jsou posunuty o 5 ns, aby odpovídaly článku, kde je vrchol pulzu v čase 15 ns).

graf hustoty prokazuje, že množství vypařeného materiálu relativně dobře souhlasí. Za zmínku též stojí, že je v grafu teploty patrné, jak během pozdějších fází simulace, kde dochází k poklesu teploty, se snižuje v plazmatu koeficient vedení tepla a tím se nepřenáší teplo mezi plazmovým oblakem a terčem, takže zůstává téměř konstantní teplota v terči.

Graf povrchové teploty (Obr. 23) potvrzuje toto chování, kdy po skončení laserového pulzu v čase  $t_1 = 20$  ns se teplota ustaluje na hodnotě okolo 1000 K. Tato teplota je přibližně o polovinu nižší než v článku, což lze zdůvodnit tím, že model držení pevné a kapalné se řídí pevně danou teplotou varu (viz. kapitola 4.1), ale při ablaci se posouvá bod varu k vyšším hodnotám. Tím je v článku maximum povrchové teploty terče až okolo hodnoty 6500 K a tím také je zde celkově povrchová teplota terče podhodnocena.

Přibližná shoda, ale s mírným podhodnocením je v hloubce odpaření materiálu, kde podle článku by maximum mělo být okolo 70 nm. Začátek odpařování totiž koresponduje s vývojem intenzity laseru (viz. dále) a je tedy o zhruba 5 ns pozdější oproti článku, čímž je nižší i dosažené maximum. Je nutno poznamenat, že zde uvedená křivka je počítána z výchozí polohy výpočetních buněk, které jsou v daném čase identifikovány jako okraj terče, nikoliv přímo z poloh těchto buněk v daném čase. Důvodem je, že model držení kapalné fáze umožňuje poměrně velký pohyb buněk, který by zkresloval závislost. Jedná se tedy v grafu primárně o množství odpařeného materi-



Obrázek 23: Časově rozlišené veličiny terče a dopadajícího laserového záření během ablace

álu spíše než o polohu reálného rozhraní. Na druhé straně je ověřeno srovnáním vývoje této hloubky odpaření, která se v článku také saturuje po skončení pulzu, že metoda reinitializace simulace (kapitola 4.4) je korektní, protože opravdu po skončení pulzu nedochází prakticky k dalšímu odpařování materiálu.

Hloubka roztavení terče je přibližně čtyřikrát nižší než v článku, kde velkou roli hraje pravděpodobně již zmíněná nižší povrchová teplota terče a pozdější zahřívání laserem (viz. dále). Také klesání po skončení pulzu je zde rychlejší, což lze pravděpodobně přisuzovat zjednodušující metodě reinitializace simulace. Nicméně tato oblast po skončení pulzu už příliš neovlivňuje vývoj plazmového oblaku, který je hlavním předmětem popisu v této práci, takže lze toto chování zanedbat.

Posledním grafem je vývoj intenzity laseru během pulzu, kde sledujeme kromě referenčního gaussovského průběhu intenzity také intenzitu v posledním výpočetním uzlu (označeno „systém absorb.“) a v uzlu na povrchu terče („terč absorb.“). Pro srovnání s článkem, kde je odlišná metodika, kdy jsou vynášeny dopadající intenzity, je vypočítána též dopadající intenzita na terč („terč dopad“). Ve srovnání s článkem déle tato dopadající intenzita na terč splývá s intenzitou zdroje, ale poté klesá rychle na podobné hodnoty okolo  $200 \text{ MW/cm}^2$ . Toto chování vysvětlují zbylé dvě křivky, které ukazují, že zprvu model absorpce má tendenci výrazně odrážet laser od povrchu terče a teprve s roztavením a odpařením povrchu dochází ke zvýšení absorpce. Bohužel tento

vývoj není správný, protože v UV oblasti má měď odrazivost pouze přibližně  $R = 0.34$  [12], takže by absorpce měla být znatelně vyšší. Problémem je model absorpce, který by bylo nutné recalibrovat, protože obsahuje kromě materiálově nezávislých fyzikálních vzorců i empirické korekce pro simulovaný materiál [42].

## Závěr

Metodu pulzní laserové depozice lze modelovat mnoha různými způsoby v závislosti na parametrech experimentu, jak bylo shledáno v rešeršní části. V této práci jsme se zaměřili na popis hydrodynamický, na jehož základě byl vytvořen jednodimenzionální lagrangeovský simulační kód implementovaný v programovacím jazyce C. Funkčnost a přesnost simulace byla ověřena několika různými hydrodynamickými testovacími úlohami pro něž známe analytické řešení. Stejně tak prošlo kontrolou i vedení tepla na úloze šíření nelineární tepelné vlny též s pozitivním výsledkem. Vedení tepla spolu s modelem absorpce laserového záření tvoří klíčovou součást simulace laserového plazmatu. Bylo proto převzato a implementováno velmi přesné implicitní schéma vedení tepla a také velmi realistický model absorpce laseru založený na řešení stacionárních Maxwellových rovnic.

Pro dosažení reálných výsledků při ablaci pevného terče při nižších intenzitách laseru bylo nutné vytvořit další rozšiřující modely, které především popisují fázový přechod materiálu. Nejprve to je model držení pevné a kapalné fáze, kde bylo navíc srovnáno několik zdánlivě možných variant řešení, u několika z nich byla prokázána jejich nekonzervativita a tak byl zvolen a dále použit nejlepší vytvořený (konzervativní) model. Dále byl navržen model změny fáze z hlediska energetické bilance a zvláště integrován do numerického schématu tak, aby nevznikaly přílišné oscilace při řešení metodou konečných diferencí. Posledním vylepšením pak byla metoda reinicializace simulace, která přibližně řeší problém tuhnutí materiálu terče a také snižuje výpočetní nároky simulace.

Na závěr práce byla provedena srovnání při úloze expanze do vakua s dostupnými simulačními kódy, kde byla nalezena velmi dobrá shoda a určen příznivý vývoj odchylky od analytického řešení. Positivní bylo shledáno též porovnání s 2D kódem PALE, který je vyvíjen na katedře KFE. Další tři počítačové experimenty laserové ablace a expanze plazmatu během metody PLD ukázaly také relativně dobrou shodu s publikovanými výsledky, takže můžeme celkově říci, že implementovaný simulační kód včetně vytvořených rozšíření dává relativně reálné a použitelné výsledky.

Budoucí práce by jistě mohla zahrnovat například doplnění simulace o poslední krok v metodě PLD, kterým je depozice tenké vrstvy na substrátu. Další možností by bylo hledat model, jakým by bylo možné odstranit Van der Waalovy smyčky, které se bohužel vyskytují v oblasti fázového přechodu u stavové rovnice QEOS. Také by bylo vhodné vyřešit problém kalibrace empirické části modelu absorpce laseru nebo detailněji modelovat změnu fáze pro použití u laserů s nižší intenzitou.



## Literatura

- [1] J. G. Lunney. Pulsed laser deposition of metal and metal multilayer films. *Applied surface science*, 86(94):79–85, 1995. ISSN 0169-4332.
- [2] I. W. Boyd. Thin film growth laser deposition by pulsed laser deposition. *Ceramics International*, 22(95):429–434, 1996. ISSN 1544-2217. doi:10.1177/0300985810372508.
- [3] A. Stanculescu, M. Socol, O. Rasoga, I. N. Mihailescu, G. Socol, N. Preda, C. Breazu and F. Stanculescu. Laser prepared organic heterostructures on glass/AZO substrates. *Applied Surface Science*, 302:169–176, 2014. ISSN 01694332. doi:10.1016/j.apsusc.2014.01.181.
- [4] H. M. Smith and A. F. Turner. Vacuum deposited thin films using a ruby laser. *Applied Optics*, 4(1):147, 1965. ISSN 0003-6935. doi:10.1364/AO.4.000147.
- [5] T. Venkatesan, X. Wu, A. Inam, C. Chang, M. Hegde and B. Dutta. Laser processing of high- $T_c$  superconducting thin films. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 25(11):2388–2393, 1989. ISSN 00189197. doi:10.1109/3.42070.
- [6] R. Eason, editor. *Pulsed laser deposition of thin films: applications-led growth of functional materials*. John Wiley & Sons, 2007. ISBN 0-471-44709-9.
- [7] N. Farid, S. S. Harilal, H. Ding and A. Hassanein. Emission features and expansion dynamics of nanosecond laser ablation plumes at different ambient pressures. *Journal of Applied Physics*, 115(3):1–10, 2014. ISSN 00218979. doi:10.1063/1.4862167.
- [8] E. Millon. Advanced functional oxide thin films grown by pulsed-laser deposition. *Applied Surface Science*, 278:2–6, 2013. ISSN 01694332. doi:10.1016/j.apsusc.2012.10.190.
- [9] D. B. Chrisey and G. K. Hubler. *Pulsed Laser Deposition of Thin Films*. A Wiley interscience publication. Wiley, 1994. ISBN 9780471592181.
- [10] N. Pryds, J. Schou and S. Linderoth. The spatial thickness distribution of metal films produced by large area pulsed laser deposition. *Applied Surface Science*, 253(19):8231–8234, 2007. ISSN 01694332. doi:10.1016/j.apsusc.2007.02.137.
- [11] P. M. Ossi and A. Bailini. Cluster growth in an ablation plume propagating through a buffer gas. *Applied Physics A*, 93(3):645–650, 2008. ISSN 0947-8396. doi:10.1007/s00339-008-4690-0.
- [12] X. Mao and R. E. Russo. Observation of plasma shielding by measuring transmitted and reflected laser pulse temporal profiles. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 64(1):1–6, 1996. ISSN 0947-8396. doi:10.1007/s003390050437.

- [13] D. Marla, U. V. Bhandarkar and S. S. Joshi. Critical assessment of the issues in the modeling of ablation and plasma expansion processes in the pulsed laser deposition of metals. *Journal of Applied Physics*, 109(2):021101, 2011. ISSN 00218979. doi:10.1063/1.3537838.
- [14] J. K. Chen, J. E. Beraun and C. L. Tham. Investigation of thermal response caused by pulse laser heating. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 44(7):705–722, 2003. ISSN 1040-7782. doi:10.1080/716100520.
- [15] V. I. Mazhukin and V. V. Nosov. Plasma-mediated surface evaporation of an aluminium target in vacuum under UV laser irradiation. *Quantum Electronics*, 35(5):454–466, 2007. ISSN 1063-7818. doi:10.1070/QE2005v035n05ABEH002783.
- [16] R. Singh and J. Narayan. Pulsed-laser evaporation technique for deposition of thin films: Physics and theoretical model. *Physical Review B*, 41(13), 1990.
- [17] A. Peterlongo, A. Miotello and R. Kelly. Laser-pulse sputtering of aluminum: vaporization, boiling, superheating, and gas-dynamic effects. *Physical Review E*, 50(6):4716–4727, 1994.
- [18] B. Wu and Y. C. Shin. A simple two-stage model for the formation and expansion of the plasma induced by high intensity nanosecond laser metal ablation in vacuum. *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, 371(1-2):128–134, 2007. ISSN 03759601. doi:10.1016/j.physleta.2007.01.096.
- [19] V. Létal. *Počítačové modelování rentgenové ablace pevných látek : Analýza , testování , úpravy a využití kódu ABLATOR*. Diplomová práce, FJFI ČVUT, 2004.
- [20] S. I. Anisimov, D. Bäuerle and B. S. Luk'yanchuk. Gas dynamics and film profiles in pulsed-laser deposition of materials. *Physical Review B*, 48(16):76–81, 1993.
- [21] A. Bogaerts, Z. Chen, R. Gijbels and A. Vertes. Laser ablation for analytical sampling: what can we learn from modeling? *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 58(11):1867–1893, 2003. ISSN 05848547. doi:10.1016/j.sab.2003.08.004.
- [22] M. Capitelli, A. Casavola, G. Colonna and A. De Giacomo. Laser-induced plasma expansion: Theoretical and experimental aspects. *Spectrochimica Acta - Part B Atomic Spectroscopy*, 59(3):271–289, 2004. ISSN 05848547. doi:10.1016/j.sab.2003.12.017.
- [23] R. Wood, K. Chen, J. Leboeuf, A. Puretzky and D. Geohegan. Dynamics of plume propagation and splitting during pulsed-laser ablation. *Physical Review Letters*, 79:1571–1574, 1997. ISSN 0031-9007. doi:10.1103/PhysRevLett.79.1571.
- [24] J. C. S. Kools. Monte Carlo simulations of the transport of laser-ablated atoms in a diluted gas. *Journal of Applied Physics*, 74(10):6401, 1993. ISSN 00218979. doi:10.1063/1.355141.

- [25] F. Garrelie, C. Champeaux and A. Catherinot. Study by a Monte Carlo simulation of the influence of a background gas on the expansion dynamics of a laser-induced plasma plume. *Applied Physics A*, 50:45–50, 1999.
- [26] T. E. Itina, J. Hermann, P. Delaporte and M. Sentis. Combined continuous-microscopic modeling of laser plume expansion. *Applied Surface Science*, 208-209:27–32, 2003. ISSN 01694332. doi:10.1016/S0169-4332(02)01280-1.
- [27] Y. Komatsu, T. Sasaki, T. Kikuchi, N. Harada and H. Nagatomo. Changes of implosion dynamics derived by difference of equation of state. *EPJ Web of Conferences*, 59:04010, 2013. ISSN 2100-014X. doi:10.1051/epjconf/20135904010.
- [28] R. P. Feynman, N. Metropolis and E. Teller. Equations of state of elements based on the generalized Fermi-Thomas theory. *Physical Review*, 75(10), 1949.
- [29] J. F. Barnes. Statistical atom theory and the equation of state of solids. *Physical Review*, 153(1):269–275, 1967. ISSN 0031899X. doi:10.1103/PhysRev.153.269.
- [30] R. M. More, K. H. Warren, D. a. Young and G. B. Zimmerman. A new quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter. *Physics of Fluids*, 31(10):3059, 1988. ISSN 00319171. doi:10.1063/1.866963.
- [31] A. Ray, M. Srivastava, G. Kondayya and S. V. G. Menon. Improved equation of state of metals in the liquid-vapor region. *Laser and Particle Beams*, 24:437–445, 2006. ISSN 0263-0346. doi:10.1017/S0263034606060381.
- [32] E. Caramana, D. Burton, M. Shashkov and P. Whalen. The construction of compatible hydrodynamics algorithms utilizing conservation of total energy. *Journal of Computational Physics*, 146(1):227–262, 1998. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.1998.6029.
- [33] E. Caramana, M. Shashkov and P. Whalen. Formulations of Artificial Viscosity for Multi-dimensional Shock Wave Computations. *Journal of Computational Physics*, 144(1):70–97, 1998. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.1998.5989.
- [34] V. F. Kuropatenko. On difference methods for the equations of hydrodynamics. *Difference methods for solutions of problems of mathematical physics, I. American Mathematical Society, Providence, RI*, 206, 1967.
- [35] E. F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics - A Practical Introduction*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009. ISBN 9783540252023. doi:10.1007/b7976.
- [36] W. F. Noh. Errors for calculations of strong shocks using an artificial viscosity and an artificial heat flux. *Journal of Computational Physics*, 72(1):78–120, 1987. ISSN 0021-9991. doi:10.1016/0021-9991(87)90074-X.
- [37] L. I. Sedov. *Similarity and dimensional methods in mechanics*. CRC press, 1993. ISBN 978-1-4832-0088-0.

- [38] J. R. Kamm and F. X. Timmes. On efficient generation of numerically robust Sedov solutions. Technical Report LA-UR-07-2849, Los Alamos National Laboratory, 2007.
- [39] L. Hájek. *Eulerovské modelování laserového plazmatu*. Výzkumný úkol, FJFI ČVUT, 2014.
- [40] S. Atzeni and J. Meyer-ter Vehn. *The Physics of Inertial Fusion: Beam Plasma Interaction, Hydrodynamics, Hot Dense Matter*. Oxford University Press, 2004. ISBN 0198562640.
- [41] J. Velechovský. *Modelování absorpce laserového záření v plazmatu*. Bakalářská práce, FJFI ČVUT v Praze, 2009. URL <<http://www-troja.fjfi.cvut.cz/~velechov/bakalarka.pdf>>.
- [42] K. Eidmann, J. Meyer-ter Vehn, T. Schlegel and S. Hüller. Hydrodynamic simulation of subpicosecond laser interaction with solid-density matter. *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, 62(1 B):1202–1214, 2000. ISSN 1063651X. doi:10.1103/PhysRevE.62.1202.
- [43] L. Spitzer and R. Härm. Transport phenomena in a completely ionized gas. *Physical Review*, 89(5):977–981, 1953. ISSN 0031899X. doi:10.1103/PhysRev.89.977.
- [44] J. Šilar. *Hydrodynamické modelování laserového plazmatu*. Bakalářská práce, FJFI ČVUT v Praze, 2008.
- [45] M. Shashkov and S. Steinberg. Solving diffusion equations with rough coefficients in rough grids. *Journal of Computational Physics*, 129(2):383–405, 1996. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.1996.0257.
- [46] The Numerical Algorithms Group Ltd, Oxford, UK. *NAG Library Manual*, 2015. URL <[http://www.nag.co.uk/numeric/fl1/nagdoc\\_fl125/html/frontmatter/manconts.html](http://www.nag.co.uk/numeric/fl1/nagdoc_fl125/html/frontmatter/manconts.html)>.
- [47] J. Šilar. *Hydrodynamické modelování laserového plazmatu Výzkumný úkol*. Výzkumný úkol, FJFI ČVUT v Praze, 2009.
- [48] R. M. Gilgenbach and P. L. G. Ventzek. Dynamics of excimer laser-ablated aluminum neutral atom plume measured by dye laser resonance absorption photography. *Applied Physics Letters*, 58(15):1597–1599, 1991. ISSN 00036951. doi:10.1063/1.105136.
- [49] M. Kuchařík. *Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) Methods in Plasma Physics*. Disertační práce, FJFI ČVUT v Praze, 2006.