

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ ЗОЛОТА: ЭФФЕКТ РЕЛАКСАЦИИ ДАВЛЕНИЯ

Г. Э. Норман, С. В. Стариков, В. В. Стегайлов*

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

*Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 10 октября 2011 г.

Проведено атомистическое моделирование абляции золота при облучении металла фемто- и пикосекундными лазерными импульсами. Используется атомистическая модель с явным учетом электронной подсистемы и зависимостью межоионного потенциала от электронной температуры. Использование такого потенциала позволяет учесть изменение физических свойств ионной подсистемы при нагреве электронной подсистемы. По результатам моделирования обнаружено существенное различие между характеристиками абляции при разных длительностях лазерных импульсов. Для абляции при субпикосекундном импульсе удается выделить два механизма разрушения металла, связанных с эволюцией давления в системе.

1. ВВЕДЕНИЕ

Лазерная абляция имеет множество потенциальных технологических применений в микрообработке и создании поверхностных наноструктур [1–3]. В то же время механизм лазерной абляции металлов остается не вполне ясным. На это указывают как противоречия в экспериментальных данных, так и отсутствие хорошего согласия между экспериментами и предсказаниями теории. Одним из наиболее изучаемых металлов является золото, которое характеризуется большим, чем остальные металлы, временем релаксации электронной температуры T_e к температуре ионов T_i [4, 5]. Поэтому золото является удобным металлом для исследования эффекта двухтемпературности ($T_e \gg T_i$) и построения общей модели лазерной абляции металлов.

Наиболее интересными характеристиками абляции при единичном лазерном импульсе являются минимальная пороговая величина поглощенного флюенса F_{abs} , необходимая для начала абляции, и соответствующая этому энерговкладу глубина d кратера. В работе [6] пороговые значения F_{abs} и d

для золота были найдены равными приблизительно 10 мДж/см² и 10 нм соответственно (глубина d оценена как средняя по серии импульсов). Измеренная в работах [7, 8] пороговая величина F_{abs} для золота равна приблизительно 20 мДж/см². С другой стороны, в работе [9] абляция золота имела пороговое значение $F_{abs} \approx 150$ мДж/см² (с учетом рассчитанного в [10] коэффициента поглощения) и $d \approx 50$ нм при данном энерговкладе. В экспериментах [7, 8] использовались импульсы рентгеновского излучения, тогда как в [6, 9] — оптические импульсы. Во всех указанных работах использовались лазерные импульсы пико- или субпикосекундной длительности. На данный момент не существует законченной теории, описывающей все указанные противоречивые данные по абляции золота.

Проникновение импульсного лазерного излучения (как правило, оптического диапазона или мягкого рентгена) в вещество приводит к сильному нагреву электронной подсистемы при абляции. Таким образом, процесс лазерной абляции происходит в крайне неравновесном состоянии двухтемпературного разогретого плотного вещества (warm dense matter), теория которого только начинает развиваться. Нагретая лазерным излучением электронная под-

*E-mail: starikov@ihed.ras.ru

система начинает обмениваться энергией с ионной подсистемой, что в результате приводит к выносу вещества с поверхности. Одной из основных трудностей при теоретическом описании и построении атомистической модели является тот факт, что характерное время установления равновесия между электронами и ионами соизмеримо со временем самой абляции и временами сопутствующих процессов (телопереноса, фазовых переходов, возникновения ударных волн и др.)

В работах [11–13] для описания процесса абляции использовались приближение сплошной среды и двухтемпературное уравнение состояния. Однако такой подход не позволяет учитывать явления на атомистическом уровне, существенные для описания метастабильных состояний, разрушения и др., и может предсказывать результаты только при значениях F_{abs} в несколько раз больших, чем пороговый энерговклад.

Атомистическая модель двухтемпературной системы, предложенная в работах [14, 15], заключалась в том, что электронная подсистема моделировалась сплошной средой. Эволюция ионной подсистемы изучалась с помощью метода молекулярной динамики. Передача энергии от электронной подсистемы к ионной выполнялась путем введения термостата в молекулярно-динамическую модель. Такой подход позволяет объяснить некоторые особенности лазерной абляции [15, 16], но дает существенное завышение порогового значения d , по крайней мере, для двух металлов, Cu [14, 17] и Au [16]. В этих исследованиях абляция связана с формированием и распространением ударной волны и волны разгрузки в глубь металла. Указанное противоречие показывает, что механизм абляции более сложен вблизи пороговых значений энерговкладов.

Одним из недостатков существующей атомистической двухтемпературной модели [14, 15, 18] является невозможность учесть влияние электронного возбуждения на силы, действующие между ионами. В такой модели не учитываются изменение физических свойств ионной подсистемы при нагреве электронной подсистемы [19, 20] и появление электронного давления [21, 22]. С другой стороны, в работе [12] отмечается, что влияние электронного давления на динамику ионов может быть ответственно за особый механизм лазерной абляции.

Золото является металлом с одним s - и десятью d -электронами на внешней оболочке атома. Поэтому электронная подсистема золота содержит электро-

ны, ведущие себя подобно идеальному газу свободных электронов (делокализованные s -электроны), а также электроны, к которым это приближение не применимо (локализованные d -электроны) [23]. Механические влияния этих двух типов электронов на ионную подсистему сильно различаются. Энергия идеального электронного газа зависит только от T_e и концентрации электронов, следовательно, определяется средней концентрацией n_i ионов (из-за электронейтральности системы). Поэтому делокализованные электроны могут оказывать механическое влияние на ионную подсистему только при наличии градиентов температуры T_e или концентрации n_i [24, 25]. С другой стороны, энергия локализованных электронов зависит явно от координат ионов. Межионные силы, рассчитываемые как производные энергии по координатам ионов, изменяются при росте T_e . В связи с этим нагрев локализованных электронов приводит к существенным изменениям физических свойств ионной подсистемы даже в отсутствие указанных градиентов. Например, при увеличении T_e меняется фононный спектр золота и растет температура его плавления [19, 26].

В работе [25] атомистическая двухтемпературная модель (two-temperature model) абляции золота была дополнена силой увлечения идеального электронного газа, которая пропорциональна градиенту давления свободных (делокализованных) электронов, ∇P_e^{deloc} . Таким образом, влияние электронной подсистемы на ионную было учтено лишь частично. Для полного описания взаимодействия двух подсистем необходимо учитывать локализованные электроны, которые не могут быть описаны в рамках модели идеального газа свободных электронов.

В данной работе предложена атомистическая двухтемпературная модель с потенциалом межионного взаимодействия, зависящим от электронной температуры T_e (ETD-потенциал, electron temperature dependent potential). Использование такого потенциала позволяет учесть изменение физических свойств ионной подсистемы при нагреве электронной. Модель была использована для моделирования процесса лазерной абляции золота. В разд. 2 детально описан процесс создания ETD-потенциала и его верификация. Раздел 3 содержит информацию об основных особенностях проведенного моделирования лазерной абляции. В разд. 4 изложены результаты моделирования и проводится сравнение с имеющимися экспериментальными данными по абляции золота.

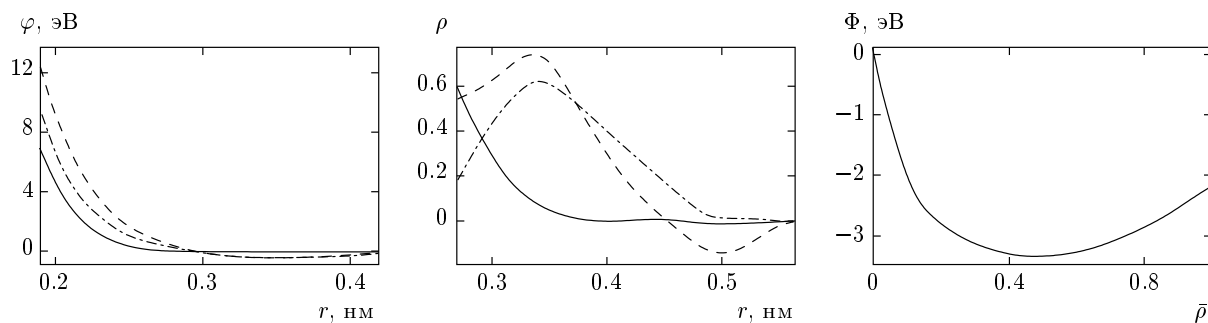


Рис. 1. Потенциальные функции ЕАМ-потенциала для золота при трех различных электронных температурах: сплошные линии — $T_e = 0.01$ эВ; штрихпунктирные — $T_e = 3$ эВ; штриховые — $T_e = 6$ эВ. Функция $\Phi(\bar{\rho})$ от T_e не зависит

2. РАЗРАБОТКА МЕЖИОННОГО ПОТЕНЦИАЛА С ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТЬЮ ОТ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

Для описания свойств металлов в атомистическом моделировании обычно используется потенциал погруженного атома (embedded atom method, ЕАМ) [27–29]. Энергия взаимодействия для указанного межчастичного потенциала может быть представлена в виде суммы двух частей:

$$U = \sum_{i < j} \varphi(r_{ij}) + \sum_j \Phi(\bar{\rho}_j). \quad (1)$$

Первое слагаемое φ есть парный потенциал взаимодействия как функция расстояния r_{ij} между ионами i и j . Второе слагаемое учитывает многочастичное взаимодействие, поскольку функция «погружения» Φ зависит от эффективной «электронной плотности» $\bar{\rho}_j$ в месте расположения j -го иона, наводимой всеми остальными ионами системы:

$$\bar{\rho}_j = \sum_{i \neq j} \rho(r_{ij}), \quad (2)$$

где $\rho(r_{ij})$ представляет собой функцию «электронной плотности», наводимой ионом i .

ЕТД-потенциал был разработан как ЕАМ-потенциал с параметрической зависимостью функций $\rho(r_{ij})$ и $\varphi(r_{ij})$ от T_e . На первом этапе было создано три различных ЕАМ-потенциала для разных значений T_e : 0.01, 3.0 и 6.0 эВ. Потенциалы разрабатывались с помощью процедуры подгонки по силам (force matching) [29, 30]. Данная процедура заключается в расчете сил, действующих на ионы в различных структурах, с помощью расчетов *ab initio* и в последующем поиске эффективного усредненного межсионного потенциала, наилучшим образом вос-

производящего эти силы. Таким образом разработанный потенциал является согласованным с квантовыми расчетами по силам.

Для квантовых расчетов использовался программный код VASP [31], основанный на методе функционала плотности и базисе из плоских волн. При расчете сил использовались следующие параметры: псевдопотенциал с электронной системой $5d^{10}6s^1$; приближение локальной плотности (local density approximation, LDA); Γ -точка в k -пространстве; базис плоских волн для описания электронных орбиталей имел радиус обрезания при энергии 600 эВ. В расчетах применялось распределение Ферми–Дирака с заданным значением T_e . Использовались 33 репрезентативных системы с общим числом ионов, равным 2930. Данные системы включали в себя состояния, соответствующие жидкости и кристаллу (с учетом тепловых смещений) при различных плотностях.

Для создания ЕАМ-потенциалов, по результатам квантовых расчетов, использовался программный код PotFit [29]. В этом коде поиск потенциальных функций реализован как метод блуждания броуновской частицы с понижающейся температурой (отжиг) в градиентном поле многомерного пространства параметров, задающих потенциал. Функции ЕАМ-потенциалов задавались кубическими сплайнами, узлы которых и являлись параметрами потенциалов. На рис. 1 представлены найденные потенциальные функции $\rho(r)$, $\varphi(r)$ и $\Phi(\bar{\rho})$ для разных значений T_e . Потенциалы удалось сконструировать таким образом, чтобы функция $\Phi(\bar{\rho})$ была одинакова для всех T_e . Все три потенциала воспроизводят силы, рассчитанные в коде VASP, с точностью 15–20%, что является хорошей точностью для данного метода [29].

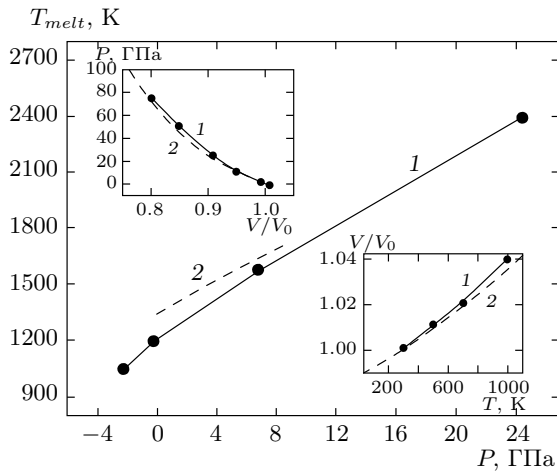


Рис. 2. Изотерма при комнатной температуре (верхняя вставка), кривая теплового расширения (нижняя вставка) и кривая плавления золота: 1 — результат моделирования с разработанным ETD-потенциалом; 2 — экспериментальные данные [38–40]. V_0 — равновесный объем

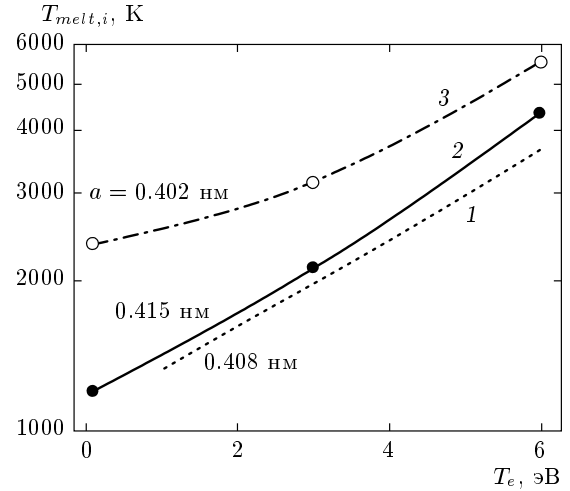


Рис. 3. Зависимость $T_{melt,i}(T_e)$ для золота. Приведены результаты для различных плотностей (a — постоянная решетки): 1 — зависимость из работы [19]; 2 и 3 — результаты двухфазного моделирования в данной работе

Следующий этап разработки заключался в создании параметрической зависимости функций $\rho(r)$ и $\varphi(r)$ от T_e . Это было сделано путем представления указанных функций в виде квадратичных полиномов по T_e :

$$\rho(r, T_e) = \rho_0(r) + \rho_1(r)T_e + \rho_2(r)T_e^2, \quad (3)$$

$$\varphi(r, T_e) = \varphi_0(r) + \varphi_1(r)T_e + \varphi_2(r)T_e^2. \quad (4)$$

Функциональные зависимости (3) и (4) вместе с функцией $\Phi(\bar{r})$ представляют собой разработанный ETD-потенциал, который в данном случае имеет семь независимых функций.

Разработанный ETD-потенциал при низком значении T_e хорошо воспроизводит термодинамические и механические свойства золота, известные из эксперимента (уравнение состояния, кривую плавления, упругие константы и др.). На рис. 2 представлены результаты верификации созданного ETD-потенциала при $T_e = (0.01-0.1)$ эВ. Хорошее согласие результатов моделирования с экспериментальными данными демонстрирует надежность использования ETD-потенциала не только для исследования двухтемпературного состояния, но и для описания равновесных свойств золота, когда $T_e = T_i$.

Одним из эффектов, который воспроизводит ETD-потенциал, является увеличение температуры плавления $T_{melt,i}$ ионной подсистемы при нагреве электронной подсистемы [19, 20, 26]. На рис. 3 пред-

ставлены результаты, полученные в данном исследовании и в работе [19]. Температура плавления рассчитывалась с помощью метода двухфазного моделирования [32, 33].

Другим эффектом, который воспроизводит ETD-потенциал, является увеличение давления P_e^{loc} локализованных электронов при росте T_e . При увеличении T_e от 0 до 6 эВ давление в системе, описанной ETD-потенциалом, возрастает от 0 до 105 ГПа. Вместе с давлением P_e^{deloc} делокализованных электронов суммарное давление в золоте достигает 200 ГПа при $T_e = 6$ эВ [19, 21]. На рис. 4 показаны зависимости полного давления P (вычисленного с помощью кода VASP) и давления P_e^{loc} (вычисленного с помощью молекулярной динамики с ETD-потенциалом) от значения T_e . Разница между указанными зависимостями определяется величиной $P_e^{deloc}(T_e)$.

Основная цель введения ETD-потенциала — обеспечить правильное описание сил, действующих на ионы, в двухтемпературном состоянии системы. В модели отсутствуют силы взаимодействия между электронами и ионами, в отличие, например, от работы [34]. ETD-потенциал описывает только ионную подсистему, не замкнутую по отношению к электронной подсистеме, которая не входит явно в молекулярно-динамическую модель. Этот факт позволяет рассматривать ионы как частицы, двигающиеся в силовом поле, зависящем от внешнего параметра T_e .

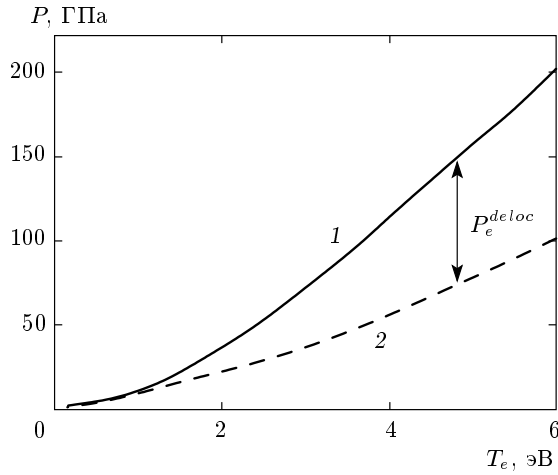


Рис. 4. Зависимость давления золота от T_e : 1 — полное давление P , вычисленное с помощью расчетов *ab initio* (использовался код VASP); 2 — давление P_e^{loc} в системе, описанной ETD-потенциалом, восстановленное по теореме вириала в молекулярно-динамическом расчете. Разница между зависимостями определяет P_e^{deloc}

3. ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА АБЛЯЦИИ

Для моделирования процесса лазерной абляции золота использовалась атомистическая двухтемпературная модель с ETD-потенциалом. Модель была реализована как развитие молекулярно-динамического кода LAMMPS [18, 35]. Электронная подсистема описывалась как непрерывная среда с температурой T_e [12, 15, 18]. Эволюция T_e определялась выражением

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla(k_e \nabla T_e) - G(T_e - T_i) - \frac{I(t)e^{-x/l}}{l}, \quad (5)$$

где C_e — электронная теплоемкость, k_e — электронная теплопроводность из работы [15], G — константа электрон-ионного взаимодействия из работы [15], I — эффективная интенсивность лазерного импульса длительностью τ , l — глубина поглощения. Все основные расчеты проводились с использованием зависимости $C_e(T_e)$ из работы [4], однако для проверки стабильности модели было проведено несколько расчетов с зависимостью $C_e(T_e)$ из работы [24]. Использовались два набора τ и l : для моделирования оптических фемтосекундных импульсов [6, 9] $\tau = 0.1$ пс и $l = 6$ нм; для моделирования рентгеновских пикосекундных импульсов [8] $\tau = 7$ пс и $l = 18$ нм.

Ионная подсистема описывалась как молекулярно-динамическая модель с уравнением движения

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i(T_e) + \mathbf{F}_i^{Lang}(T_e, T_i) - \frac{\nabla(P_e^{deloc})}{n_i}, \quad (6)$$

где сила, действующая на ион, складывалась из трех составляющих. Первое слагаемое является силой ETD-потенциала, зависящей от локального значения T_e . Второе слагаемое является случайной силой ланжевеновского термостата, обеспечивающего передачу тепловой энергии от электронной подсистемы к ионной [15, 18]. Последнее слагаемое представляет собой силу увлечения идеального газа делокализованных электронов [24, 25], где n_i — ионная концентрация. Использовалась аппроксимация $P_e^{deloc} = AT_e^2$, где коэффициент A определялся из разницы P и P_e^{loc} (см. рис. 4). Главный вклад в $\nabla(P_e^{deloc})$ дает градиент электронной концентрации, который на поверхности металла достигает наибольшего значения. Была использована разностная формула

$$\nabla(P_e^{deloc}) = \frac{A}{dx} \left[T_e^2(x + dx) - \frac{x}{x + l_f} T_e^2(x) \right], \quad (7)$$

где x — координата, отсчитанная от поверхности в глубину металла, $dx = 3$ нм, l_f — эффективная длина свободного пробега электрона, принятая в данной работе равной 12 нм. Для верификации проводились также расчеты при $l_f = 6$ нм и $l_f = 18$ нм, которые продемонстрировали слабую зависимость результатов от этого параметра. Так как вакууму приписывается $T_e = 0$, выражение (7) дает максимальное значение на поверхности металла. В глубине металла выражение асимптотически переходит в

$$\nabla(P_e^{deloc}) = A \nabla(T_e^2),$$

что соответствует выражению для силы увлечения электронного газа в объеме [24].

Расчетная ячейка имела размеры 2108 нм в направлении x , 28.6 нм в направлении y и 8.2 нм в направлении z . Использовались периодические граничные условия вдоль направлений y и z . Ионы золота на начальной стадии моделирования формировали ГЦК-решетку в половине расчетной ячейки ($1054 \text{ нм} < x < 2108 \text{ нм}$). В моделировании использовались 14422800 ионов. Открытая поверхность кристалла была перпендикулярна оси x .

Значение T_e зависело только от координаты x . Распределение T_e вдоль x задавалось ступенчатой функцией с шагом $dx = 3$ нм. После приведения системы в равновесное состояние ($P = 0$,

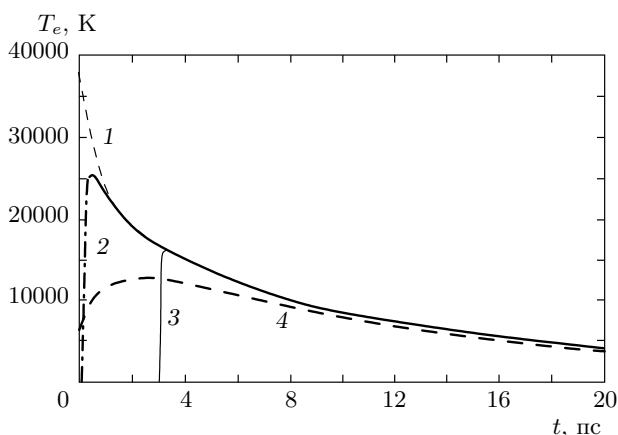


Рис. 5. Временные зависимости T_e в разных точках пространства при релаксации системы в ходе расчета с $\tau = 0.1$ пс, $l = 6$ нм и $F_{abs} = 121$ мДж/см²: 1 — в месте первоначального расположения поверхности золота ($x = 0$); 2 — в точке, расположенной первоначально в вакууме на расстоянии 3 нм от поверхности ($x = -3$ нм); 3 — то же, что и зависимость 2, но на расстоянии 6 нм от поверхности ($x = -6$ нм); 4 — на глубине 33 нм от первоначального положения поверхности ($x = 33$ нм). Запаздывание зависимостей 2 и 3 обусловлено тем фактом, что нагрев в этих точках может происходить, только когда поверхность вследствие расширения металла достигнет этих положений

$T_i = T_e = 300$ К) начинался нагрев поверхности (см. уравнение (5)) длительностью τ . На рис. 5 показаны зависимости T_e от времени в разных точках пространства в ходе расчета.

Атомистическая двухтемпературная модель использовалась на протяжении первых 30 пс расчета. В течение этого времени происходила практически полная термическая релаксация двух подсистем. Поглощенный поток F_{abs} определялся через суммарное изменение полной энергии ионной подсистемы, вызванное действием всех трех слагаемых в формуле (6). Значение F_{abs} в этом случае оказывалось на 10–15% больше, чем величина τI (так как в уравнении (5) не учитывается механическое воздействие электронной подсистемы на ионную). Дальнейший расчет проводился без учета электронной подсистемы с ETD-потенциалом при фиксированном значении $T_e = 0.1$ эВ.

4. АБЛЯЦИЯ ЗОЛОТА КАК РЕЗУЛЬТАТ РЕЛАКСАЦИИ ДАВЛЕНИЯ

В результате моделирования было обнаружено, что абляция золота при близких к пороговому зна-

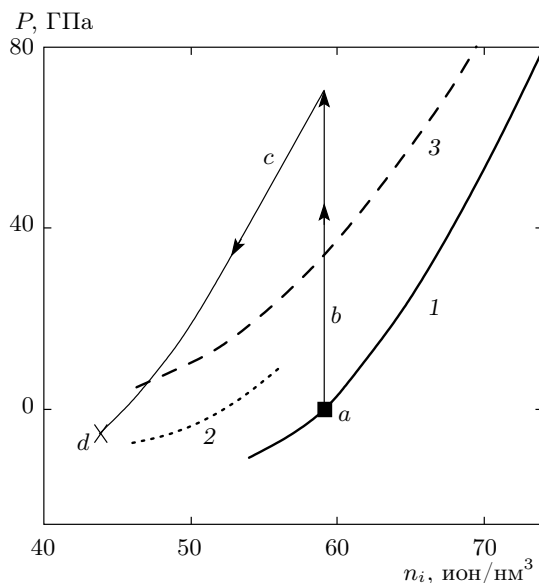


Рис. 6. Изотермы золота при различных T_i и T_e (полученные с использованием ETD-потенциала и без учета P_e^{deloc}): 1 — $T_i = T_e = 0.01$ эВ; 2 — $T_i = T_e = 0.2$ эВ (жидкость); 3 — $T_i = 0.01$ эВ, $T_e = 3$ эВ. Стрелками схематично показана эволюция состояния вблизи поверхности при короткой абляции в ходе расчета с $\tau = 0.1$ пс, $l = 6$ нм и $F_{abs} = 121$ мДж/см² (с учетом P_e^{deloc}): a — состояние, соответствующее нормальным условиям; b — быстрое нагревание электронной подсистемы лазерным импульсом; c — релаксация вследствие расширения системы и уменьшения T_e ; d — конечное состояние, соответствующее $P \approx -5.6$ ГПа, в котором происходит разрушение золота

чению энерговкладах связана с релаксацией электронного давления ($P_e^{loc} + P_e^{deloc}$). Такой процесс, назван «короткой» абляцией, в противоположность «длинной» абляции, которая обычно возникает при больших энерговкладах и связана с формированием ударной волны и волны разгрузки [9, 16]. Короткая абляция протекает быстрее и на меньших пространственных и временных масштабах, чем длинная абляция. Однако явно различить эти два механизма абляции удалось только в расчетах с $\tau = 0.1$ пс. Механизм абляции, связанный с процессом кипения, в данной работе не рассматривался (для золота пороговый энерговклад этого процесса больше, чем рассмотренные энерговклады).

Быстрое достижение области отрицательных давлений при короткой абляции происходит в первую очередь из-за первоначального быстрого темпа расширения металла вблизи поверхности.

Это вызвано тем, что в начальный момент времени в приповерхностном слое существует высокое давление, обусловленное высокой электронной температурой. Образование области с отрицательным давлением и вынос вещества происходят в результате суммарного действия двух процессов, снижающих давление. Первый из этих процессов — механическое расширение, происходящее с большой скоростью, когда электронное давление еще велико. Второй процесс, ответственный за образование отрицательного давления, — снижение T_e вследствие релаксационных процессов и соответствующее изменение межионного потенциала и исчезновение P_e^{deloc} . Схематично процесс изменения состояния вблизи поверхности при короткой абляции проиллюстрирован на рис. 6. Аналогичный механизм абляции для алюминия рассматривался в работе [12].

Процесс модификации поверхности золота при короткой абляции в целом похож на наноструктурирование металла при длинной абляции [36]. Основное различие заключается в том, что при короткой абляции средняя глубина кратера на поверхности меньше, чем при длинной абляции. На рис. 7 показаны фрагменты моделирования с расположением ионов золота в расчетной ячейке при различных параметрах лазерного импульса.

В расчетах с $\tau = 0.1$ пс, при достижении энерговклада 140 мДж/см^2 после механизма короткой абляции начинает реализовываться механизм длинной абляции. Таким образом, зависимость $d(F_{abs})$ (рис. 8) имеет особенность, которая выражается в наличии второго порога. Детально механизм длинной абляции рассмотрен в работах [9, 16]. Данный тип абляции происходит на более поздних временах и связан с формированием и распространением ударной волны в глубь вещества. На рис. 9 показаны профили давления (без учета P_e^{deloc}) вдоль x в разные моменты времени.

Нужно отметить, что полученные характеристики длинной абляции соответствуют работе [9]. С другой стороны, пороговое значение F_{abs} и глубина d кратера для золота, полученные экспериментально в работах [6, 7], ближе к характеристикам короткой абляции. Таким образом, наличие двух порогов абляции позволяет согласовать различные экспериментальные данные.

Для расчетов с длительностью лазерного импульса $\tau = 7$ пс выделить два отдельных механизма не представляется возможным. В данном случае отсутствует один из главных факторов короткой абляции — существенное различие во временах нагрева

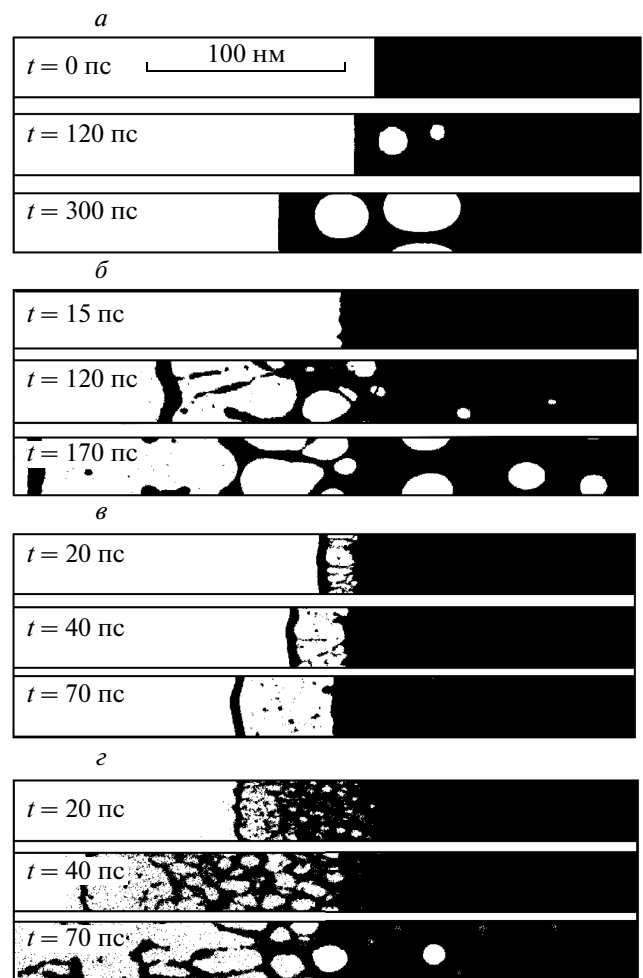


Рис. 7. Фрагменты моделирования с расположением атомов золота в различных расчетах: а и б — при $\tau = 7$ пс соответственно с $F_{abs} = 65 \text{ мДж/см}^2$ и $F_{abs} = 130 \text{ мДж/см}^2$; в и г — при $\tau = 0.1$ пс с $F_{abs} = 65 \text{ мДж/см}^2$ и $F_{abs} = 152 \text{ мДж/см}^2$. Показаны проекции атомов на плоскость xy в расчетной ячейке

и электрон-ионной релаксации золота. Процесс откола металла происходит в результате суммарного действия механизмов, задействованных и в короткой, и в длинной абляциях. Это приводит к плавному росту d при увеличении энерговклада (рис. 10).

Нужно отметить, что эффект наличия второго порога при субпикосекундных импульсах ранее был исследован экспериментально для меди [37]. В нашем исследовании это явление объясняется тем, что при использовании субпикосекундных импульсов можно выделить явно два режима лазерной абляции золота (короткой и длинной). Для пикосекундных импульсов такое разделение уже нельзя провести.

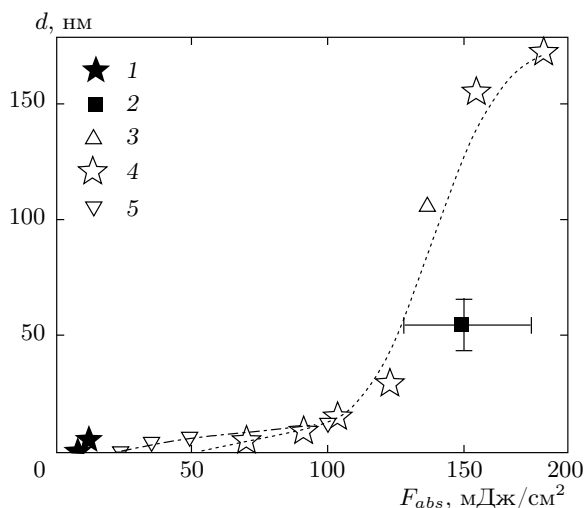


Рис. 8. Зависимость $d(F_{abs})$ при лазерной абляции золота для $\tau = 0.1$ пс: 1 и 2 — значения, полученные экспериментально с оптическими субпикосекундными импульсами [6, 9]; 3 — результат атомистического расчета без учета электронного давления [16]; 4 — результаты моделирования в данной работе с зависимостью $C_e(T_e)$ из работы [4]; 5 — то же, что и 4, но с зависимостью $C_e(T_e)$ из [24]

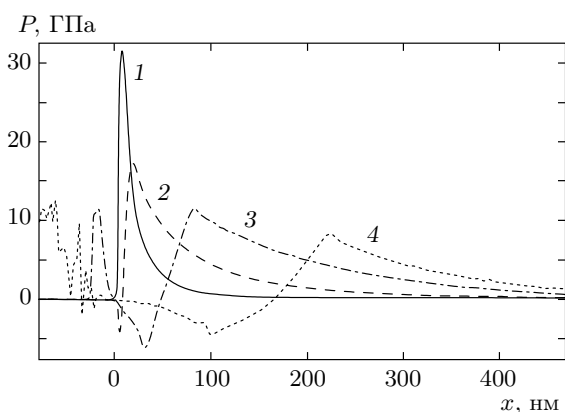


Рис. 9. Профили давления (без учета P_e^{deloc}) вдоль x в разные моменты времени в ходе расчета с $\tau = 0.1$ пс, $l = 6$ нм и $F_{abs} = 152$ мДж/см²: 1 — $t = 0.1$ пс; 2 — $t = 3.5$ пс; 3 — $t = 20$ пс (максимум давления при отрицательном значении x соответствует отколовшейся части металла); 4 — $t = 70$ пс

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен подход, позволяющий в рамках одного расчета исследовать различные механизмы лазерной абляции. Получены следующие результаты.

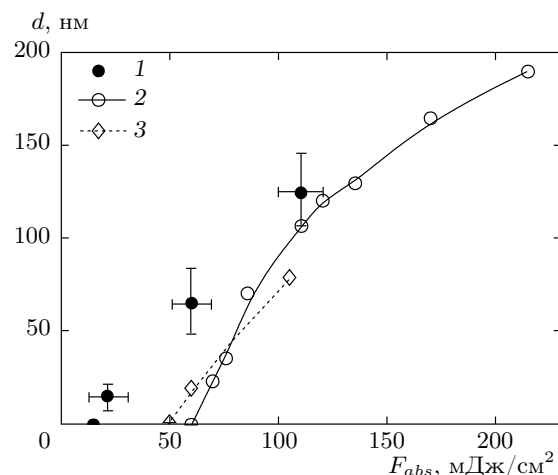


Рис. 10. Зависимость $d(F_{abs})$ при лазерной абляции золота для $\tau = 7$ пс: 1 — экспериментальные точки при использовании рентгеновских пикосекундных импульсов [8]; 2 — результаты моделирования в данной работе с зависимостью $C_e(T_e)$ из работы [4]; 3 — то же, что и 2, но с зависимостью $C_e(T_e)$ из [24]

1. Показано, что короткая абляция приводит к формированию кратеров на поверхности металла с глубиной порядка десяти нанометров и требует меньшего энерговклада, чем другие типы абляции. Данный механизм абляции связан с формированием области отрицательного давления вследствие суммарного действия двух релаксационных процессов: механического расширения и уменьшения T_e . Рассмотрение этого механизма позволяет согласовать экспериментальные результаты по абляции золота.

2. Для субпикосекундных лазерных импульсов короткая абляция проявляется явно. Данный тип абляции можно отделить от длинной абляции, возникающей при более высоких энерговкладах.

3. Для пикосекундных лазерных импульсов разделить эти механизмы абляции затруднительно, однако разрушение металла при низких энерговкладах также связано с релаксацией электронного давления в приповерхностном слое.

Подобное исследование стало возможным благодаря использованию ЕТD-потенциала, который учитывает изменение физических свойств ионной подсистемы при нагреве электронной. Нужно отметить, что для некоторых металлов использование подобного подхода для описания двухтемпературного состояния не обязательно. Например, для алюминия электронную подсистему (имеются в виду валентные электроны) можно рассматривать как идеальный газ свободных электронов, и для

описания двухтемпературного состояния достаточно использовать силу увлечения делокализованных электронов. С другой стороны, для ряда металлов (и в первую очередь для благородных металлов) при атомистическом моделировании двухтемпературного состояния необходимо явно вводить зависимость межионных сил от электронной температуры.

Авторы выражают благодарность А. Я. Фаенову за предоставленные экспериментальные данные по абляции золота, а также Н. А. Иногамову, И. Ю. Скобелеву и А. Ю. Куксину за полезные обсуждения. Расчеты проведены на кластерах МСЦ РАН, «Ломоносов» и МФТИ-60. Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований президиума РАН «Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества» (раздел 1), РФФИ (гранты №№ 10-08-00824, 09-08-01116), контракта с SNL по программе ASC (US DOE/NNSA) и грантов Президента РФ (МК-7192.2012.8, МК-6719.2010.8).

ЛИТЕРАТУРА

1. E. G. Gamaly, *Femtosecond Laser-Matter Interaction: Theory, Experiments, and Applications*, Pan Stanford Publ. Pte Ltd, Temasek (2011).
2. A. Faenov, Y. Kato, M. Tanaka et al., *Opt. Lett.* **34**, 941(2009).
3. Н. М. Булгакова, Р. Стоян, А. Розенфельд, КЭ **40**, 966 (2010).
4. Z. Lin, L. Zhigilei, and V. Celli, *Phys. Rev. B* **77**, 075133 (2008).
5. R. Ernstorfer, M. Hard, C. Hebeisen et al., *Science* **323**, 1033 (2009).
6. A. Vorobyev and C. Guo, *Phys. Rev. B* **72**, 195422 (2005).
7. J. Krzywinski, R. Sobierajski, M. Jurek et al., *J. Appl. Phys.* **101**, 043107 (2007).
8. С. В. Стариков, В. В. Стегайлов, Г. Е. Норман и др., *Письма в ЖЭТФ* **93**, 719 (2011).
9. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, С. И. Ашитков и др., *ЖЭТФ* **134**, 5 (2008).
10. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskii, S. I. Ashitkov et al., *Appl. Surf. Sci.* **255**, 9712 (2009).
11. J. P. Colombier, P. Combis, F. Bonneau et al., *Phys. Rev. B* **71**, 165406 (2005).
12. B. Chimier, V. Tikhonchuk, and L. Hallo, *Appl. Phys. A* **92**, 843 (2008).
13. M. Povarnitsyn, T. Itina, K. Khishchenko, and P. Levashov, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 195002 (2009).
14. C. Schafer and H. Urbassek, *Phys. Rev. B* **66**, 115404 (2002).
15. D. Ivanov and L. Zhigilei, *Phys. Rev. B* **68**, 064114 (2003).
16. B. Demaske, V. Zhakhovsky, N. Inogamov, and I. Oleynik, *Phys. Rev. B* **82**, 064113 (2010).
17. W. Hu, Y. C. Shin, and G. King, *Phys. Rev. B* **82**, 094111 (2010).
18. A. M. Rutherford and D. M. Duffy, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 496201 (2007).
19. V. Recoules, J. Clerouin, G. Zerah et al., *Phys. Rev. Lett.* **96**, 055503 (2006).
20. V. Stegailov, *Contrib. Plasma Phys.* **50**, 31 (2010).
21. F. Bottin and G. Zerah, *Phys. Rev. B* **74**, 174114 (2007).
22. S. Khakshouri, D. Alfe, and D. Duffy, *Phys. Rev. B* **78**, 224304 (2008).
23. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, and P. Echenique, *Phys. Rev. B* **69**, 245106 (2004).
24. J. Chen, D. Tzou, and J. Beraun, *Appl. Phys. Lett.* **46**, 307 (2006).
25. Y. Gan and J. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 201116 (2009).
26. R. Ernstorfer, M. Hard, C. Hebeisen et al., *Science* **323**, 1033 (2009).
27. M. Daw and M. Baskes, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1285 (1983).
28. M. Daw, S. Foiles, and M. Baskes, *Mater. Sci. Rep.* **9**, 251 (1993).
29. P. Brommer and F. Gahler, *Modelling Simulation Mater. Sci. Eng.* **15**, 295 (2007).
30. F. Ercolessi and J. Adams, *Europhys. Lett.* **26**, 583 (1994).
31. G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
32. A. B. Belonoshko, *Geoch. Cosmochim. Acta* **58**, 4039 (1994).
33. S. Starikov and V. Stegailov, *Phys. Rev. B* **106**, 955 (2009).
34. A. Lankin and G. Norman, *J. Phys. A* **42**, 214032 (2009).
35. S. Plimpton, *J. Comp. Phys.* **117**, 1 (1995), <http://lammps.sandia.gov/index.html>.
36. В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, *Письма в ЖЭТФ* **87**, 491 (2008).
37. S. Nolte, C. Momma, H. Jacobs et al., *J. Opt. Soc. Amer. B* **14**, 2716 (1997).