

РАЗЛЕТ ВЕЩЕСТВА И ФОРМИРОВАНИЕ КРАТЕРА ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАКОРОТКОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА

С. И. Анисимов^{a,}, В. В. Жаховский^{b,c}, Н. А. Иногамов^a,
К. Нишихара^c, Ю. В. Петров^a, В. А. Хохлов^a*

^a *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

^b *Институт теплофизики экстремальных состояний
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

^c *Institute of Laser Engineering
Osaka University, Osaka, Japan*

Поступила в редакцию 6 февраля 2006 г.

Рассматривается действие субпикосекундного лазерного импульса на мишень из поглощающего конденсированного вещества. Проведен анализ распространения электронной тепловой волны и нагрева кристаллической решетки, предшествующих гидродинамическому расширению вещества. На этих начальных стадиях взаимодействия у границы мишени формируется нагретый слой толщиной d_T . Оценена зависимость толщины этого слоя от плотности поглощенной лазерной энергии F (Дж/см²). Для описания движения на стадии разлета использованы численное решение уравнений газодинамики и молекулярно-динамическое моделирование. Особенностью последнего является массивное распараллеливание с использованием большого числа процессоров ($\sim 10^3$), позволившее довести число модельных атомов до очень больших значений, близких к условиям реальных экспериментов (около $3.5 \cdot 10^7$).

PACS: 79.20.Ds, 81.16.Mk

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования взаимодействия субпикосекундных лазерных импульсов с веществом в режимах с умеренной плотностью энергии ($F_{inc} \sim 1$ Дж/см²) важны для решения актуальных задач нанотехнологии и тесно связаны с фундаментальными проблемами физики неравновесных процессов в конденсированном веществе. В последние годы им посвящено большое число работ (см., например, [1–14] и имеющиеся там ссылки). Процесс взаимодействия протекает следующим образом. Лазерное излучение поглощается в тонком (10–100 нм) скин-слое на границе мишени и передается в глубь мишени посредством электронной теплопроводности. Одновременно происходит передача энергии от электронов кристаллической решетке и уста-

новление электрон-фононного равновесия [15]. В металлах теплоемкость вырожденных электронов мала, поэтому начальная электронная температура сильно превышает температуру металла в равновесии. Качественный характер распределения электронной температуры в различные моменты времени показан на рис. 1. В начальные моменты электронная тепловая волна распространяется со сверхзвуковой скоростью. Поэтому массовым движением вещества на этих стадиях можно пренебречь. Распространение электронной тепловой волны описывается соотношением $d_T \sim \sqrt{\chi_e t}$, где χ_e — электронная температуропроводность. Движение вещества происходит в волне разрежения, которая распространяется со скоростью звука: $d_H \sim c_s t$. Понятно, что волна разрежения догоняет тепловую волну, $d_H^* = d_T^*$, в момент времени $t^* \sim \chi_e / c_s^2$, и начинается гидродинамическая

*E-mail: anisimov@itp.ac.ru

стадия — разлет нагретого слоя толщиной около d_T^* . Как будет видно из дальнейшего (см. разд. 2), при умеренных плотностях энергии характерное время разлета больше, чем время нагревания решетки вследствие электрон-фононной релаксации. В этом случае гидродинамическая стадия, стадия электронной тепловой волны и стадия поглощения лазерного излучения имеют разные временные масштабы и могут рассматриваться независимо друг от друга. Это обстоятельство было использовано в работах [6, 7], где в однотемпературном приближении было выполнено газодинамическое [6] и молекулярно-динамическое [7] моделирование разлета однородно нагретого слоя вещества в вакуум. Оба расчета показали одинаковую структуру течения. Сначала в волне разрежения формируется резкий фронт. Затем отражение волны разрежения от холодной части мишени приводит к образованию тонкой оболочки конденсированного вещества, движущейся с постоянной скоростью, и однородного двухфазного слоя, плотность которого убывает со временем примерно как t^{-1} . Впереди оболочки находится тонкий слой разреженного пара. После отделения оболочки и двухфазного слоя на поверхности мишени остается кратер. Расчеты показывают, что такая структура наблюдается в определенном интервале плотностей энергии. С увеличением плотности энергии толщина жидкой оболочки уменьшается и при некотором значении $F = F_v$ оболочка полностью испаряется. Кроме этой верхней границы существует нижняя граница интервала плотностей энергии. Это обычный порог абляции F_a . При допороговой плотности энергии происходит нагревание мишени и поверхностное испарение, подобное испарению под действием длинных лазерных импульсов. Однако из-за низкой плотности пара испаренная масса мала и кратер не образуется.

Описанная выше картина наблюдается при умеренных плотностях энергии и быстрой электрон-фононной релаксации. Если нагревание решетки происходит медленно (как, например, в случае тяжелых металлов), гидродинамический разлет происходит при разных температурах электронов и решетки и четко разделить электронную и гидродинамическую стадии не удастся. Расчеты с учетом давления электронов p_e в двухтемпературной гидродинамической постановке проводились в работе [11]. Эта работа не содержит сравнения с молекулярно-динамическим моделированием, позволяющим оценить роль метастабильных состояний. Она посвящена, в основном, высоким температурам, когда испарительный порог

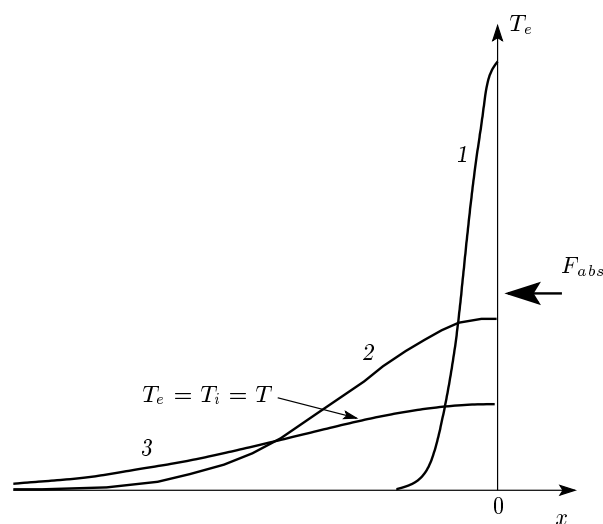


Рис. 1. Качественная картина распределения электронной температуры в массивной мишени: 1 — стадия поглощения света, 2 — стадия электронной тепловой волны, 3 — стадия равновесия между электронами и решеткой

F_v существенно превышен, поэтому в ней не рассматривается важный вопрос об образовании откольной оболочки и уменьшении ее толщины до нуля при увеличении плотности энергии от F_a до F_v . Отметим также, что в работе [11] использовано выражение для скорости обмена энергией между электронами и решеткой в виде $\alpha = c_e / \tau_{rel}$, где c_e — электронная теплоемкость, а τ_{rel} — время релаксации, которое предполагается постоянным. В таком виде коэффициент α является линейной функцией температуры T_e , что не согласуется с расчетами α с учетом процессов переброса [16], из которых следует, что в широком интервале температур α практически не зависит от T .

В ряде работ (см., например, [12–14]) предпринимались попытки описания всей совокупности процессов поглощения света, электронного переноса и разлета вещества в рамках единой гибридной модели. Очевидная трудность, возникающая при построении таких моделей, состоит в том, что взаимодействие электронов со светом [17, 18] и электрон-фононная релаксация [16, 19] требуют квантового описания, тогда как разлет вещества естественно рассматривать в рамках классической механики (МД-моделирование) или классической газовой динамики. Комбинация различных методов в гибридных моделях затрудняет оценку реальной точности расчета и в то же время резко увеличивает объем вычислительной работы. В результате на МД-стадии

расчета приходится ограничиться малым числом модельных частиц и малыми размерами расчетной области. Например, в работах [12–14] число частиц при расчетах на два-три порядка меньше, чем в настоящей работе, а поперечное сечение расчетной области составляет, соответственно, $3.5 \times 3.5 \text{ нм}^2$ [12], $2.1 \times 1.0 \text{ нм}^2$ [13] и $51 \times 12 \text{ нм}^2$ (настоящая работа).

В данной статье сделана попытка объяснить наблюдаемую в эксперименте картину разлета вещества и образования кратера при действии одиночного субпикосекундного лазерного импульса на массивную мишень. В разд. 2 рассматриваются начальные (электронные) стадии процесса взаимодействия. Раздел 3 посвящен гидродинамической стадии взаимодействия. Проведено сравнение газодинамических расчетов с молекулярно-динамическим моделированием. В газодинамических расчетах использовано полуэмпирическое уравнение состояния, построенное в предположении, что вещество в кристаллическом состоянии имеет максимально возможную (атомную) прочность. Молекулярно-динамический расчет показывает, однако, что при толщинах откольной оболочки порядка десятков нанометров откольная прочность значительно ниже атомной. В разд. 4 на основе одномерных расчетов построена трехмерная структура течения. Раздел 5 посвящен сравнению газодинамических и молекулярно-динамических расчетов, а разд. 6 — интерференционным кольцам Ньютона, наблюдаемым в экспериментах типа «возбуждение–зондирование» (pump-probe). В разд. 7 обсуждается влияние термодинамических свойств вещества мишени на характер ее разлета в вакуум.

2. ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕПЛОВАЯ ВОЛНА И ЭЛЕКТРОН-ФОНОННАЯ РЕЛАКСАЦИЯ

В металлах и полупроводниках ультракороткие лазерные импульсы поглощаются электронами. Поглощение локализовано в скин-слое вблизи поверхности мишени. Поглощенная лазерная энергия передается холодным слоям мишени электронной теплопроводностью. Нагревание кристаллической решетки происходит сравнительно медленно из-за большой разницы в массах электронов и ионов. Для описания этой совокупности процессов была предложена двухтемпературная модель металла [15, 20]. Уравнения двухтемпературной модели имеют вид

$$c_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) - \alpha(T_e - T_i) + Q, \quad (2.1)$$

$$c_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = \alpha(T_e - T_i). \quad (2.2)$$

Здесь c_e, c_i — электронная и ионная теплоемкости на единицу объема, T_e, T_i — температуры электронной и ионной подсистем, κ_e — электронная теплопроводность (малой ионной теплопроводностью пренебрегаем), α — скорость обмена энергией между электронами и решеткой, Q — источник энергии, связанный с поглощением лазерного импульса. Этот источник действует в течение лазерного импульса на глубине порядка толщины скин-слоя. Нас интересует диапазон плотностей энергии, соответствующий порогам $F_a, F_v \sim 100 \text{ мДж/см}^2$ и длительности лазерного импульса $\tau_L \sim 100 \text{ фс}$. В этом случае температуры T_e на стадии, когда электронная теплопроводность является определяющим механизмом переноса энергии, сравнимы с энергией Ферми ε_F . При таких T_e длина пробега электронов относительно электрон-электронных столкновений l_{ee} становится порядка межатомных расстояний a . Поскольку пробеги малы по сравнению с масштабом распределения температуры, приближение диффузионного теплового потока в уравнении (2.1) является удовлетворительным. В этом отличие рассматриваемой ситуации от случая малых плотностей поглощенной энергии, $F \sim 1 \text{ мДж/см}^2$, когда пробеги l_{ee} и l_{ep} велики (сотни a) и может оказаться необходимым учет баллистических поправок к закону Фурье. Уравнения (2.1), (2.2) справедливы в пренебрежении гидродинамическим движением, когда профиль плотности однороден: $n_i = n_e/Z \equiv n_0$ (изохорический нагрев).

Из приведенных ниже оценок следует, что в случае алюминия абляционный и испарительный пороги F_a, F_v соответствуют равновесным температурам $T_e \approx T_i \approx T_{eq}$ порядка 5 кК и 15 кК. При таких температурах на стадии поглощения и в начале стадии электрон-фононной релаксации, когда электронная внутренняя энергия превышает ионную, температура T_e существенно выше T_i . Поэтому в системе (2.1), (2.2) в разности $T_e - T_i$ можно пренебречь температурой T_i . Заменим в уравнении (2.1) $c_e dT_e$ на dE_e , где E_e — объемная плотность электронной внутренней энергии. В результате вместо системы (2.1), (2.2) можно написать одно уравнение теплопроводности со стоком:

$$\frac{\partial E_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\chi_e \frac{\partial E_e}{\partial x} \right) - \alpha T_e (E_e), \quad (2.3)$$

где $\chi_e = \kappa_e/c_e$ — коэффициент электронной теплопроводности. Удобно использовать простую аппроксимацию:

$$E_e^{-2} = \left(\frac{\gamma T_e^2}{2}\right)^{-2} + \left(\frac{3}{2}k_B T_e Z n_i\right)^{-2},$$

$$T_e = \frac{2\sqrt{2}}{\gamma} \left[\sqrt{\frac{16}{\gamma^2 E_e^2} + \left(\frac{3}{2}k_B Z n_i\right)^{-4}} - \left(\frac{3}{2}k_B Z n_i\right)^{-2} \right]^{-1/2}, \quad (2.4)$$

связывающую T_e и E_e . Она необходима для решения уравнения (2.3). Аппроксимация (2.4) имеет правильные асимптотики в низкотемпературном $k_B T_e \ll \varepsilon_F$ и высокотемпературном $k_B T_e \gg \varepsilon_F$ пределах. В случае алюминия $\gamma = 1.45 \cdot 10^{-4}$ Дж/К² · см³. Этот коэффициент определяет теплоемкость вырожденных электронов. Часто в расчетах по двухтемпературной модели авторы ограничиваются формулами, пригодными в вырожденном случае. В нашей ситуации с достаточно высокими плотностями энергии F необходимы более общие выражения, справедливые при произвольном отношении $k_B T_e / \varepsilon_F$.

Интерполяционное выражение для электронной теплопроводности можно записать в виде (см. [5] и имеющиеся там ссылки)

$$\kappa_e = C \frac{(\theta^2 + 0.16)^{5/4} (\theta^2 + 0.44)}{\sqrt{\theta^2 + 0.092}} \frac{\theta}{\theta^2 + b\theta_i}, \quad (2.5)$$

где $\theta = k_B T_e / \varepsilon_F$, $\theta_i = k_B T_i / \varepsilon_F$. Для алюминия имеем $C = 7.7$ Вт/К · см, $b = 1.2$, $\varepsilon_F = 115$ кК. Множитель C выбран так, чтобы при $T_e = T_i = 1000$ К выражение (2.5) выходило на справочное значение теплопроводности жидкого алюминия $\kappa_e = 0.93$ Вт/К · см [21]. Числитель второй дроби в выражении (2.5) связан с электронной теплоемкостью, а первое и второе слагаемые в знаменателе — соответственно с электрон-электронными и электрон-фононными столкновениями. Зависимость $\chi_e(T_e, T_i) = \kappa_e / c_e$ от температуры электронов (с интерполяционными формулами для κ_e и c_e) имеет три характерных участка: 1) $T_e < 20$ кК (относительно низкие температуры, вырождение существенно, χ_e уменьшается с ростом T_e); 2) $20 < T_e < 100$ кК (промежуточная область широкого минимума, $\chi_e \sim 2$ см²/с); 3) $T_e > 100$ кК (переход к невырожденной плазме, медленный рост χ_e с увеличением T_e ; при $T_e = 150$ кК, $\chi_e \approx 5$ см²/с). Влияние ионной температуры T_i в интервале 0.3–10 кК на коэффициент χ_e заметно только на первом участке.

В отсутствие стока αT_e уравнение (2.3) сохраняет полную энергию электронов,

$$\int_0^\infty E_e(x, t) dx = F.$$

Пусть $E_{ehc}(t)$ и $d_{ehc}(t)$ — эффективные значения плотности энергии и толщины слоя, прогретого электронной тепловой волной, в момент времени t . Условие $E_{ehc}(t) d_{ehc}(t) \approx F$ выполняется, пока потери малы. Энергия

$$\Delta E = \int_0^t dt \int_0^\infty \alpha T_e(x, t) dx,$$

переданная от электронной подсистемы ионной, быстро растет при увеличении толщины d_{ehc} . В квантовом ($E_e = \gamma T_e^2 / 2$) и классическом ($E_e = 3 Z n_i k_B T_e / 2$) случаях ΔE можно оценить, соответственно, как

$$\Delta E \sim \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{\alpha}{\chi_e \sqrt{\gamma}} d_{ehc}^{5/2} F^{1/2}, \quad k_B T_e < \varepsilon_F, \quad (2.6)$$

$$\Delta E \sim \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{\chi_e (3 Z n_i k_B / 2)} d_{ehc}^2 F, \quad k_B T_e > \varepsilon_F. \quad (2.7)$$

В (2.6) и (2.7) положено: $d_{ehc} = \sqrt{\pi \chi_e t}$. Эти выражения справедливы с точностью до множителя порядка единицы.

Полагая $\Delta E \sim F$, получим оценки толщин прогретого слоя на стадии выравнивания энергий электронов и решетки:

$$d_T(F) = d_{ehc}(t_{eq}) \sim \left(\frac{\pi \chi_e \sqrt{\gamma}}{\sqrt{2} \alpha}\right)^{2/5} F^{1/5} =$$

$$= 32 \left(\frac{F \text{ [МДж/см}^2\text{]}}{70}\right)^{1/5} \text{ нм}, \quad (2.8)$$

$$d_T(F) \sim 59 \text{ нм}, \quad (2.9)$$

соответственно, в квантовом и классическом случаях. Здесь принято $\alpha = 7.0 \cdot 10^{11}$ Вт/К · см³ (алюминий). Представим интегральный баланс электронной энергии в виде

$$E_{ehc} d_{ehc} = F - \frac{1}{\pi} \frac{\alpha T_e(E_{ehc}) d_{ehc}^3}{\chi_e [T_e(E_{ehc})]}. \quad (2.10)$$

Вместе с уравнениями для $T_e(E_e)$ (2.4) и $\chi_e(T_e) = \kappa_e / c_e$ (2.5) баланс энергии (2.10) составляет систему уравнений, описывающую охлаждение электронной подсистемы за счет увеличения толщины

Оценка зависимости $d_T(F)$ и числа Маха электронной тепловой волны на стадии выравнивания температур T_e и T_i ; $\chi_e|_{eq} = \chi_e(t_{eq})$

F , мДж/см ²	10	30	100	300
d_T , нм	53	44	34	34
t_{eq} , пс	0.44	0.72	1.2	2.1
T_i , кК	0.4	1	5	10
$\chi_e _{eq}$, см ² /с	14	5.1	1.2	0.8
$v_{ehc} _{eq}$, км/с	49	24	8.2	5.1
$v_{ehc} _{eq}/c_s$	7.5	3.7	1.3	0.8
T_{eq} , кК	0.8	2.8	12	35

прогретого слоя $d_{ehc}(t)$ и передачи тепла холодным ионам. В таблице даны результаты численного решения этой системы уравнений для алюминия. Плотность энергии в электронной тепловой волне $E_{ehc}[d_{ehc}(t)]$ к моменту времени $t_{0.5}$, когда половина поглощенной энергии $0.5F$ переходит в ионную подсистему, находится из первых двух строк таблицы. Температура T_i входит в уравнение (2.10) в качестве параметра. Изменение T_i в пределах нескольких кК мало влияет на глубину прогрева. Таким образом, глубина прогрева практически не зависит от плотности поглощенной лазерной энергии в интересующем нас интервале F .

При малых временах скорость тепловой волны

$$v_{ehc} = \frac{\pi}{2} \frac{\chi_e(d_{ehc})}{d_{ehc}}$$

велика по сравнению со скоростью звука. Например, в момент времени $t = 0.2$ пс при $F = 70$ мДж/см² из уравнения (2.10) имеем $T_e = 21$ кК, $d_{ehc} \sim \delta_{skin}$, $\chi_e = 2$ см²/с, $v_{ehc} = 27$ км/с, $\Delta E \approx 0.09F$. Скорость звука c_s в алюминии равна 6.5 км/с. Она слабо зависит от температуры в рассматриваемом диапазоне температур. По мере расширения (с течением времени) прогретого слоя скорость волны v_{ehc} и число Маха v_{ehc}/c_s уменьшаются. Из таблицы следует, что при температурах $T_{eq} = 5-15$ кК скорость тепловой волны превышает скорость звука, $v_{ehc} > c_s$, т. е. в момент времени $t = t_{eq}$ распространение тепла все еще носит сверхзвуковой характер. Это означает, что электронная стадия достаточно коротка, и температурный профиль $T_{eq}(x, t = t_{eq})$, сформированный на этой стадии, является начальным для гидродинамической стадии.

В таблице приведено число Маха тепловой волны $v_{ehc}|_{eq}/c_s$ в момент времени $t = t_{eq}$. С ростом плотности энергии F оно уменьшается (см. таблицу) и при некотором значении F^{sep} достигает единицы. Расчет по уравнению (2.10) для алюминия дает оценку $F^{sep} = 0.15$ Дж/см², $t_{eq}^{sep} = 1.8$ пс, $T_{eq}^{sep} = 18$ кК. Интересно отметить, что критическая адиабата (кривая постоянной энтропии, проходящая через критическую точку) пересекает изохору начальной плотности $\rho_{ini} = 2.7$ г/см³ при температуре, примерно равной 17 кК, близкой к значению T_{eq}^{sep} . При $F < F^{sep}$ электронная и гидродинамическая стадии разделены во времени. В обратном случае, $F > F^{sep}$, движение вещества начинается при электронной температуре, превышающей ионную, $T_e > T_i$, т. е. до завершения электрон-фононной релаксации. Продолжительность тепловой релаксации определяется скоростью α обмена энергией между электронами и решеткой. В случае тяжелых ионов (отношение m_i/m_e большое) температурная релаксация идет медленно. Например, для золота коэффициент $\alpha = (2-2.5) \cdot 10^{10}$ Вт/К · см³, т. е. на полтора порядка меньше, чем у алюминия. Оценка с помощью уравнения (2.10) дает $F^{sep} \approx 0.13$ Дж/см², $d_T^{sep} \approx 160$ нм, $t_{eq}^{sep} \approx 17$ пс, $T_{eq}^{sep} \approx 3.3$ кК. Таким образом, для золота весь интервал плотностей энергии между абляционным и испарительным порогами лежит выше F^{sep} . При этом условии $t_{eq} < t_s = d_T/c_s$ не выполняется и выравнивание электронной и фононной температур происходит в движущемся веществе: $t_{eq} > t_s$. Звуковое время t_s находится теперь из другого условия: $v_{ehc}(t_s) = c_s$. Для исследования такого режима необходимо решать уравнения двухтемпературной гидродинамики с двухтемпературным уравнением состояния, в котором учитывается электронное давление p_e , создающее дополнительное растягивающее напряжение.

3. СТРУКТУРА ВОЛНЫ РАЗРЕЖЕНИЯ

Расширение нагретого тепловой волной вещества в вакуум происходит в волне разрежения. Рассмотрим ее структуру. Пусть до начала лазерного импульса полубесконечная мишень занимала левую ($x < 0$) половину оси x , перпендикулярной плоской границе мишени с вакуумом (поверхность $x = 0$). Под действием лазерного импульса вблизи поверхности мишени образуется нагретый слой толщиной d_T , который расширяется в вакуум. На поверхности мишени образуется кратер глубиной порядка толщины прогретого слоя, $d_{crat} \sim d_T$. Формирование обла-

ка выброшенного вещества и кратера происходит за время порядка звукового $t_s = d_T/c_s$, где c_s — скорость звука в конденсированном веществе. В случае ультракороткого импульса выполняется ограничение $\tau < t_s$, где τ — длительность лазерного импульса. Структура облака зависит от плотности энергии. При энергиях $F_a < F < F_v$ волна разрежения состоит из трех частей. Со стороны вакуума находится облако разреженного пара. Это облако граничит с оболочкой (откольной пластиной), плотность которой близка к плотности жидкости. Пространство между оболочкой и неразрушенной частью мишени заполнено двухфазной смесью жидкость–пар. С ростом F толщина двухфазного слоя и размер парового облака увеличиваются. Напротив, толщина оболочки монотонно уменьшается. При $F = F_v$ оболочка полностью испаряется. Волна разрежения состоит теперь из двух частей: облака разреженного пара, расширяющегося в вакуум, и слоя двухфазного материала жидкость–пар. Если плотность энергии не достигает порога абляции, $F < F_a$, волна разрежения представляет собой расширяющееся паровое облако низкой плотности. В этом случае абляционный унос материала обусловлен поверхностным испарением конденсированного вещества. Глубина кратера при этом очень мала. Описанная структура волны разрежения следует из результатов гидродинамического [22] и молекулярно-динамического [23] численного моделирования. В работе [22] расчет был выполнен для алюминия с использованием широкодиапазонного полуэмпирического уравнения состояния [24]. Трудность такого моделирования состоит в необходимости учета метастабильных состояний. Обычно это делается путем добавления к системе уравнений газодинамики феноменологических кинетических уравнений, описывающих распад метастабильных состояний. Более прямой подход к рассмотрению кинетики фазового перехода состоит в использовании молекулярно-динамического моделирования. Он позволяет без применения феноменологических приближений моделировать кинетику разрушения конденсированных сред — например, кавитацию или вскипание жидкости, — растянутой за счет термомеханических напряжений. В работе [23] молекулярно-динамическое моделирование разлета нагретого слоя вещества проводилось с использованием потенциала взаимодействия Леннарда–Джонса (ЛД)

$$U = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

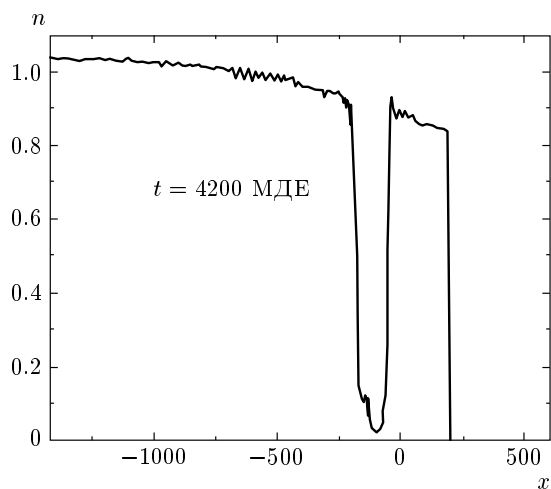


Рис. 2. Полученный в результате молекулярно-динамического моделирования профиль плотности, усредненный по поперечным координатам y и z . Начальный профиль температуры — экспоненциальный с температурой на поверхности $T_0 = 1.25$ МДЕ, соответствующей порогу абляции

где $r = |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|$ — расстояние между атомами a и b в трехмерном пространстве. В начальный момент нагретое вещество с однородной плотностью n_0 находилось в твердой фазе с гранецентрированной кубической решеткой. В работах [22] и [23] рассматривался разлет слоя с однородной начальной температурой. В реальном эксперименте этому соответствует разлет однородно нагретой пленки, толщина которой меньше толщины слоя, нагретого электронной теплопроводностью, d_T . Структура волн разрежения, найденная различными способами, оказалась практически одинаковой, несмотря на то что рассматривался разлет веществ с различными термодинамическими свойствами. Существенно заметить, что гидродинамическое моделирование выполнялось с уравнением состояния, построенным в соответствии с правилом Максвелла [25].

Более сложным оказывается рассматриваемое в настоящей работе моделирование разлета поверхностного слоя массивной мишени с неоднородным начальным профилем температуры. Пусть неоднородно нагретая мишень разлетается вдоль оси x , причем к началу гидродинамической стадии нагрет слой $-l_\infty < x < 0$. Начальное распределение температуры в этом слое выберем в виде $T(x, 0) = T_0 \exp(x/d_T)$, а при $x < -l_\infty$ положим $T_\infty = 0.25$ МДЕ (как это обычно принято [23] при молекулярно-динамическом моделировании, все результаты представлены в безразмерных

МД-единицах). В случае неоднородного распределения температуры разные частицы вещества имеют разную энтропию и расширяются каждая по своей адиабате. Совокупность адиабат образует полосу на фазовой плоскости. Она ограничена адиабатой с начальной температурой T_0 , соответствующей поверхности мишени, и адиабатой с начальной температурой T_∞ (температура в глубине мишени). На рис. 2 представлено распределение плотности, усредненной по переменным y и z , в момент времени $t = 4200$ МДЕ, полученное в результате МД-моделирования при начальной температуре поверхности $T_0 = 1.25$ МДЕ. Эта температура соответствует порогу абляции. На рис. 2 отчетливо видна откольная пластина, которая отделилась от массивной мишени. Плотность откольной пластины n_b соответствует «горячей» адиабате (плотности в точке пересечения «горячей» адиабаты и бинодали). На рис. 3 показано усредненное по y и z распределение плотности $n(x, t)$ в момент времени $t = 2350$ МДЕ. Начальная температура поверхности в этом варианте составляет $T_0 = 2$ МДЕ. С точностью до акустических осцилляций откольной пластины плотность n_b не меняется во времени. Двухфазное облако состоит из фрагментов жидкости и пара. Плотность жидких капель практически постоянна во времени, а объемная доля пара возрастает по мере расширения облака. Поэтому средняя плотность смеси уменьшается со временем. Усредненный профиль плотности при начальной температуре поверхности, превышающей порог испарения, $T_v < T_0 = 5$ МДЕ, показан на рис. 4. В этом варианте откольная пластина отсутствует.

Профили плотности, приведенные на рис. 2–4, получены усреднением по поперечным координатам y, z (разлет идет по оси x). Поперечное сечение расчетной области, имеющей форму параллелепипеда, представляет собой прямоугольник $y \times z = 36 \times 151$ МДЕ² = 12×51 нм², на границах которого ставятся периодические граничные условия. Для моделирования был использован компьютерный кластер из 720 процессоров. Обычно в работах по МД-моделированию (см., например, [12]) поперечные размеры расчетной области и число модельных атомов на два-три порядка меньше. На двухфазном участке волны разрежения из-за случайного распределения фаз и ограниченных размеров области усреднения возникают флуктуации плотности (рис. 3, 4). Расстояния и амплитуды случайных «всплесков» определяются расстояниями между пузырьками при $0 < V_v/V_\Sigma < 0.5$ и расстояниями между жидкими каплями при

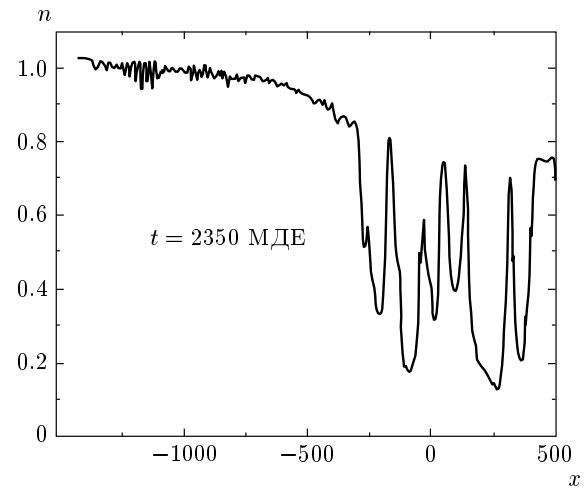


Рис. 3. Усредненный профиль плотности при начальной температуре поверхности $T_0 = 2$ МДЕ

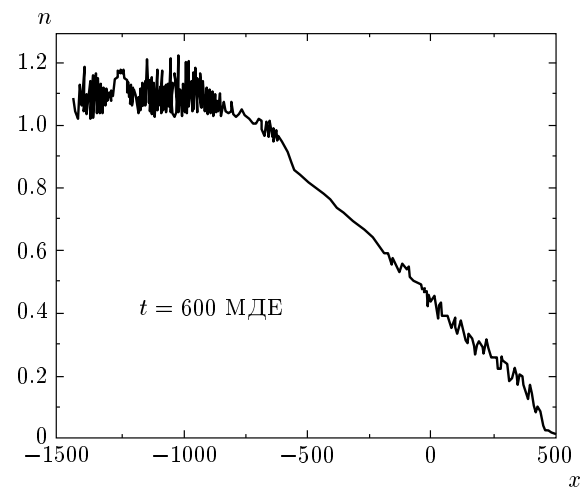


Рис. 4. Усредненный профиль плотности при начальной температуре поверхности $T_0 = 5$ МДЕ, превышающей порог испарения T_v . Откольная пластина отсутствует

$0.5 < V_v/V_\Sigma < 1$, где V_v/V_Σ — доля объема, занятого паром. Если сравнить результаты двух расчетов с одинаковыми начальными данными и различными поперечными сечениями, относящиеся к одному и тому же моменту времени, то легко видеть, что при уменьшении поперечного размера расчетной области относительная амплитуда всплесков возрастает. Относительная амплитуда становится очень большой при поперечных размерах расчетного параллелепипеда порядка пространственного масштаба двухфазной фрагментации. Поэтому при

моделировании важно иметь расчетную область возможно большего поперечного размера.

Если сравнить характеристики двухфазной неоднородности при разных значениях энерговклада F , то можно увидеть, что при более высокой температуре фрагментация тоньше (масштаб двухфазности меньше). Поэтому амплитуды всплесков на рис. 4 значительно меньше, чем на рис. 3.

В данной работе основное внимание уделяется лазерным импульсам умеренной интенсивности ($F_{inc} \sim 1$ Дж/см² при $\tau_L \sim 10^{-13}$ с), под действием которых вещество переходит в «теплые» термодинамические состояния. В таких состояниях вещество имеет плотность порядка твердотельной ($n \sim n_0$) и температуру порядка одного эВ. Эти состояния относятся к важной и малоизученной области фазовой диаграммы, включающей тройную и критическую точки. Известные из литературы оценки критических значений T_c , ρ_c иногда различаются на десятки процентов. Поэтому исследования абляции с помощью лазеров умеренной интенсивности должны привести к уточнению термодинамических и кинетических параметров «теплого» вещества.

4. ТРЕХМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ

Интенсивность лазерного излучения распределена по фокальному пятну неравномерно. Как будет показано ниже, это обстоятельство существенно для понимания происхождения интерференционной картины (колец Ньютона) в экспериментах типа «возбуждение–зондирование». Зависимость поверхностной плотности падающей энергии F_{inc} от поперечных координат y, z обычно аппроксимируют распределением Гаусса [1–3]:

$$F_{inc} = F_{inc}^c \exp\left(-\frac{y^2 \cos^2 \beta + z^2}{r_L^2}\right), \quad (4.1)$$

где r_L — радиус пучка в проходящей через точку $y = z = 0$ плоскости, перпендикулярной оси пучка, F_{inc}^c — значение поверхностной плотности энергии в центре фокального пятна, β — угол между осью x (нормаль к поверхности мишени) и осью лазерного пучка. В случае наклонного падения ($\beta \neq 0$) контуры равных значений F_{inc} на мишени являются эллипсами. Обычно в экспериментах типа «возбуждение–зондирование» [1–3] используется наклонное падение греющего импульса.

Будем предполагать, что коэффициент отражения R греющего импульса не зависит от его интенсивности в рассматриваемом диапазоне интен-

сивностей. В случае массивной мишени, когда прошедшее через мишень излучение отсутствует, имеем $F = (1 - R)F_{inc}$, где F_{inc} и F — падающая и поглощенная энергия на единицу площади мишени. Распределение поглощенной энергии F по пятну повторяет распределение (4.1) с множителем $1 - R$. Профиль плотности лазерной энергии зависит от двух параметров: плотности энергии в центре фокального пятна $F^c = (1 - R)F_{inc}^c$ и радиуса r_L . Отнесем значение в центре F^c к порогу абляции по поглощенной энергии:

$$f^c = F^c/F_a = F_{inc}^c/F_{a inc}. \quad (4.2)$$

Порог абляции по безразмерной энергии в центре фокального пятна равен $f_a^c = 1$. Нормируем в случае $f^c > 1$ пространственные масштабы на размер кратера при данной энергии в центре:

$$f = f^c \exp\left[-(\tilde{y}^2 \cos^2 \beta + \tilde{z}^2) \ln f^c\right],$$

$$f = \frac{F}{F_a}, \quad \tilde{y} = \frac{y}{r_{crat}}, \quad \tilde{z} = \frac{z}{r_{crat}}, \quad (4.3)$$

$$r_{crat} = r_L \sqrt{\ln f^c}, \quad f|_{\tilde{y}^2 \cos^2 \beta + \tilde{z}^2 = 1} = 1.$$

Видно, что внутри кратера безразмерная вложенная энергия (4.3) меняется от значения f^c в центре до значения 1 на границе кратера. При условии $f^c > 1$ в безразмерных переменных f, \tilde{y}, \tilde{z} профиль плотности энергии в фокальном пятне (4.3) определяется единственным параметром f^c : $f = f(\tilde{y}, \tilde{z}; f^c)$.

Вообще говоря, разлет вещества под действием пучка (4.3) является трехмерным. Скорость $\mathbf{v}(x, y, z, t)$, давление и другие переменные зависят от всех пространственных координат. Однако в экспериментах [1–3] применялись широкие пучки, когда вне малой окрестности порога абляции радиус кратера ($r_{crat} \sim 10$ – 100 мкм) значительно больше его глубины ($d_{crat} \sim 10$ – 100 нм). Из-за малости отношения d_{crat}/r_{crat} течение является почти одномерным. Поперечные компоненты скорости и градиента напряжения малы по сравнению с продольными компонентами в меру малости указанного отношения. Это позволяет (как сделано в данной работе) определить форму кратера и откольной оболочки с помощью серии одномерных расчетов, соответствующих разным значениям плотности энергии F . Согласно формулам (4.1) и (4.3), разные F можно отнести к разным точкам y, z фокального пятна. Распределение интенсивности на мишени задается параметрами $f^c > 1$ и r_L (при фиксированном угле β). В случае широкого пучка из-за эффективной одномерности разлета значение радиуса r_L не имеет значения. Поэтому в безразмерных координатах \tilde{y}, \tilde{z} однопараметрическому семейству ши-

роких лазерных пучков f^c соответствует однопараметрическое семейство кратеров и оболочек, характеризующихся тем же параметром f^c . Покажем, каким образом трехмерная структура откольной оболочки может быть восстановлена по результатам одномерного численного моделирования. Из серии одномерных расчетов, каждый из которых относится к своему значению энергии F , следуют три зависимости: $u_{sh}(F)$, $\hat{d}_{sh}(F)$, $\hat{d}_{crat}(F)$, определяющие формы оболочки и кратера. Если поперечные координаты естественно относить к радиусу кратера: $y, z \rightarrow \tilde{y}, \tilde{z}$, как это сделано в формулах (4.3), то продольные (по оси x) размеры следует нормировать на толщину прогретого слоя d_T : $\Delta \hat{x}_{sh} = \hat{d}_{sh} = d_{sh}/d_T$, $\hat{x}_{crat} = -\hat{d}_{crat} = -d_{crat}/d_T$. Положение оболочки в момент времени t определяется выражением $x_{sh} \approx u_{sh}t$. Это асимптотическое (при $t \rightarrow \infty$) выражение справедливо на больших удалениях оболочки от поверхности: $x_{sh} \gg d_{crat}$. Следовательно, форма оболочки на больших временах зависит от асимптотической скорости u_{sh} . По этой форме можно вычислить положения интерференционных колец Ньютона.

Формы кратера и оболочки $x_{crat}(z)$, $\Delta x_{sh}(z)$, $x_{sh}(z)$ находятся после подстановки в аргументы зависимостей $u_{sh}(F)$, $\hat{d}_{sh}(F)$, $\hat{d}_{crat}(F)$ функций $F(z)$ (4.1) или (4.3). Для примера рассмотрена функция $F(z)$ и плоскость xz . Аналогично строятся зависимости x_{crat} , Δx_{sh} , x_{sh} от координаты y . Количественные оценки форм $x(z)$ основаны на серии одномерных расчетов, примеры которых показаны на рис. 2–4. Это молекулярно-динамические (МД) расчеты с экспоненциальным начальным распределением температуры, которое задается начальной температурой T_0 поверхности мишени и толщиной d_T . Следующие из МД-вычислений зависимости $u_{sh}(T_0)$, $\hat{d}_{sh}(T_0)$, $\hat{d}_{crat}(T_0)$ показаны на рис. 5а, б. На этих рисунках ясно видны абляционный и испарительный пороги, T_a и T_v . Они отмечены стрелками на рис. 5а. Кривая, отмеченная буквами sh, показывает относительную толщину оболочки, которая обращается в нуль при $T = T_v$. Кривая, отмеченная буквами crat, относится к кратеру. Толщина оболочки убывает с ростом температуры T_0 , а глубина кратера растет. Порог T_v , при котором исчезает оболочка, отмечен кружком на кривой MD (см. рис. 5б). На пороге абляции T_a параметры оболочки и кратера, d_{sh} и d_{crat} , скачком изменяются от нулевых (при $T_0 < T_a$) до конечных значений. При $T_0 > T_a$ оболочка с асимптотической ($t \gg t_s$) скоростью $u_{sh} > 0$ (кривая MD на рис. 5б) удаляется от мишени. При $T_0 < T_a$ отрыва оболочки не происходит, поэтому

асимптотически имеем: $u_{sh} \equiv 0$.

На рис. 5б кривая Riemann получена в результате гидродинамического расчета [26] с помощью инвариантов Римана распада разрыва между полупространством, нагретым до температуры T_0 , и вакуумом. При $t = 0$ внешняя граница оболочки начинает двигаться со скоростью $u_R(T_0)$. В течение промежутка времени порядка звукового $t_s = d_T/c_s$ скорость оболочки снижается из-за сопротивления конденсированной среды разрыву. Это снижение соответствует первому «зубцу» на зависимостях скорости $u_{sh}(t; T_0)$ от времени (рис. 5в). Допороговая ($T_0 < T_a$) и сверхпороговая ($T_0 > T_a$) стрелки на рис. 5б соединяют начальную ($t = 0$) точку, лежащую на кривой Riemann, и конечную ($t = \infty$) точку на кривой MD ($T_0 > T_a$) или на оси $u = 0$ ($T_0 < T_a$). По мере роста температуры T_0 отрицательная роль отрицательных давлений уменьшается, поэтому кривые Riemann и $u_{sh}(T_0)$ сближаются.

На рис. 5в показаны кривые $u_{sh}(t; T_0)$ для нескольких значений температуры T_0 ($T_0 = 1, 1.25, 2, 3, 5$ МДЕ). Они получены в результате МД-моделирования. На кривой $u_{sh}(t)$, соответствующей начальной температуре поверхности $T_0 = 1.25$ МДЕ, виден ряд звуковых осцилляций, которые совершает откольная пластина. При таких осцилляциях происходят примерно периодические изменения толщины пластины, с которыми связаны примерно периодические изменения скорости внешней границы пластины (это и есть скорость u_{sh}). Звуковые осцилляции наблюдались также в ударно-волновых экспериментах по отколу [27]. В описываемых МД-расчетах звуковые зубцы впервые обнаружены на пластинах сверхмалой (десятки нанометров) толщины. Например, при $T_0 = 3$ МДЕ толщина пластины составляла около 20 межатомных слоев, а соответствующий звуковой период равнялся примерно 10 пс. В ударно-волновых экспериментах [27, 28] пластины имели гораздо большую толщину (1000 нм и более). Звуковые зубцы сверхмалой продолжительности (порядка 10 пс) можно наблюдать в интерферометрических экспериментах [9].

Для расчета кривой Riemann на рис. 5б в жидкой фазе было использовано уравнение состояния Леннарда-Джонсовской жидкости, полученное в работе [29]. В твердой фазе расчет проводился с уравнением состояния, полученным по дебаевской модели твердого тела с потенциалом взаимодействия атомов Леннарда–Джонса. Положение равновесной бинадали и равновесных адиабат внутри двухфазной области вычислялось по правилу Максвелла [25].

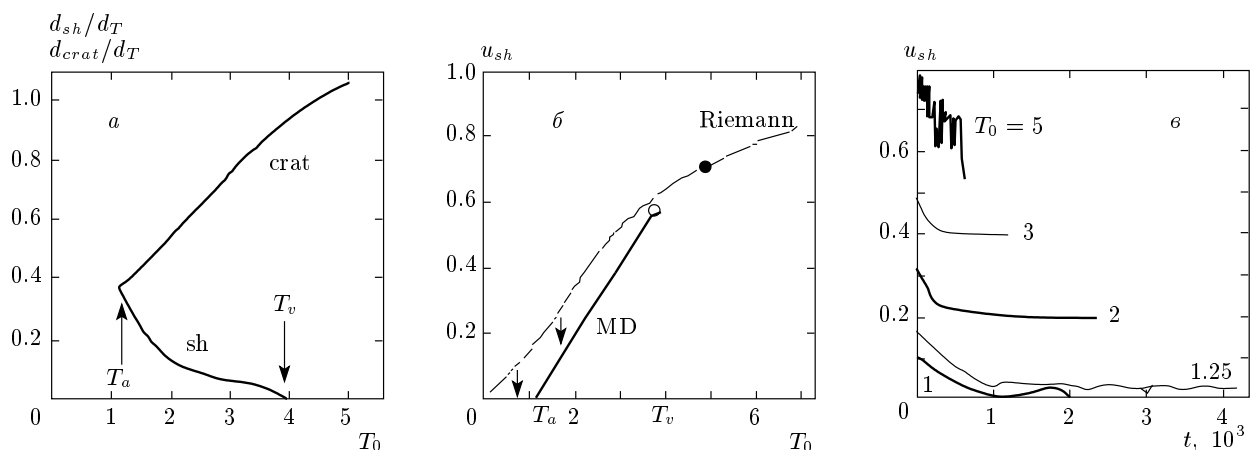


Рис. 5. Вариация параметров течения между порогами T_a и T_v ; *a* — зависимости, из которых находятся толщина оболочки и форма кратера; *b* — скорость оболочки (по функции $u_{sh}(t = \infty, T_0)$ определяется форма оболочки); *c* — допороговое ($T_0 = 1$) и сверхпороговые ($T_0 = 1.25, 2, 3$) изменения скорости оболочки. При $T_0 = 5$ показана скорость границы двухфазная система — пар (оболочки нет)

МД-расчет дает значения начальной скорости, с процентной точностью согласующиеся с газодинамическим расчетом (кривой Riemann).

Область испаренного вещества имеется при любой температуре $T_0 > 0$. При низких температурах ее масса пренебрежимо мала. В интервале температур $T_a < T_0 < T_v$ между порогом абляции и порогом испарения двухфазная область и пар разделены откольной пластиной. При $T_0 > T_v$ с ростом температуры T_0 масса пара растет, а разница между областью, занятой паром, и двухфазной областью постепенно стирается.

Вещество с потенциалом взаимодействия Леннарда–Джонса обладает высокой летучестью (отношение критической температуры T_c к температуре тройной точки T_{tr} невелико, $T_c/T_{tr} \approx 2$). Точка на изохоре начальной плотности $n_{ini} = 1.09$ МДЕ с температурой $T_0 \approx 11$ МДЕ лежит на адиабате, соединяющей эту точку с критической точкой на бинадали. При $T_0 = 5$ МДЕ скорость границы пара с двухфазной областью составляет 0.70 (черный кружок на рис. 5*b* и верхняя кривая на рис. 5*c*). Внешняя граница парового облака движется значительно быстрее. Скорость u_f переднего фронта парового слоя достигает значения 1.07 МДЕ. Соответственно, слой, занятый паром, уже при $T_0 = 5$ МДЕ оказывается достаточно протяженным (см. рис. 4).

Вернемся к относительно низким температурам. Существенно, что на нижнем пороге T_a величины d_{sh} и d_{crat} совпадают (см. рис. 5*a*). При малой надпороговости $T_0 - T_a \ll T_a$ откольная пластина дви-

жется с малой скоростью $u_{sh} \ll c_s$. Из-за того что $d_{sh} = d_{crat}$, медленно расширяющийся зазор между дном кратера и тыльной стороной пластины (рис. 3) практически пуст — мало отношение массы вещества в двухфазной области, m_2 , к массе пластины: $m_2/m_{sh} \ll 1$, т. е. почти вся выброшенная масса сосредоточена в пластине. Это относится как к нашим расчетам с потенциалом Леннарда–Джонса, так и к расчетам для металлов с многочастичным потенциалом [13] (в этой работе вычисления проведены только для допорогового, $T_0 < T_a$, или слабо надпорогового случаев, $T_0 - T_a \ll T_a$). На верхнем пороге T_v ситуация обратная: $m_2/(m_2 + m_{sh}) = 1$. Сумма $m_2 + m_{sh}$ не включает массу пара. Как отмечено выше, при $T_0 > T_v$ с ростом температуры T_0 протяженность парового слоя и его масса возрастают.

Обсудим некоторые особенности выброса при низких и высоких температурах. При неоднородном по глубине мишени нагреве распределение энтропии $s(\mu)$ в выброшенном веществе неоднородно. Здесь μ — лагранжева координата, пробегающая по массе от дна кратера (μ_{crat}) до переднего фронта μ_f парового слоя. На плоскости термодинамических переменных адиабаты выброшенного вещества образуют полосу между холодной $s_{crat} = s(\mu_{crat})$ и горячей $s_f = s(\mu_f)$ адиабатами. Отношение s_f/s_{crat} определяет ширину этой полосы. В околопороговом ($F \approx F_a$) случае полоса узкая ($s_f/s_{crat} \approx 1$) и выброс примерно однороден.

Массовая доля пара в двухфазной смеси, средний размер капель и распределение капель по раз-

мерам — все эти характеристики состава выброшенного вещества являются локальными (зависят от μ). Массовая доля пара возрастает, а размер капель убывает при изменении μ от μ_{crat} до μ_f . При высоких температурах T_0 увеличивается и ширина полосы s_f/s_{crat} . Соответственно, возрастает разница в локальных свойствах выброса между μ_{crat} и μ_f . В любом случае при малых толщинах прогретого слоя ($d_T \sim 100$ нм) медленный край μ_{crat} выброшенного вещества имеет энтропию s_{crat} порядка энтропии вещества в тройной точке.

На рис. 5а, б приведены зависимости интересующих нас величин u_{sh} , d_{sh} , d_{crat} от значения T_0 , определяющего начальный профиль температуры на гидродинамической стадии. Зависимости получены путем молекулярно-динамического расчета течения, стартующего с этого исходного профиля. Искомые формы $x(z)$ зависят от распределения плотности энергии по поверхности пятна (4.1), (4.3). Чтобы вычислить функции $x(z)$ из данных на рис. 5а, б, требуется сначала по энергии F найти два параметра d_T и T_0 , от которых зависит исходный температурный профиль. Найдем зависимости $d_T(F)$ и $T_0(F)$, полагая, что стадии электронной тепловой волны и электрон-фононной релаксации занимают малое время: $t_{eq} < t_s$, где $t_s = d_T/c_s$ — звуковое время, t_{eq} — длительность стадии электронного переноса (см. разд. 2). В этом случае температурный профиль, характеризующийся параметрами (T_0, d_T) , сложившийся на электронной стадии, можно считать начальным для гидродинамической стадии.

Из расчетов, приведенных в разд. 2, следует, что толщина d_T слоя, нагретого тепловой волной, мало меняется в интересующем нас диапазоне изменения F . Поэтому функцию $d_T(F)$ можно заменить постоянной величиной. Тогда из закона сохранения энергии и слабой зависимости теплоемкости конденсированной фазы от температуры (закон Дюлонга – Пти) получаем, что $T_0(z) \propto F(z)$. Соответственно, распределение $T_0(z)$ по пятну с точностью до постоянного множителя дается выражениями (4.1), (4.3):

$$T_0(z)/T_a = f^c \exp(-\tilde{z}^2 \ln f^c), \quad (4.4)$$

где f^c — плотность энергии в центре пятна, нормированная на пороговое значение (4.2), $\tilde{z} = 1$ на границе кратера. Зная из МД-расчетов функции $u_{sh}(T_0)$, $\hat{d}_{sh}(T_0)$, $\hat{d}_{crat}(T_0)$ и значение T_a , можно вычислить функции $u_{sh}(T_0/T_a)$, $\hat{d}_{sh}(T_0/T_a)$, $\hat{d}_{crat}(T_0/T_a)$.

В зависимости от того, превышает или нет плотность энергии в центре F^c порог F_v испарения откольной оболочки, возможны два качественно разных случая с разной формой оболочки. Если

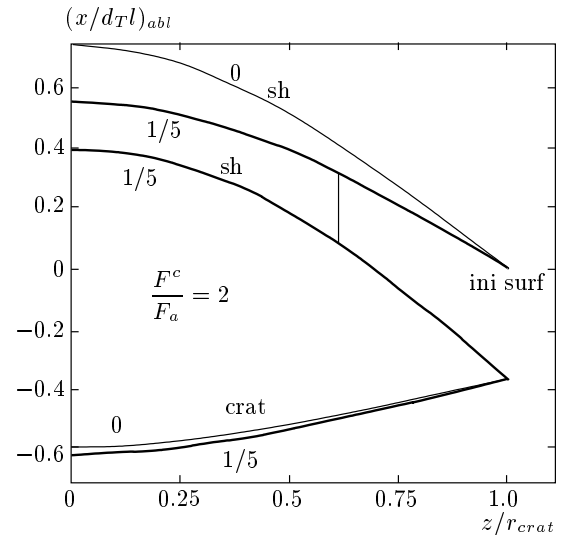


Рис. 6. Форма оболочки и кратера при поверхностной плотности энергии в центре пятна, меньшей порога испарения, $F^c < F_v$

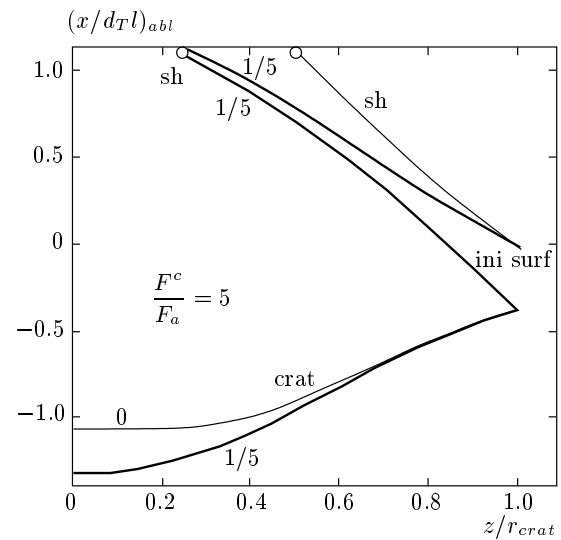


Рис. 7. Оболочка с отверстием в центре, $F^c > F_v$. Крестиком отмечено окончание оболочки

$F_a < F^c < F_v$, то оболочка имеет форму замкнутого купола (рис. 6). В случае $F_v < F^c$ в центральной части купола образуется отверстие (рис. 7). Отметим, что исчезновение оболочки на пороге испарения F_v не сказывается на форме кратера (рис. 7). Его глубина плавно нарастает к центру $z = 0$ (кривые с меткой «crat» на рис. 7), независимо от того, находится данная точка кратера под куполом или под отверстием в куполе.

На рис. 6 и 7 представлены профили оболочки

(sh) и кратера (crat) для двух значений $f^c = F^c / F_a$. Шкала смещений x относительно начального положения поверхности мишени (ini surf, уровень $x = 0$) нормирована на толщину d_{T_a} слоя прогрева при пороговой энергии. Значение толщины d_{sh} равно разнице по смещению x между двумя кривыми sh с одинаковыми метками 1/5. Для пояснения этого на рис. 6 две кривые sh соединены прямым вертикальным отрезком (длина отрезка равна d_{sh}). Верхняя из кривых sh 1/5 представляет внешнюю границу оболочки, а нижняя — внутреннюю границу той же оболочки. Расстояние x_{sh} , на которое удалилась оболочка sh от поверхности $x = 0$, растет пропорционально t , а значения d_{sh} и d_{crat} остаются постоянными (поэтому отношение $d_{sh}/x_{sh} \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$). На стадии наблюдения колец Ньютона дистанция x_{sh} на один-два порядка превышает глубину d_{crat} . Числа 0 и 1/5 у кривых на рис. 6, 7 дают значения показателя β в зависимостях $d_T(F)$ (2.8), (2.9). Таким образом иллюстрируется, как погрешность в вычислении глубины прогрева на электронной стадии (разд. 2) сказывается на форме оболочки. Значение $\beta = 0$ соответствует глубине прогрева d_T , не зависящей от поглощенной энергии F (зависимости, проведенные тонкими кривыми). Если предположить, что коэффициент температуропроводности не меняется при изменении F , получаем $\beta = 1/5$ (эти зависимости проведены жирными кривыми).

5. СРАВНЕНИЕ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ И МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Для гидродинамического моделирования разлета нагретого леннард-джонсовского кристалла использована одномерная полностью консервативная схема [30]. Уравнение состояния плавно меняется на ширине двухфазной (жидкость – твердое тело) области плавления от уравнения состояния, построенного по дебаевской модели твердого тела, до уравнения состояния жидкости, полученного из численных расчетов в работах [29, 31]. На плоскости (n, T) область плавления, разделяющая твердую и жидкую фазы, имеет вид полосы, начинающейся от тройной точки. Такое уравнение состояния описывает вещество с максимально возможной прочностью (атомарная или предельная прочность). Соответственно, на плоскости (n, T) спинопаль удалена на предельное расстояние от бинадвали и абсолютная величина отрицательного давления на спинопали максимальна [32].

На рис. 8 и 9 представлены результаты газоди-

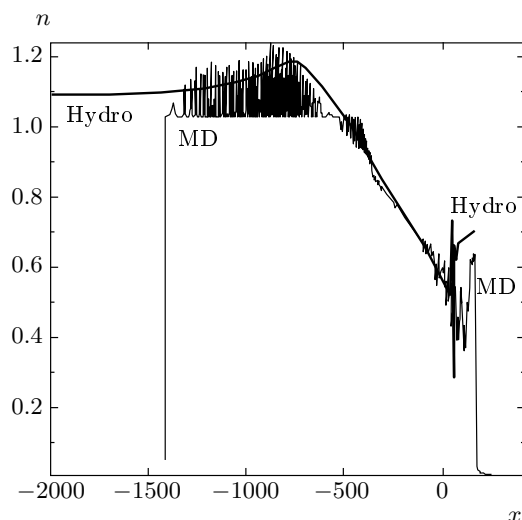


Рис. 8. Сравнение результатов газодинамического (жирная кривая Hydro) и молекулярно-динамического расчетов при одинаковых начальных данных. Показано распределение плотности $n(x, t)$ при $t = 400$ МДЕ = $1.2t_s$, $T_0 = 3$ МДЕ. В молекулярно-динамическом расчете откольная пластина тоньше

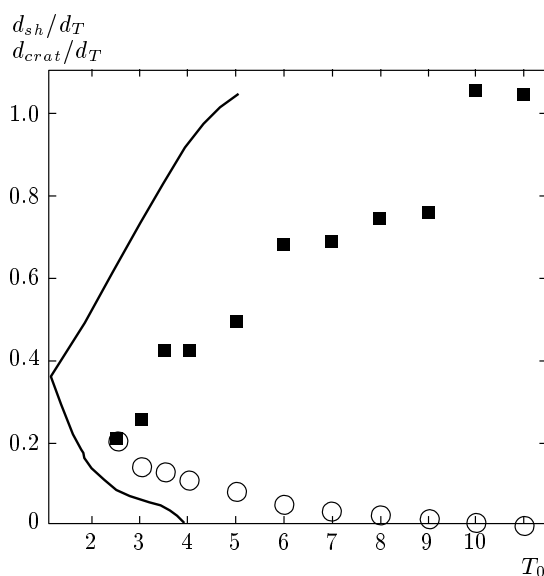


Рис. 9. Сравнение результатов молекулярно-динамических (перенесены с рис. 5а) и газодинамических (маркеры) расчетов глубины кратера $d_{crat}(T_0)$ (квадраты) и толщины оболочки $d_{sh}(T_0)$ (кружки). В газодинамическом расчете прочность вещества с потенциалом межатомного взаимодействия Леннарда–Джонса значительно выше

намических и молекулярно-динамических расчетов расширения горячего поверхностного слоя массивной мишени с одними и теми же начальными условиями: постоянной плотностью и экспоненциальным распределением температуры, принимающей значение T_0 на поверхности. В примере на рис. 8 с $T_0 = 3$ МДЕ к моменту времени $t = 1.2t_s = 1.2d_T/c_s$ формирование откольной пластины уже закончено.

Хорошо известно [28, 33], что прочность реальных макроскопических твердых тел намного (на порядки) меньше предельной атомной. Известно также, что с уменьшением толщины откольной пластины d_{sh} прочность увеличивается. Обычно считается, что в случае очень тонких пластин, когда толщина d_{sh} сравнима с межатомным расстоянием, откольная прочность будет примерно равна атомной. В молекулярно-динамическом расчете на рис. 2, 8 толщина оболочки d_{sh} составляет около двадцати межатомных расстояний. Детальный анализ показывает, что прочность даже микроскопических объектов остается значительно меньшей, чем предельная прочность. Атомные пороги T_a , T_v выше нее (рис. 9). Они находятся из газодинамического моделирования с уравнением состояния, соответствующим атомной прочности. В газодинамике толщина d_{sh} больше (рис. 8, 9), а глубина кратера d_{crat} меньше, чем в МД-расчете. Установленные в газодинамическом расчете зависимости $d_{sh}(T_0)$ и $d_{crat}(T_0)$ находятся между кривыми, следующими из МД-моделирования (рис. 9). При этом уравнение состояния, полученное с помощью молекулярно-динамических расчетов с обрезанием потенциала взаимодействия на 2.5σ [29, 31], лишь немного отличается от использованного при газодинамическом моделировании. Например, нормальная плотность кристаллической гранецентрированной кубической фазы в необрезанном потенциале (соответствующее уравнение состояния использовано в газодинамических расчетах) составляет 1.09 МДЕ, а в потенциале с обрезанием на 2.5σ эта плотность равна 1.06 МДЕ.

Выше сопоставлены газодинамические и МД-расчеты массивной (разлет в одну сторону) мишени с неоднородным начальным распределением температуры. Проведем такое же сопоставление в случае тонкого, однородно нагретого слоя (фольги), симметрично разлетающегося в две стороны. Начальное распределение температуры однородно, $T(x, 0) = T_0 = \text{const}$. Соответствующий МД-расчет описан в работе [23], где получено значение порога абляции $T_a = 0.8$. В настоящей работе выполнено газодинамическое моделирование разлета фольги

при разных значениях T_0 . Из этих расчетов нельзя получить $d_{crat}(T_0)$ (нет кратера). С ростом T_0 ($T_0 > T_a$) доля массы откольной пластины в общей массе уменьшается. Уменьшается также отношение $d_{sh}(T_0)/L$, где L — начальная толщина фольги. На пороге испарения $d_{sh}(T_0 = T_v)/L = 0$. На пороге абляции это отношение равно 0.5 в силу симметрии разлета. В газодинамике значение T_a оказалось приблизительно равным 1 (немного выше МД-порога $T_a = 0.8$). Отметим еще, что для фольги порог T_a значительно ниже, чем для массивной мишени (поскольку при равных T_0 растягивающие напряжения больше).

6. ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ КОЛЬЦА НЬЮТОНА

В экспериментах типа «возбуждение–зондирование» с ультракороткими импульсами наблюдаются интересные интерференционные явления. При отражении пробного луча от разлетающегося облака испаренного материала в работах [1–3] зарегистрированы кольца Ньютона. Их появление не зависит от материала мишени и является общей особенностью взаимодействия света с облаком расширяющегося мгновенно нагретого материала. Чтобы объяснить это явление, рассмотрим отражение света от системы, составленной из полупространства и тонкой пластинки. Пусть полупространство занимает область $-\infty < x < x_{crat}$, а промежуток $x_{crat} < x < x_{sh} - d_{sh}$ отделяет дно кратера от тыльной границы пластинки. Пластика занимает отрезок $x_{sh} - d_{sh} < x < x_{sh}$, где x_{sh} — координата ее передней границы. Пробный луч I падает на эту систему справа (рис. 10). Отраженный луч R состоит из двух компонент, R_1 и R_2 . Первая компонента возникает в результате отражения луча I от по-

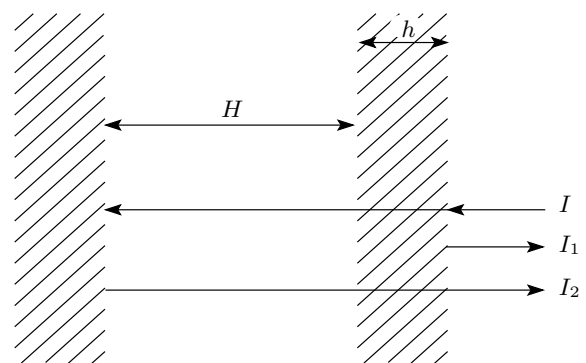


Рис. 10. Схема интерференционного эксперимента; h — толщина оболочки

верхности x_{sh} . Вторая составляющая образуется в результате многократных отражений луча, прошедшего через пластину, от дна кратера и двух сторон откольной пластины: x_{crat} , $x_{sh} - d_{sh}$ и x_{sh} . Функция $R(H, d_{sh}, N_{sh}, N_{crat}, \lambda_{probe})$ зависит от семи аргументов: двух толщин $H = |x_{sh} - d_{sh} - x_{crat}|$ и d_{sh} , четырех оптических характеристик — комплексных показателей преломления N_{sh} и N_{crat} и длины волны диагностического луча. Комплексный показатель преломления двухфазной среды, N_{2ph} , близок к единице, поскольку к моменту прихода диагностического луча промежутки H сильно расширяются (H на один-два порядка превосходит d_{crat} на отрезке времени, на котором наблюдается интерференционная картина). В технике типа «возбуждение—зондирование» кратер и пластинка формируются первым (греющим) импульсом. Расстояние $H \approx u_{sh}t$ линейно растет со временем. На дне кратера и пластинке интерферирует диагностический луч, приходящий с задержкой порядка наносекунды относительно накачивающего импульса [1–3].

Функция $R(H, d_{sh}, N_{sh}, N_{crat}, \lambda_{probe})$ периодична по аргументу H с периодом $\lambda_{probe}/2$ при фиксированных значениях остальных аргументов. Поэтому в точке с фиксированным значением z под оболочкой, $0 < z < z_a$ (рис. 6) или $z_v < z < z_a$ (рис. 7), происходит чередование светлых и темных полос с периодом по времени $\lambda_{probe}/2u_{sh}$. Здесь расстояния z_a, z_v от оптической оси соответствуют порогам абляции и испарения. При этом через точку z проходят кольца Ньютона с ростом t в направлении от центра к периферии. Система из кратера и оболочки на рис. 5, 6 подобна зеркалу с прижатой к нему линзой (система, в которой обычно наблюдаются кольца Ньютона). С течением времени оболочка удаляется на все большее расстояние от дна кратера $H \approx u_{sh}t$, число колец на отрезке $z_v < z < z_a$ растет, а сами кольца становятся тоньше.

Были проведены расчеты интерференции по формулам Френеля с учетом бесконечного числа отражений для справочных значений комплексного показателя преломления металлов. Интерференционная картина существует, если толщина d_{sh} не превышает величины порядка толщины скин-слоя δ_{skin} . Иначе становится малым вклад второй составляющей $R_2 \ll R$, а значит, становится малой и относительная амплитуда интерференционных осцилляций (непрозрачная оболочка). В экспериментах глубокие осцилляции наблюдаются вблизи края кратера $z_{crat} = z_a$ [1–3]. В соответствии с рис. 6 и 7 это накладывает ограничения на величины d_{sh} и d_{crat} на пороге абляции, где максимальна толщина d_{sh} .

В соответствии со сказанным выше, получается, что из наблюдений колец Ньютона следует доказательство существования чрезвычайно тонкой откольной оболочки с толщиной d_{sh} порядка десятка нанометров. Обсуждаемые эксперименты являются уникальными, поскольку позволяют наблюдать слои конденсированного вещества столь малой толщины.

В экспериментах с более массивными оболочками проникновение света сквозь слой d_{sh} невозможно (пластина d_{sh} намного толще скин-слоя δ_{skin}). В измерениях типа «возбуждение—зондирование» с фемтосекундными лазерными импульсами кольца Ньютона играют роль, аналогичную эффекту Доплера в технике интерференционных измерений скорости более массивных откольных пластин (см., например, [27, 28]). По периоду $\lambda_{probe}/2u_{sh}$ смены полос в фиксированной точке z определяется скорость u_{sh} . Правда, таким образом находится асимптотическая скорость оболочки (в данной точке z), которая устанавливается при больших удалениях оболочки, $x_{sh}(t; z)/d_{crat} \gg 1$ (поскольку $\lambda_{probe}/2 \gg d_{crat}$: $\lambda_{probe} \approx 1$ мкм, $d_{crat} \approx 50$ нм). Звуковые осцилляции (рис. 5б), проявляющиеся при малых удалениях оболочки порядка $(u_{sh}/c_s)d_{sh}$, с помощью колец Ньютона наблюдать нельзя.

Имеется еще ряд других различий между фемтосекундными ($d_{sh} \sim \delta_{skin}$) и ударно-волновыми ($d_{sh} \gg \delta_{skin}$) экспериментами. Во-первых, в одном лазерном эксперименте, ввиду зависимости F от координат (4.1), пробегается сразу (разные точки по z) весь набор состояний от холодных до горячих. Это значит, что наблюдаются оба порога, F_a и F_v . В ударно-волновом эксперименте для этого потребовалась бы серия выстрелов с разными давлениями на фронте ударной волны. С другой стороны, в лазерном эксперименте за импульсом накачки следует только один диагностический импульс. Поэтому лазерный эксперимент дает только одну точку в зависимости положений колец Ньютона от времени. Чтобы определить эту зависимость (по ней находится u_{sh}), требуется серия экспериментов с разными временными задержками между греющим и диагностическим импульсами. В ударно-волновых экспериментах доплеровский измеритель определяет скорость u_{sh} за один эксперимент.

Во-вторых, в фемтосекундных экспериментах адиабата разгрузки начинается с изохоры начальной плотности твердой мишени n_{ini} , а в опытах с ударными волнами — с адиабаты Гюгонио при повышенной (из-за сжатия в ударной волне) плотности $n > n_{ini}$. Поэтому пороговые значения энтропии s_a и s_v значительно выше при лазерном нагревании. Со-

ответственно, в лазерных экспериментах конденсированная фаза (жидкость) в состояниях на бинадали существенно горячее (ближе к критической точке), чем в ударно-волновых. Фемтосекундные эксперименты ближе к экспериментам со взрывающимися проволочками [34] (разумеется, при совершенно различных пространственных масштабах).

7. ВЛИЯНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛА НА ХАРАКТЕР РАЗЛЕТА МИШЕНИ

Абляционный и испарительный пороги по температуре (T_a , T_v) существуют у любых конденсированных сред с конечным сопротивлением растяжению. Здесь имеются в виду массивные мишени со спадающим в глубину начальным профилем температуры (не обязательно созданным ультракоротким лазерным импульсом). Величина порогов меняется от вещества к веществу из-за изменения термодинамических свойств и кинетики разрушения. Пороги зависят также от толщины нагретого слоя d_T (уменьшаются с ростом d_T). Нас интересуют сверхтонкие слои d_T (десятки или сотни межатомных расстояний). Величина порога зависит от отношения $\tilde{T}_{cr} = T_{cr}/T_{tr}$ температур в критической и тройной точках. Металлы отличаются высоким значением этой величины ($T_{cr}/T_{tr} \sim 10$) от более летучих веществ ($T_{cr}/T_{tr} \sim 1$). Это обусловлено более широкой ямой в потенциале межатомного взаимодействия металлов по сравнению с другими веществами (например, по сравнению с потенциалом Леннарда–Джонса, для которого $T_{cr}/T_{tr} \sim 2$). Простой сравнительный анализ, выполненный ниже, связывает порог абляции T_a с плавлением (универсальность порога абляции). Следовательно, естественно использовать нормировку $\tilde{T} = T/T_{tr}$, $\tilde{\rho} = \rho/\rho_{ini}$, $\tilde{p} = p/p_{ms}$ на температуру T_{tr} , плотность холодного вещества ρ_{ini} и давление на кривой плавления p_{ms} . Здесь p_{ms} — давление в точке пересечения изохоры ρ_{ini} с границей между областью плавления и твердой фазой. Двухфазная область плавления (смесь жидкости и твердого тела) ограничена тройной точкой и границами солидус (со стороны твердой фазы) и ликвидус (со стороны жидкой). Для веществ с постоянной Грюнайзена порядка двух давление на кривой плавления $p_{ms} \approx 6nT$.

Вывод о том, что порог T_a располагается в районе значений T_{ms} , T_{ml} , окаймляющих область плавления, следует из результатов молекулярно-динамического моделирования и сравнения термодинамических характеристик сред с потенциалом Леннарда–Джонса и простых металлов.

Для примера рассмотрим алюминий. Сопоставим наклоны $d\tilde{T}/d\tilde{\rho}$, $d\tilde{p}/d\tilde{\rho}$, бинадалей, кривых плавления и адиабат. Рассмотрим область плавления возле тройной точки. Сопоставим также давления на спинодали $|\tilde{p}_s| = |p_s|/p_{ms}$. Удельное изменение плотности $\Delta\tilde{\rho} = \Delta\rho/\rho_{ini}$ при нагревании от $T = 0$ до T_{tr} и при плавлении различаются незначительно. Эти изменения составляют соответственно 9% и 9% для потенциала Леннарда–Джонса и 6% и 7% для алюминия. Поэтому средние наклоны кривых сублимации $(d\tilde{T}/d\tilde{\rho})|_{subl} = 1/\Delta\tilde{\rho}|_{subl}$ различаются примерно в полтора раза. Наклоны кривых плавления $(d\tilde{T}/d\tilde{\rho})|_{melt}$ равны 5.2 (Al) и 9 (ЛД) — на плоскости (ρ, T) кривая плавления леннарда-джонсовского кристалла идет круче. Наклоны адиабат $(d\tilde{T}/d\tilde{\rho})|_s$ меньше наклона кривой плавления. Поэтому адиабата, идущая по твердой фазе, при снижении плотности постепенно приближается к кривой плавления.

Для динамики растяжения главными являются зависимости $p(\rho, s_{fix})$ на участке от изохоры ρ_{ini} (начальное нагружение вещества) до спинодали (предельное растяжение). Точка на бинадали (вещество не нагружено) разделяет сжатые, $p > 0$, и растянутые, $p < 0$, состояния. Наклон адиабаты алюминия $d\tilde{p}/d\tilde{\rho}$ в 1.4 раза больше. Прочность алюминия выше — отношение безразмерных давлений на спинодали равно $|\tilde{p}_s^{Al}|/|\tilde{p}_s^{LJ}| \approx 2.4$. Расчеты адиабат и спинодалей кристалла выполнены по уравнению состояния, полученному из дебаевской модели твердого тела. Жидкость описывается уравнением состояния [28, 29] (ЛД) и уравнением состояния, аналогичным использованному в работе [11], с заменой двух потенциалов Юкавы на две степенные функции (алюминий). Полученное таким способом уравнение проверялось путем сравнения с широкодиапазонным полуэмпирическим уравнением состояния [24] в области положительных давлений. Из расчета площадей под кривой $p(\rho, s_{fix})$ на участках $p > 0$ и $p < 0$ следует, что порог в случае алюминия должен быть примерно в три раза выше. Молекулярно-динамические расчеты с потенциалом Леннарда–Джонса дают: $T_a \approx T_{ms}$ (массивная мишень) и $T_a \approx 0.7T_{ms}$ (однородно нагретая фольга). Для алюминия имеем: $T_{ms} \approx 1.3$ кК, $T_{ml} \approx 1.6$ кК. Отсюда следует оценка порога абляции алюминия: $T_a \sim 4\text{--}5$ кК (массивная мишень) и $T_a \sim 3$ кК (фольга).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 04-02-16972).

ЛИТЕРАТУРА

1. D. von der Linde and K. Sokolowski-Tinten, *Appl. Surf. Sci.* **154-155**, 1 (2000).
2. K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, A. Cavalleri, D. von der Linde, A. Oparin, J. Meyer-ter-Vehn, and S. I. Anisimov, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 224 (1998).
3. K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, A. Cavalleri, and D. von der Linde, *Appl. Surf. Sci.* **127-129**, 755 (1998).
4. B. C. Stuart, M. D. Feit, S. Herman, A. M. Rubenchik, B. W. Shore, and M. D. Perry, *J. Opt. Soc. Amer. B* **13**, 459 (1996).
5. S. I. Anisimov and B. Rethfeld, *SPIE Proc.* **3093**, 192 (1997).
6. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, Ю. В. Петров, Н. В. Шапошников, С. И. Анисимов, Д. фон дер Линде, Ю. Мейер-тер-Фен, Письма в ЖЭТФ **69**, 284 (1999).
7. М. Б. Агранат, С. И. Анисимов, С. И. Ашитков, А. В. Кириллин, П. С. Кондратенко, А. В. Костановский, В. Е. Фортов, ЖЭТФ **113**, 2162 (1998).
8. В. В. Жаховский, К. Нишихара, С. И. Анисимов, Н. А. Иногамов, Письма в ЖЭТФ **71**, 241 (2000).
9. V. V. Temnov, K. Sokolowski-Tinten, P. Zhou, and D. von der Linde, *Appl. Phys. A* **78**, 483 (2004).
10. M. Hashida, A. F. Semerok, O. Gobert, G. Petite, Y. Izawa, and J. F. Wagner, *Appl. Surf. Sci.* **197-198**, 862 (2002).
11. T. E. Itina, J. Hermann, Ph. Delaporte, and M. Sentis, *Thin Solid Films* **453-454**, 513 (2004).
12. D. S. Ivanov and L. V. Zhigilei, *Phys. Rev. B* **68**, 064114 (2003).
13. C. Schaefer, H. M. Urbassek, and L. V. Zhigilei, *Phys. Rev. B* **66**, 115404 (2002).
14. P. Lorazo, L. J. Lewis, and M. Meunier, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 225502 (2003).
15. М. И. Каганов, И. М. Лифшиц, Л. В. Танатаров, ЖЭТФ **31**, 242 (1956).
16. Yu. V. Petrov, *Laser and Part. Beams* **23**, 283 (2005).
17. A. V. Lugovskoy and I. Bray, *Phys. Rev. B* **60**, 3279 (1999).
18. B. Rethfeld, A. Kaiser, M. Vicanek, and G. Simon, *Phys. Rev. B* **65**, 214303 (2002).
19. Л. А. Фальковский, Е. Г. Мищенко, ЖЭТФ **88**, 84 (1999).
20. С. И. Анисимов, Б. Л. Капелинович, Т. Л. Перельман, ЖЭТФ **66**, 776 (1974).
21. *Физические величины. Справочник*, под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова, Энергоатомиздат, Москва (1991).
22. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, Ю. В. Петров, Н. В. Шапошников, С. И. Анисимов, Д. фон дер Линде, Ю. Мейер-тер-Фен, Письма в ЖЭТФ **69**, 284 (1999).
23. С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, К. Нишихара, А. М. Опарин, Ю. В. Петров, Письма в ЖЭТФ **77**, 731 (2003).
24. А. В. Бушман, И. В. Ломоносов, В. Е. Фортов, *Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии*, ИПХФ РАН, Черноголовка (1992).
25. Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд, *Молекулярная теория газов и жидкостей*, Изд-во иностр. лит., Москва (1961).
26. С. И. Анисимов, Н. А. Иногамов, Б. Рэтфельд, ЖЭТФ **115**, 2091 (1999).
27. T. Antoun, L. Seaman, D. R. Curran, G. I. Kanel, S. V. Razorenov, and A. V. Utkin, *Spall Fracture*, Springer-Verlag, New York (2003).
28. Г. И. Канель, С. В. Разоренов, А. В. Уткин, В. Е. Фортов, *Ударно-волновые явления в конденсированных средах*, Янус-К, Москва (1996).
29. Y. Choi, T. Ree, and F. H. Ree, *J. Chem. Phys.* **99**, 9917 (1993).
30. А. А. Самарский, Ю. П. Попов, *Разностные методы решения задач газовой динамики*, Наука, Москва (1980).
31. F. H. Ree, *J. Chem. Phys.* **73**, 5401 (1980).
32. А. Ю. Куксин, в сб. *Физика экстремальных состояний вещества-2005*, ИПХФ РАН, Черноголовка (2005), с. 168.
33. В. С. Никифоровский, Е. И. Шемякин, *Динамическое разрушение твердых тел*, Наука, Новосибирск (1979).
34. S. I. Tkachenko, V. S. Vorob'ev, and S. P. Malysenko, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 4047 (2003).