

СТРУЕОБРАЗОВАНИЕ ПРИ ОТРЫВЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ ОТ ПОДЛОЖКИ В РЕЗУЛЬТАТЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ФЕМТОСЕКУНДНОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА

Н. А. Иногамов^{a,*}, В. В. Жаховский^b, В. А. Хохлов^a

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

^bВсероссийский НИИ автоматики им. Н. Л. Духова, Росатом
127055, Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 августа 2014 г.

Хорошо известно, что при абляции ультракоротким лазерным импульсом основной вклад в унос вещества определяется не испарением, а термомеханическим отрывом вещества. При одинаковых металлах и параметрах импульса характер процесса отрыва зависит от толщины пленки d_f . Имеется важный масштаб, равный глубине прогрева металла d_T на двухтемпературной стадии, на которой температура электронов выше температуры ионной подсистемы. Мы сравниваем случаи $d_f < d_T$ (тонкая пленка) и $d_f \gg d_T$ (объемная мишень). Радиус R_L пятна нагрева оптическим лазером является вторым (после d_f) важным геометрическим параметром. Морфология вспучивания пленки в случае $d_f < d_T$ на подложке (блистеринг) меняется при изменении радиуса R_L в диапазоне от дифракционного предела $R_L \sim \lambda$ до больших значений $R_L \gg \lambda$, где $\lambda \sim 1$ мкм — длина волны оптического лазера. В условиях $d_f < d_T$, $R_L \sim \lambda$ и $F_{abs} > F_m$ на пленке золота, нанесенной на стеклянную подложку, появляется куполообразное вспучивание с миниатюрной замороженной наноструйкой, имеющей вид заострения, на округлой вершине купола (F_{abs} и F_m — поглощенная энергия и порог плавления пленки в расчете на единицу поверхности пленки). Предложен новый физический механизм, который приводит к образованию наноструйки.

DOI: 10.7868/S0044451015010034

1. ВВЕДЕНИЕ

Многие важные современные технологии основаны на применении ультракоротких лазерных импульсов (УКЛИ) длительностью $\tau_L \sim 0.01$ –1 пс. Сюда относятся формирование решеток из полых бугорков на поверхности пленки; структурирование пленок для биоприложений и микроэлектроники; усиление статического электрического поля на вершинах миниатюрных струй, которые венчают полые бугорки; перенос микроскопических кусочков пленки с подложки на ресивер (лазерное печатание) и др. Подробные перечни соответствующих ссылок приведены в недавних статьях [1, 2], посвященных изучению блистеринга и наноструй. Начиная с работ [3, 4], известно, что в случае УКЛИ важную роль играют механические эффекты и вызванные

ими гидродинамические движения. Для того чтобы термомеханические эффекты были существенны, должно выполняться условие сверхзвукового нагрева. При этом условии длительность τ_T создания нагретого слоя толщиной d_T короче звукового времени $t_s = d_T/c_s$, за которое гидродинамическое возмущение со скоростью звука c_s пробегает нагретый слой. Соответственно фазовая скорость d_T/τ_T формирования слоя нагрева больше скорости звука.

При воздействии оптического УКЛИ на толстую мишень из металла масштабы τ_T и d_T определяются двумя главными факторами. Это, во-первых, продолжительность по времени двухтемпературной (2Т) релаксации t_{eq} ($\tau_T = t_{eq}$), во время которой сравниваются температуры электронов T_e и ионов T_i . И, во-вторых, коэффициент электронной теплопроводности κ_{2T} в 2Т-состоянии (см., например, работу [5] и приведенные там ссылки); обычно $t_{eq} \approx 2$ –7 пс, $d_T \approx 50$ –140 нм, $t_s \approx 10$ –30 пс. Оценки, основанные на уравнениях теплового баланса для

*E-mail: nailinogamov@googlemail.com

электронов и ионов [6], $C_i \partial T_i / \partial t = \alpha (T_e - T_i)$, имеют вид

$$t_{eq} \approx \frac{C_i}{\alpha} \frac{(T_i)_{fin}}{(T_e)_{max}} \sim \frac{\sqrt{\gamma/2}}{\alpha} \frac{(E_i)_{max}}{\sqrt{(E_e)_{max}}}, \quad (1)$$

$$d_T \approx \sqrt{\chi_{2T} t_{eq}}, \quad \chi_{2T} = \frac{\kappa_{2T}}{C_e}, \quad (2)$$

где C_i и $C_e = \gamma T_e$ — ионная и электронная теплоемкости, E_i и E_e — внутренние энергии ионной и электронной подсистем, $\gamma \sim 100$ Дж·м⁻³·К⁻², $(T_i)_{fin}$ — температура ионов и электронов после завершения 2Т-стадии, $(T_e)_{max}$ — максимальная температура электронов на 2Т-стадии, $\alpha \sim 10^{17}$ Вт·К⁻¹·м⁻³ — коэффициент электрон-ионного обмена энергией в конденсированной среде [7–9]¹⁾. Максимум ионной энергии $(E_i)_{max}$ достигается в конце 2Т-стадии.

Если приближенно положить, что $(E_i)_{max} \sim (E_e)_{max}$, и подставить эту оценку в соотношения (1), (2), то получим

$$t_{eq} \sim \frac{(\gamma/2)^{2/5}}{\alpha^{4/5} \chi_{2T}^{1/5}} F_{abs}^{2/5} \sim 8 \text{ [пс]} \frac{\gamma_{100}^{2/5}}{\alpha_{17}^{4/5} \chi_{10}^{1/5}} F_{100}^{2/5},$$

$$d_T \sim 90 \text{ [нм]} \frac{\gamma_{100}^{1/5} \chi_{10}^{2/5}}{\alpha_{17}^{2/5}} F_{100}^{1/5},$$

где $\gamma_{100} = \gamma/100$ Дж·м⁻³·К⁻²; $\alpha_{17} = \alpha/10^{17}$ Вт·м⁻³·К⁻¹; $\chi_{10} = \chi_{2T}/10$ см²/с; $F_{100} = F_{abs}/100$ мДж/см². Принято, что $\chi_{2T} \sim 10$ см²/с, поскольку оценка из молекулярно-кинетической теории дает $\chi \sim (1/3)lv_F = 20$ см²/с при свободном пробеге электрона $l = 3$ нм и скорости Ферми $v_F = 2000$ км/с.

Значения теплопроводности κ_{2T} могут в десятки раз превышать значения κ_{1T} в однотемпературных (1Т) состояниях [7, 9, 11]. В силу этого обстоятельства и с учетом того, что $\tau_T = t_{eq} \gg \tau_L$, глубина d_T (2) существенно превышает толщину δ скин-слоя. Запишем закон сохранения энергии с учетом изменения толщины прогретого слоя за время 2Т-релаксации: $(E_i)_{max} d_T \approx (E_e)_{max} \delta \approx F_{abs}$. Подставляя эти уравнения в соотношения (1), (2) и принимая $\delta = 15$ нм, получим

$$t_{eq} \text{ [пс]} \approx 4 \frac{\gamma_{100}^{1/3}}{\alpha_{17}^{2/3} \chi_{10}^{1/3}} F_{100}^{1/3},$$

$$d_T \text{ [нм]} \approx 65 \frac{\gamma_{100}^{1/6} \chi_{10}^{1/3}}{\alpha_{17}^{1/3}} F_{100}^{1/6}.$$

¹⁾ В работе [10] вычислен коэффициент α для диэлектрика. В работах [7–9] подсчитываются значения α только для металлов.

Данные формулы дают представление, во-первых, о характерных масштабах горячего слоя и, во-вторых, о степени влияния неопределенности в коэффициентах γ , α и κ на темп электрон-ионной релаксации и на толщину слоя прогрева d_T . Полагая $d_{crat} \sim d_T$, можно получить оценку глубины кратера d_{crat} выше порога абляции.

Возможны ситуации с оптическим лазером и металлом, когда $t_{eq} < \tau_L < t_s$. Тогда 2Т-состояния не возникают, а время τ_T равно длительности импульса τ_L . При этом глубина прогрева $d_T \sim \sqrt{\chi_{1T} \tau_L}$ немного меньше, чем глубина (2); $\chi_{1T} \sim 1$ см²/с.

Чем замечателен случай сверхзвукового нагрева $d_T/\tau_T > c_s$? Почему при быстром нагреве гидродинамические явления особенно существенны? Дело в том, что при сверхзвуковом нагреве вещество не успевает расширяться в соответствии с растущей внутренней энергией, которая увеличивается за счет поглощения энергии внешнего источника. Это означает, что имеет место изохорический нагрев: $\rho = \rho^o$, где ρ^o — плотность вещества при нормальных условиях [4, 12–18]. В нагреваемом слое давление растет пропорционально поглощенной энергии. При фиксированной плотности $\rho = \rho^o$ давление будет порядка приращения внутренней энергии ΔE в расчете на единицу объема, поскольку параметр Грюнайзена — это число порядка единицы. Увеличение давления p (по сравнению с начальным значением $p = 0$) приводит вещество в движение на звуковом масштабе времени t_s . Скорости движения u порядка $p/z \sim \Delta E/z$, где $z = \rho c_s$ — акустический импеданс среды. Типичные для рассматриваемых условий приращения энергии порядка 1 эВ/атом, давления порядка 10 ГПа, а скорости $u \approx 0.4$ км/с. Наоборот, медленный нагрев ($\tau_T \gg t_s$) слабо повышает давление, поэтому в этом случае скорости движения малы, $u \ll \Delta E/z$.

Изохорический нагрев и термомеханические эффекты возникают не только в случае воздействия оптического УКЛИ на металлы. Для оптического фотона и металла, толщина скин-слоя $\delta \sim 10$ –30 нм является малой. Поэтому 2Т-теплопроводность κ_{2T} и коэффициент электрон-ионного теплообмена α [5, 7, 9], а не δ , определяют масштабы d_T и τ_T , см. (2). В слабопоглощающих средах (например, в полупроводниках с шириной запрещенной зоны больше энергии фотона или же в полимерах [19]) толщина d_T равна глубине поглощения излучения d_{att} . При d_{att} порядка нескольких микрон водораздел между сверхзвуковым и дозвуковым режимами нагрева проходит при длительностях импульса на-

грева τ_L порядка наносекунды²⁾. При этом эффекты теплопроводности обычно малосущественны на гидродинамической стадии. Одномерное приближение нельзя использовать, если радиус R_L лазерного пучка порядка или меньше глубины поглощения d_{att} ; см. пример с полимером [19]. При прочих равных условиях величина порога абляции по поглощенному флюенсу в Дж/см² возрастает примерно пропорционально глубине d_{att} , поскольку для преодоления прочности вещества нужно создать необходимую плотность энергии ΔE на единицу объема. При термофлуктуационном механизме нуклеации пороговое значение ΔE медленно (логарифмически) снижается с ростом глубины d_{att} из-за роста объема, в котором происходит нуклеация. Рост объема увеличивает предэкспоненциальный множитель в формуле для частоты нуклеации. Это замечание относится к вопросу о зависимости порогового флюенса от d_{att} . Темп деформации $\dot{V}/V \sim (u/c_s)/t_s = u/d_{att}$ также снижается с ростом величины d_{att} .

В случае лазеров, работающих в областях жесткого ультрафиолета или мягкого рентгена, частота излучения превышает плазменную частоту. Поэтому скин-слой отсутствует, отражение мало, поглощение фотонов происходит в основном при межзонных переходах. Важно, что по отношению к механизму поглощения для жестких фотонов пропадает резкое различие между металлами (нет щели в электронном энергетическом спектре в зоне проводимости) и полупроводниками и диэлектриками (щель имеется). В случае жестких фотонов оптический пробой отсутствует. Во время оптического пробоя длина d_{att} резко уменьшается по мере развития пробоя. При облучении жестким излучением глубина поглощения d_{att} может только возрастать при увеличении потока фотонов (для этого требуются экстремальные интенсивности [20, 21]). Этот рост вызван уменьшением числа электронов на определенной внутренней электронной оболочке из-за ионизации [20, 21] (полые ионы). На этой оболочке происходит преимущественное поглощение жестких фотонов заданной энергии.

Принципиальная разница между случаями металла и неметалла характерна для оптических фотонов (оптический пробой полупроводников и диэлектриков). В отличие от случая оптического лазера и металлов, когда глубина поглощения определяется скин-слоем, в случае жесткого излучения глуби-

на поглощения d_{att} (а значит и d_T) резко меняется от величин порядка 10 нм до величин порядка 1 мкм [22, 23] в зависимости от частоты жесткого фотона относительно краев зон внутренних электронных оболочек (см. примеры в работах [24, 25], связанные с металлами и кремнием). Соответственно вместе с глубиной прогрева сильно меняются пороги и структура остаточных повреждений облученного пятна [24, 25]. Другие примеры изохорического нагрева и термомеханических эффектов относятся к облучению пучками электронов [26] или ионов [27]. При этом значения d_{att} намного превышают глубины прогрева d_T (50–140 нм) оптическим УКЛИ из-за больших длин пробега частиц высоких энергий. В указанных случаях сверхзвуковым является нагрев при длительности импульса, ограниченной значением порядка наносекунд (если d_{att} порядка микрона) и микросекунд при d_{att} порядка миллиметра.

Выше обсуждалась физика лазерного воздействия на однородные мишени с акцентом на термомеханическую абляцию. Обсуждение посвящено выделению условий осуществления термомеханического режима в максимально широком классе случаев, включающих, во-первых, воздействие коротких и длинных импульсов, во-вторых, лазеры с мягкими и жесткими фотонами, и, в-третьих, металлы, полупроводники и диэлектрики. Рассмотрены также случаи, когда абляция является одномерной и когда одномерным приближением пользоваться нельзя.

В анализируемом в данной работе случае тонких пленок ситуация изменяется по сравнению с однородными мишенями. В данной работе тонкими будем считать пленки, толщина d_f которых меньше толщины d_T прогретого слоя на облученной поверхности однородной мишени. Для объяснения экспериментов [28–33] рассмотрим термомеханическую абляцию тонких пленок, напыленных на диэлектрическую подложку, в случае оптических лазеров. Имеются две особенности, связанные с тонкими пленками. Во-первых, — это резкая неоднородность прогрева в системе пленка–подложка из-за малой теплопроводности подложки по сравнению с теплопроводностью металла. Таким образом, практически все тепло, поступившее в металл, остается в нем на временах порядка сотен пикосекунд и более (эти времена намного превышают звуковой масштаб $t_s \sim 10$ пс для пленок толщиной $d_f \sim 10$ –100 нм). Во-вторых, — неоднородность прочности мишени на растяжение в системе пленка–подложка, когда из-за ограниченной адгезии слабым местом является контакт пленка–подложка.

В однородной металлической мишени порог тер-

²⁾ Здесь речь идет об интенсивностях ниже порога оптического пробоя. При пробое концентрация свободных электронов резко меняется. Соответственно сильно уменьшается глубина поглощения d_{att} .

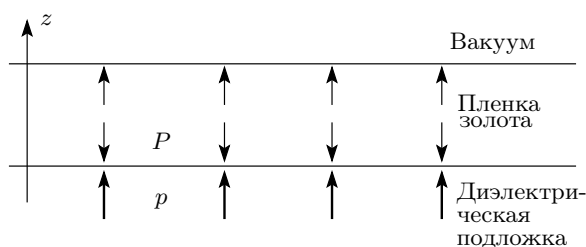


Рис. 1. Отталкивание пленки от подложки после изохорического нагрева пленки УКЛИ. Изохорический нагрев поднимает давление P в пленке золота. Изохорический означает, что подъем давления происходит быстро по сравнению с гидродинамическим временем d_f/c_s . Противодействие p подложки сообщает импульс пленке в направлении оси z через динамический контакт пленка–подложка. Если сила адгезии недостаточна, чтобы погасить набранный пленкой импульс, то пленка отрывается от подложки

момеханической абляции F_a оптическим УКЛИ в 2–3 раза выше порога плавления F_m [5, 34]. На пороге F_a и выше образуется поверхностный слой расплава толщиной d_m порядка теплового масштаба d_T . При $F > F_a$ разрыв металла происходит внутри слоя расплава. В случае пленки ситуация меняется. Пленка держится на стекле за счет адгезии. Имеется предельное адгезионное напряжение, при превышении которого происходит откол пленки от стекла. Как правило, максимальное адгезионное напряжение существенно меньше предела прочности в объеме металла. Тогда порог откола пленки от стекла находится ниже порога плавления пленки, т. е. даже нерасплавленная пленка отрывается от стекла при воздействии УКЛИ, если напряжения превышают предел адгезии. Причем откол происходит не в объеме пленки, а по контакту с подложкой (рис. 1).

Наша работа нацелена на объяснение явлений, наблюдаемых в опытах [1, 28–33]. В этих опытах использовались УКЛИ, освещающие пленки золота толщиной $d_f \sim 20\text{--}70$ нм, напыленные на диэлектрические подложки. Как видно из фотографий, приведенных в работах [1, 28–33], наблюдаемые явления происходят от сочетания эффектов гидродинамики и поверхностного натяжения. Предлагаемое ниже решение проблемы опирается на разбиение задачи на две стадии: начальную и капиллярную. На начальной стадии происходит ускорение пленки по нормали к плоскости подложки. Разгон пленки вызван противодействием подложки (см. рис. 1). Противодействие возникает как реакция подложки на

давление пленки на подложку. Длительность стадии ускорения определяется гидродинамическим временем $d_f/c_s \sim 10$ пс динамического контакта пленки с подложкой во время и после воздействия УКЛИ. Начальная стадия заканчивается, когда пленка отрывается от подложки.

Чтобы описать опыты [28–33], необходимо учесть влияние поверхностного натяжения. Капиллярная стадия имеет место, если пленка расплавлена и ее скорость, после отделения от подложки, не слишком велика. Масштаб капиллярных скоростей следует из сравнения поверхностной и кинетической энергий:

$$\pi R_L^2 \sigma \sim \pi R_L^2 \rho^o d_f v_\sigma^2 / 2,$$

где R_L — радиус пучка УКЛИ, σ — коэффициент поверхностного натяжения жидкого металла, $\rho^o = 19.3$ г/см³ — начальная плотность золотой пленки, d_f — начальная толщина пленки. Для типичных значений параметров $R_L \sim 1$ мкм, $\sigma \sim 10^3$ эрг/см², $d_f \sim 50$ нм имеем $v_\sigma \sim 50$ м/с. Пятно нагрева на поверхности пленки имеет максимум температуры в центре, поскольку мы рассматриваем УКЛИ с максимумом интенсивности на оси пучка. Тогда распределение скорости по пятну нагрева имеет наибольшее значение в центре. В таком случае оторвавшаяся пленка принимает форму купола, оболочка которого сформирована из вещества оторвавшейся пленки (рис. 2). Оценка продолжительности капиллярной стадии дает $t_\sigma \sim R_L/v_\sigma \sim 10$ нс. Как видим, продолжительности начальной и капиллярной стадий различаются на три порядка.

Кратковременность взаимодействия пленки и подложки (около 10 пс) по сравнению с капиллярным временем (около 10 нс) позволяет сильно упростить трудную трехмерную задачу, включающую гидродинамику движений подложки и пленки. При упрощенном подходе задача разбивается на два этапа. На первом этапе анализируется гидродинамика пленки совместно с подложкой. Рассматриваются поглощение УКЛИ, нагрев и релаксация электронной подсистемы, тепловое расширение пленки, генерация ударной волны (УВ) в подложке и откол пленки от подложки. Задача на этом этапе решается в одномерном (1D) приближении, поскольку диаметр пучка УКЛИ не менее чем на порядок превышает толщину пленки: $d_f \sim 10\text{--}100$ нм, $R_L \sim 1$ мкм и более. В разд. 2 вычисляются начальные скорости локального центра массы пленки и локальная температура в зависимости от локального значения поглощенной лазерной энергии $F_{abs}(x, y)$ [Дж/см²], где x, y — координаты в плоскости поверхности подложки (см. рис. 1 и 2). Второй этап начинается после отры-

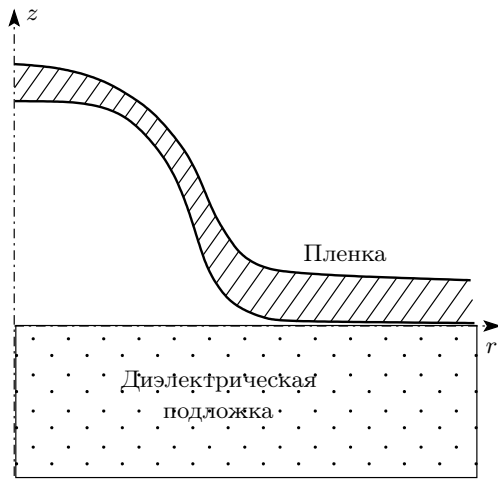


Рис. 2. Отслаивание и вспучивание пленки (блистеринг) после воздействия УКЛИ. В случае УКЛИ с максимумом интенсивности на оси пучка (например, распределение интенсивности по Гауссу) оторвавшаяся пленка принимает форму купола. При малой энергии, вложенной в пятно нагрева, поверхностное натяжение останавливает движение купола вверх по оси z и поворачивает пленку назад к подложке. При повышенных энергиях купол отрывается и улетает вверх, а в пленке на подложке остается дырка (кратер). На рисунке показана симметричная половина картины. Осью симметрии является ось z

ва пленки от подложки. На поверхности подложки область отрыва имеет форму пятна, ограниченного контуром. В разд. 3 описывается динамика пленки, закрепленной на контуре, под действием поверхностного натяжения.

Опыты [1, 28–33] имеют прямое отношение к технологиям будущего. В них наблюдается формирование нанокуполов и наноструек, которые найдут широкое применение в микроэлектронике, медицине и наноплазмонике [1, 2]. На сегодняшний день предложены три модели для объяснения этого важного явления. В первой из них методами молекулярной динамики (МД) рассматривается отскок пленки от абсолютно жесткой подложки [1]. Хотя такое допущение (недеформируемость подложки) сильно упрощает задачу³⁾, оно не может быть принято. Как будет видно ниже (разд. 2), наличие деформируемой подложки в 5–7 раз снижает скорость v_z отскока пленки. Небольшие скорости $v_z \sim v_\sigma$ необходимы, чтобы капиллярные явления (разд. 3) могли проявить себя (без них нет наноструй). В постановке с жесткой под-

³⁾ Поскольку исключает гидродинамику подложки.

ложкой снижать скорость v_z можно только за счет уменьшения поглощенной энергии F_{abs} . Но тогда мы опускаемся ниже порога плавления, и капиллярные эффекты пропадают. Необходимо соблюдать тонкий баланс между скоростями $v_z \sim v_\sigma$ и плавлением. Требуются небольшие скорости при достаточно высокой температуре. Как показано в данной работе, этого можно достичь, если на начальном этапе пленка расширяется в «мягкую» подложку⁴⁾.

Вторая модель [2] ограничена анализом динамики пленки до ее плавления. В такой постановке не удастся понять, каким образом формируются мощные потоки вещества, идущие в приосевую зону (ось z на рис. 2). Между тем именно эти потоки ответственны за образование струи на вершине нанокупола (разд. 3).

В третьей модели [33] анализ приповерхностной динамики отскока пленки и ее дальнейшего полета заменяется исследованием феноменологического уравнения Курамото–Сивашинского (КС). Это уравнение некоторые авторы применяли ранее для описания появления хаотических структур при лазерном воздействии. Образование струи связывают с особенностью уравнения КС [33]. При подходе с использованием уравнения КС вся динамика пленки «сидит» на подложке — нет отрыва пленки, нет пустого расширяющегося купола. В нашей работе сочетаются расчет отрыва пленки (разд. 2) и капиллярная теория (разд. 3). Это позволяет описать даже такой особый эффект, как образование контрструи (см. ниже рис. 22). Данный эффект обнаружен недавно (см. рис. 7 в работе [28]).

2. ЛАЗЕРНЫЙ УДАР ПО ПЛЕНКЕ НА ПОДЛОЖКЕ

Поглощение лазерной энергии в интересующем нас диапазоне флюенсов $F_{abs} \sim 10\text{--}100$ мДж/см² и при изохорическом нагреве создает внутри пленки давления $\sim F_{abs}/d_f = 10F_{10}/d_{10}P$ [ГПа], где $F_{10} = F_{abs}/10$ [мДж/см²], $d_{10} = d_f/10$ [нм]. Давления таких амплитуд возникают за фронтом детонации химических взрывчатых веществ. Можно сказать, что лазер превращает металл пленки во взрывчатку с давлениями порядка десятков гигапаскалей и температурами T в тысячи кельвинов: T [К] $\sim 4000F_{10}/d_{10}$. Рассмотрим расширение такой «взрывчатки» на поверхности подложки (удар

⁴⁾ Мягкая означает, что акустический импеданс подложки мал по сравнению с импедансом пленки. В случае с жесткой подложкой положение обратное.

по подложке и отскок от нее). Распределение плотности поглощенной энергии F_{abs} однородно по поверхности пленки, см. рис. 1 (1D-постановка задачи). Требуется найти скорость центра масс пленки $v_z(F_{abs})$ после отскока от диэлектрика. В качестве диэлектрической подложки обычно используется стекло⁵⁾.

В разд. 2.1 представим используемую термодинамическую 2Т-модель и гидродинамические уравнения. В разд. 2.2 обсудим, каким образом протекают тепловые процессы, поскольку именно повышение внутренней энергии приводит вещество в движение. Будут изучены поглощение лазерной энергии, нагрев электронов, распространение тепла по электронной подсистеме и электрон-ионная релаксация, благодаря которой повышается температура решетки и происходит плавление. В разд. 2.3 представим описание процесса отрыва пленки при однородном вдоль поверхности пленки облучении (одномерная задача). В разд. 3 рассмотрен трехмерный отрыв пленки при неоднородном облучении.

2.1. Гидродинамические уравнения и термодинамическая модель

Одномерное движение пленки описывается следующими двухтемпературными (2Т) гидродинамическими уравнениями:

$$\rho(z^o, t) \frac{\partial z(z^o, t)}{\partial z^o} = \rho^o, \quad \frac{\partial z(z^o, t)}{\partial t} = u(z^o, t), \quad (3)$$

$$\rho^o \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial P(z^o, t)}{\partial z^o}, \quad P = P_i + P_e, \quad (4)$$

$$\rho^o \left(\frac{E_e}{\rho} \right)_t = -q' - \frac{\rho^o}{\rho} \alpha (T_e - T_i) + \frac{\rho^o}{\rho} Q - P_e \frac{\partial u}{\partial z^o}, \quad (5)$$

$$\rho^o \frac{\partial (E_i/\rho)}{\partial t} = \frac{\rho^o}{\rho} \alpha (T_e - T_i) - P_i \frac{\partial u}{\partial z^o}, \quad (6)$$

где

$$Q = \frac{F_{abs}}{\sqrt{\pi} \tau_L \delta} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau_L^2}\right) \exp\left(-\frac{|z - z_g|}{\delta}\right),$$

$$(\dots)_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}, \quad q' \equiv \frac{\partial q}{\partial z^o}, \quad q = -\frac{\rho \kappa}{\rho^o} \frac{\partial T_e}{\partial z^o}.$$

Ось z перпендикулярна плоскости пленки и подложки (см. рис. 1). Использована лагранжева координата z^o . До начала действия УКЛИ лагранжева координата z^o совпадает с эйлеровой координатой z :

⁵⁾ В работе [33] используется подложка из CaF_2 .

$z^o \equiv z(z^o, t = -\infty)$. Функция $z(z^o, t)$ задает траекторию фиксированной материальной (лагранжевой) частицы. В одномерной постановке это плоскость, движущаяся вдоль оси z со скоростью u . В одномерной постановке перпендикулярные оси z скорости равны нулю. Уравнения (3) относятся к сохранению массы и кинематике движения. Масса на единицу площади, $d\sigma_S = \rho^o dz^o$, зажатая между плоскостями $z^o + dz^o$ и z^o , постоянна. Силовое уравнение имеет вид (4) — разница сил между плоскостями $z^o + dz^o$ и z^o определяет ускорение массы $d\sigma_S$.

Энергетические уравнения записаны отдельно для электронной подсистемы (5) и для ионной подсистемы (6) [6]. Теплопроводностью стекла на рассматриваемом масштабе времени пренебрегаем. В уравнениях (5), (6) дополнительно к тепловым членам учтены гидродинамические члены, связанные с работой $P dV$ в каждой из подсистем. Эти дополнения плюс гидродинамические члены отличают гидродинамическую 2Т-систему (3)–(6) от 2Т-уравнений энергии в пионерской работе [6].

Как видим, время отсчитывается от максимума интенсивности УКЛИ (формула для источника Q). Пространственно-временное распределение поглощенной энергии определяется функцией Q , длительность УКЛИ есть τ_L , а глубина поглощения равна толщине δ скин-слоя. Диссипация энергии электромагнитной волны происходит внутри металла вблизи границы пленки. В случае LIFT (laser induced forward transfer) [1] за z_g в формуле для Q принимаем границу стекло–золото, поскольку лазерный пучок идет через подложку. В случае LIBT (laser induced backward transfer) за z_g принимаем границу золотой пленки с вакуумом, поскольку лазерный пучок идет через вакуумный промежуток (см. рис. 1).

Уравнения 2Т-гидродинамики (3)–(6) дополняются термодинамической моделью 2Т-состояний конденсированной среды и моделью, которая описывает важнейшие кинетические коэффициенты — это коэффициенты теплопроводности κ и электрон-ионного теплообмена α . В данной работе при решении системы (3)–(6) 2Т-уравнение термодинамического состояния (2Т-УРС) берется таким, как в работе [35], а именно, 2Т-УРС представлено как сумма ионного и электронного вкладов, соответственно свободная энергия равна

$$F(\rho, T_i, T_e) = F_i(\rho, T_i, T_e) + F_e(\rho, T_i, T_e). \quad (7)$$

Имеется ряд подходов к вычислению электронного вклада, начиная от моделей Ферми и Томаса–Ферми и до квантовых вычислений методом

функционала плотности (density functional theory, DFT) [8, 9, 36–51]. Более пятидесяти лет учитывается электронная добавка F_e в однотемпературное (1Т, $T_e = T_i$) УРС. Эта добавка становится существенной при высоких температурах [52] (см. также [36, 37]). Ранее добавка F_e подсчитывалась в приближении Ферми. Подход, при котором электроны описываются в виде идеального газа (в этом заключается приближение Ферми), был распространен и на 2Т-ситуацию [40, 41]. Современные работы отталкиваются от DFT-моделирования [8, 9, 35, 39, 42, 43, 45, 46, 48–51].

В настоящей работе используется комбинация широкодиапазонного УРС [36, 37, 53, 54] и DFT-расчетов [35]. Наши DFT-вычисления хорошо согласуются с широкодиапазонным УРС по «холодным» кривым металлов [5, 35, 55, 56]. В связи с опытами [1, 28–33] на пленках золота нас интересует область состояний с плотностями от газовой до твердотельной и с температурами ионов T_i до нескольких килокельвинов и электронов T_e до нескольких электронвольт. В этой области состояний и при фиксированной плотности ρ будем пренебрегать влиянием, 1) ионной температуры T_i на электронный спектр и 2) электронной температуры T_e на упругие постоянные (электроны обладают фермиевскими энергиями, и добавление к ним нескольких электронвольт мало что меняет [38])⁶. При этих двух предположениях в выбранной области состояний вместо выражения (7) можно приближенно записать

$$F(\rho, T_i, T_e) = F_i(\rho, T_i, T_e) + F_e(\rho, T_e). \quad (8)$$

Здесь зависимость функции F_e от аргумента T_i опущена согласно первому предположению. Функция $F_i(\rho, T_i, T_e)$ слабо зависит от электронной температуры (второе предположение). Поэтому в (8) в функции $F_i(\rho, T_i, T_e)$ положено $T_e = T_i = T$. Сумма

$$F(\rho, T, T) = F_i(\rho, T, T) + \tilde{F}_e(\rho, T)$$

используется при расчете широкодиапазонного 1Т-УРС [36, 37, 53, 54]⁷. При этом электронный вклад $\tilde{F}_e(\rho, T)$ вычисляется в приближении, близком к приближению идеального газа. Чтобы учесть уточненный нами электронный вклад, вычитаем функцию $\tilde{F}_e(\rho, T)$. Следовательно,

⁶ Второе предположение неприменимо для полупроводников и диэлектриков, поскольку оно исключает нетепловое плавление [57]. Кроме того, известно, что имеется заметное упрочнение золота при значительном повышении T_e [39, 46]. В нашем приближении этим эффектом приходится пренебречь.

⁷ В работах [36, 37, 53, 54] вместо $F(\rho, T, T)$ используется обозначение $F(\rho, T)$.

$$F_i(\rho, T_i, T_i) = F(\rho, T_i, T_i) - \tilde{F}_e(\rho, T_i).$$

Таким образом, в (8) обозначение $F_i(\rho, T_i, T_i)$ означает 1Т-УРС с вычтенным электронным вкладом. Отметим, что при температурах T_i до нескольких килокельвинов электронный вклад $F_e(\rho, T_i)$ мал в сравнении с ионным вкладом $F_i(\rho, T_i, T_i)$.

В принятом приближении (8) электронный вклад F_e не зависит от температуры ионов T_i ($T_i \approx 2\text{--}5$ кК). Поэтому этот вклад допустимо вычислять при нулевой температуре ионов $T_i = 0$ (холодная решетка). В соответствии с этим для холодной решетки с помощью DFT-подхода был вычислен электронный одночастичный спектр золота при $T_e = 0$. По этому спектру, аналогично тому, как это было сделано в работе [8], была найдена электронная энергия E_e . Принятая в настоящей работе аппроксимация электронной энергии имеет вид

$$E_e = 17.513 \cdot 10^{-10} \left(\frac{1 - \text{tn}}{2} + 1.4 \frac{1 + \text{tn}}{2} \right) T_e^2, \quad (9)$$

$$\text{tn} = \frac{2}{\pi} \arctg \frac{T_e - 3500}{700},$$

где E_e приведено в кДж/г, T_e — в К. Аппроксимация (9) воспроизводит рост электронной теплоемкости при увеличении температуры T_e из-за возбуждения d -электронов. Давление электронов вычислялось по формуле $P_e = (2/3)E_e\rho$. В приведенных выше приближениях добавка F_e имеет смысл электронного теплового вклада в уравнение Ми–Грюнайзена.

Для решения системы (3)–(6) требуются коэффициенты электрон-ионного теплообмена α и теплопроводности κ . Первый из них брался из работ [7–9]. Теплопроводность золота в 2Т-условиях подсчитывалась по формуле

$$\kappa = \frac{1}{3} \frac{C_e v^2}{\nu},$$

где $C_e = \rho dE_e/dT_e$ — теплоемкость на единицу объема, величина E_e дается формулой (9), $v^2 = v_F^2 + 3k_B T_e/m_e$, $m_e v_F^2/2 = 5.5$ эВ — энергия Ферми E_F ; $E_F/k_B = 64$ кК, $E_F/\hbar = 8.4$ фс⁻¹. Частота ν равна сумме частот $\nu_{ei} + \nu_{ee}$ электрон-ионных и электрон-электронных столкновений. Принималось, что $\nu_{ee} = (E_F/\hbar)(k_B T_e/E_F)^2$ [58]. Частота ν_{ei} находилась по удельному электрическому сопротивлению по справочным данным [59]. Она равна $\nu_{ei} [\text{с}^{-1}] = 1.2 \cdot 10^{11} T_i (\rho^o/\rho)^{1.3}$ в твердой фазе и $\nu_{ei} [\text{с}^{-1}] = (0.34 + 2.7 \cdot 10^{-4} T_i) (\rho^o/\rho)^{1.3} \cdot 10^{15}$ в жидкой фазе; здесь ионная температура T_i берется в кельвинах,

$\rho^o = 19.3 \text{ г/см}^3$ — плотность золота при нормальных условиях. Множитель $(\rho^o/\rho)^{1.3}$ приближенно аппроксимирует начальный участок падения проводимости с уменьшением плотности [60]. Поскольку наш гидродинамический код использует широкодиапазонное многофазное УРС, нам известен мгновенный фазовый состав в каждой лагранжевой частице. В слое плавления частота ν_{ei} подсчитывалась по приведенным формулам для твердой и жидкой фаз с учетом объемной доли фаз в двухфазной смеси.

2.2. Тепловые процессы

Тепловых процессов три: поглощение лазерной энергии в скин-слое золота толщиной примерно 15 нм для используемых оптических лазерных систем с энергией фотона 1–1.5 эВ; передача поглощенной энергии в толщу пленки потоком q в уравнении (5) за счет электронной теплопроводности; сближающая температуры электрон-ионная температурная релаксация, за которую отвечает слагаемое $\alpha(T_e - T_i)$. Теплопроводностью диэлектрической подложки будем пренебрегать на рассматриваемых масштабах времени. Поэтому тепловые явления сосредоточены в пленке золота. В 2Т-условиях теплопроводность велика, пленки [1, 28–33] тонкие, и прогрев пленки происходит чрезвычайно быстро. Соответственно для интерпретации опытов [1, 28–33] детальные знания о коэффициенте теплопроводности не очень существенны⁸⁾. Более важными оказываются значения коэффициента электрон-ионного теплообмена α и давления электронов P_e , поскольку релаксация продолжается заметный отрезок времени.

На рис. 3 показан типичный пример из многочисленных расчетов разных вариантов. Численно решается система уравнений (3)–(6) 2Т-термогидродинамики. Известно [5], что на 2Т-стадии в однородных объемных мишенях электронная тепловая волна распространяется со сверхзвуковой скоростью — происходит «квазигомогенный» нагрев слоя толщиной d_T . В случае тонких пленок ($d_f < d_T$) это явление приводит к быстрому выравниванию электронной температуры по пространству (см. рис. 3). Уже к первой пикосекунде разность температур

$$\Delta T_e(t) = T_e(z^o = 60 \text{ нм}, t) - T_e(z^o = 0, t)$$

на сторонах пленки снижается до 7% от средней по границам температуры

⁸⁾ Коэффициент теплопроводности важен при определении глубины прогрева d_T и порога термомеханической абляции на объемных мишенях.

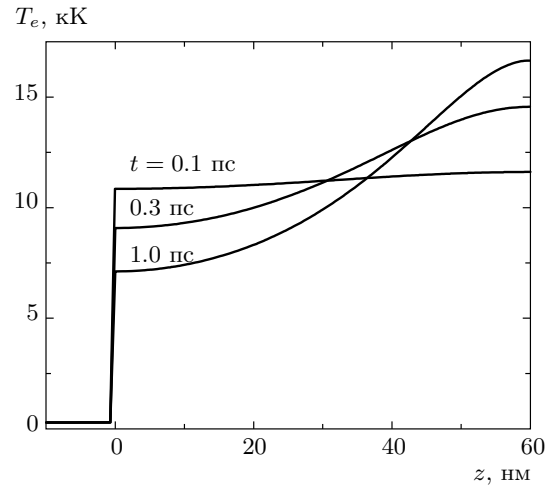


Рис. 3. Распространение тепловой волны и быстрое выравнивание электронной температуры T_e по пространству пленки толщиной $d_f = 60$ нм. Поглощенная энергия $F_{abs} = 40$ мДж/см². Точка $z = 0$ соответствует положению контакта стекло–золото до прихода УКЛИ на контакт. Стекло находится слева, золото — справа. УКЛИ освещает пленку справа, со стороны вакуума. Время t отсчитывается от максимума УКЛИ. Длительность УКЛИ $\tau_L = 100$ фс, толщина скина $\delta = 15$ нм

$$\bar{T}_e(t) = \frac{1}{2}[T_e(z^o = 60 \text{ нм}, t) + T_e(z^o = 0, t)],$$

$\Delta T_e(t = 3 \text{ пс})/\bar{T}_e(t = 3 \text{ пс}) < 10^{-3}$. Узкие пики на рис. 4, 5 обусловлены быстрым распространением тепла из скин-слоя $\delta = 15$ нм в пленку толщиной $d_f = 60$ нм.

Процесс выравнивания электронной T_e и ионной T_i температур проиллюстрирован на рис. 4. Он связан с коэффициентом α в энергетических уравнениях (5), (6). На тонких пленках золота процесс выравнивания температуры $T_e(z, t)$ намного опережает ход электрон-ионной температурной релаксации (рис. 3, 4). Как видно из рис. 4, температурная релаксация продолжается десятки пикосекунд и не заканчивается даже к моменту $t_{spall} = 35.3$ пс отрыва (spall) пленки от стекла (динамическим явлениям и отрыву пленки посвящен следующий подраздел). Реальная релаксация идет быстрее (рис. 5). Реальная релаксация связана с передачей поглощенной энергии F_{abs} , запасенной в электронной подсистеме, из электронов в ионы. Уже в момент $t = 5.4$ пс эти энергии сравниваются, хотя электроны в 8 раз горячее (ср. рис. 4 и 5). Разумеется, это связано с малостью электронной теплоемкости по сравнению со значением $3k_B$ при температурах T_e в несколько килокальвинов.

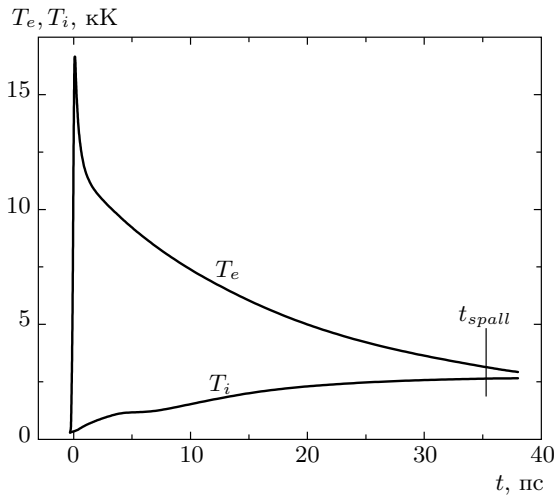


Рис. 4. Выравнивание электронной $T_e(z^o = 60 \text{ нм}, t)$ и ионной $T_i(z^o = 60 \text{ нм}, t)$ температур вследствие электрон-ионной релаксации; $\tau_L = 100 \text{ фс}$, $\delta = 15 \text{ нм}$. Приведены графики температур на границе между золотом и вакуумом. Энергия УКЛИ поглощается в скин-слое на этой границе. Максимум $T_e = 16.7 \text{ кК}$ достигается в момент $t = 0.11 \text{ пс}$. Начальные температуры золота и стекла равны 300 К . Как сказано, при $t > 1 \text{ пс}$ мала вариация T_e по нормали к пленке. Это означает, что пространственный профиль $T_i(z, t)$ примерно однороден по нормали к пленке. В момент t_{spall} пленка отрывается от подложки

Как протекает нагрев ионной подсистемы показано на рис. 6. Объемным источником нагрева является слагаемое $\alpha(T_e - T_i)$ в уравнении (6). После быстрого выравнивания температуры T_e (см. рис. 3) мощность источника нагрева примерно однородна по координате z . На профиль температуры $T_i(z, t)$ влияет также член $P_i \text{ div } u$, связанный с работой $P dV$ и гидродинамическим движением.

В принятом выше приближении (8) пренебрегается влиянием возбуждения электронов на упругие постоянные. Это означает, что кривая плавления $T_m(P)$ слабо зависит от электронной температуры T_e . Кроме того, в наших гидродинамических расчетах используется термодинамическое УРС. Следовательно, наши расчеты не описывают кинетику плавления. Это заметный недостаток, если речь идет об окрестности порога плавления. Спинодаль перегретого кристалла $T_s(P)$ располагается на 25–40% [61] выше кривой плавления: $T_s(P) \approx (1.25 - 1.4)T_m(P)$. В случае $F_{abs} = 40 \text{ мДж/см}^2$ (см. рис. 3–6) ионная температура поднимается до значений примерно 2 кК (см. рис. 6). Температуры около 2 кК соот-

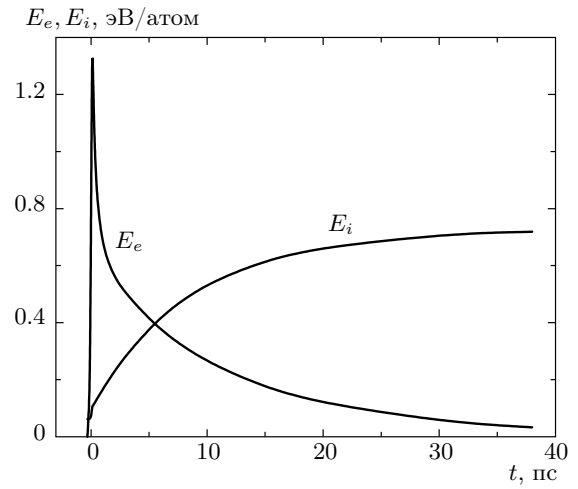


Рис. 5. Перекачка энергии электронов в ионы при $T_e > T_i$. Видим, что в электронах остается менее 22% от суммарной энергии $E_e + E_i$ при $t > 15 \text{ пс}$. Представлены зависимости от времени энергий в лагранжевой частице на границе золото–вакуум, $z^o = 60 \text{ нм}$. Расчет с параметрами, приведенными в подписях к рис. 3 и 4

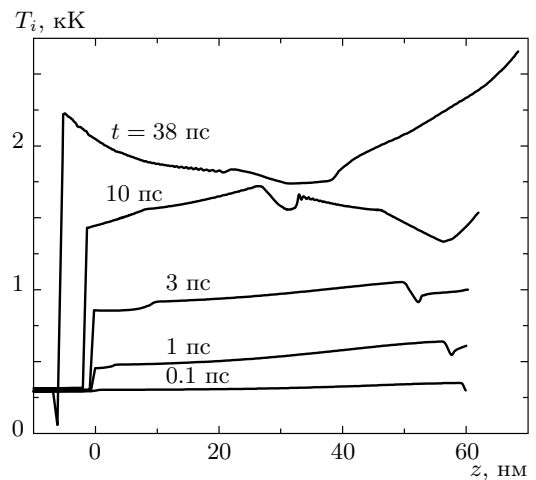


Рис. 6. Нагрев ионов объемным источником — горячими электронами — за счет члена $T_e - T_i$ в уравнениях (5), (6). Параметры те же, что и в случае рис. 3–5

ветствуют окрестности спинодали $T_s(P)$. При таких амплитудах перегрева кинетические эффекты не существенны.

При высоких скоростях распространения слоя плавления по веществу пленки возникает двухфазная пространственная область со смесью твердой и жидкой фаз. Локальное объемное содержание фаз в

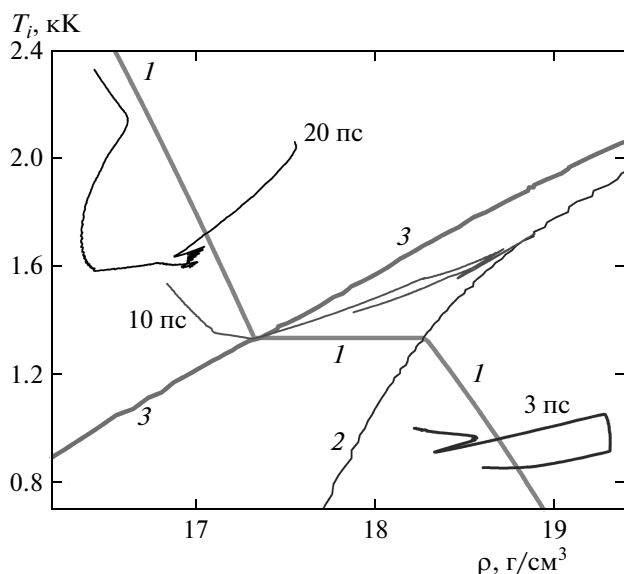


Рис. 7. Эволюция мгновенного пространственного профиля $T_i[\rho(x, t), t]$ ионной температуры под действием объемного нагрева ионной подсистемы: 1 — бинадаль; 2 — солидус; 3 — ликвидус. Эволюция идет в направлении от твердого тела к расплаву. Показаны профили на моменты времени $t = 3, 10, 20$ пс. На временах около 10 пс происходит пересечение зоны двухфазной смеси кристалл–жидкость. Описание фазовых кривых см. в тексте. Параметры воздействия и пленки такие же, как в случае рис. 3–6

смеси постепенно меняется с течением времени. Высокие скорости пространственного расширения зоны перехода кристалла в расплав обусловлены высокими скоростями распространения электронной тепловой волны в случае УКЛИ (см. рис. 3). Соответственно, электронная температура быстро выравнивается по толщине пленки. Поэтому нагрев ионной подсистемы идет примерно однородно по пространству (см. рис. 6). Следовательно, с течением времени примерно однородно по пространству меняется фазовый состав вещества пленки. Положение осложняется тем, что из-за растяжения золота в волнах разрежения возникают участки, на которых вещество пересекает бинадаль и переходит в метастабильное состояние. Это ясно иллюстрирует рис. 7.

На рис. 7 показана фазовая диаграмма золота согласно широкодиапазонному УРС [36, 37, 53, 54]. Бинадаль (кривая 1) отделяет двухфазную область пар–конденсированная фаза. Горизонтальный участок с $T_i = 1337$ К на бинадали соответствует тройной точке. Салидус (кривая 2) отделяет кристалл от

двухфазной смеси твердой и жидкой фаз. Ликвидус (кривая 3) — верхняя граница двухфазной смеси твердой и жидкой фаз при равновесном плавлении. На бинадаль наложены три профиля $T_i(\rho, t)$ распределений $\rho(z^o, t)$, $T_i(z^o, t)$ по толщине пленки золота. Мгновенные профили представляют собой отдельные кривые, на которых на фазовой плоскости на рис. 7 температура T_i поднимается снизу вверх от нижней кривой к средней и от средней кривой к верхней. На рис. 7 более высокие температуры находятся сверху. На конкретном мгновенном профиле более горячие по температуре T_i точки располагаются ближе к границе между золотом и вакуумом (см. рис. 6). Это связано с тем, что в варианте, соответствующем рис. 3–7, пленка нагревается лазером со стороны вакуума.

На отрезке времен $t \approx 10$ пс профили $T_i(\rho, t)$ пересекают двухфазную полосу солидус–ликвидус. Это означает, что все золото пленки плавится. Любопытно, что встреча волн разрежения происходит именно на отрезке времен, относящихся к плавлению. Сказанное относится к случаю с $F_{abs} = 40$ мДж/см². Две волны разрежения [14, 16], бегущие по пленке от границ с вакуумом и со стеклом, встречаются примерно посередине пленки. Обратите внимание на провал, соответствующий середине пленки на рис. 6, на профиле $t = 10$ пс. Вместе с уменьшением температуры T_i к краям пленки этот провал сигнализирует о том, что произошла встреча двух волн разрежения.

На профилях имеются участки, на которых вещество находится в растянутом состоянии с отрицательным ионным давлением $P_i < 0$. Во-первых, это связано с тем, что всегда положительное электронное давление растягивает конденсированную фазу в волне разрежения (см. обсуждение данного обстоятельства в работах [55, 56, 62]). Во-вторых, парциальные (P_e, P_i) и суммарное ($P = P_e + P_i$) давления меняются из-за передачи энергии от электронов ионам. Поэтому волны разрежения не являются строго автомодельными. На участках с $P_i < 0$ вещество переходит в метастабильное состояние. Амплитуда растяжения недостаточна для разрыва конденсированной фазы на наших масштабах времени. Участки профилей с $P_i < 0$ находятся под бинадалью 1 на рис. 7. Отметим, что в данном варианте широкодиапазонного УРС, солидус 2 и ликвидус 3 продолжают в метастабильную область [18].

Профиль с $t = 20$ пс на рис. 7 относится к этапу, на котором область растяжения приближается к контактной границе между пленкой (золото) и подложкой (стекло.) Поэтому более горячий участок,

Таблица. Фазовый состав, время t_{spall} откола и скорость v_{cm} центра масс пленки толщиной $d_f = 60$ нм после откола; $n^o = 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ — начальная концентрация атомов золота

$F_{abs}, \text{ мДж/см}^2$	10	20	30	40
$F_{abs}/d_f n^o, \text{ эВ/атом}$	0.17	0.35	0.52	0.69
$t_{spall}, \text{ пс}$	25	28.5	37	35
$T(t_{spall}), \text{ кК}$	0.9	1.337	1.7	2.4
Количество жидкой фазы, %	0	20	100	100
$v_{cm}, \text{ м/с}$	12.6	25	53	70

соответствующий золоту вне окрестности контакта, находится под бинадалью. Только участок возле контакта остается в сжатом состоянии. Далее волна разрежения, идущая со стороны вакуума, выходит на контактную границу, давление на этой границе снижается до нуля. Если пренебречь когезией между стеклом и золотом, то в момент t_{spall} , когда давление на контакте $P_c(t)$ обращается в нуль, пленка отделяется от подложки (см. разд. 2.3, посвященный динамическим проявлениям).

Почему в момент t_{spall} , когда $P_c(t) = 0$, происходит отделение пленки? Причина проста. Если бы отделение не произошло, то функция $P_c(t)$ стала бы отрицательной: $P_c(t) < 0$ при $t > t_{spall}$. Тогда как по предположению напряжение P_{coh} когезии золота на стекле мало. Рассмотрим ситуации с конечными значениями механической прочности контакта. Пусть функция $\Delta v(P_{coh})$ дает зависимость скорости расхождения границ стекла и золота в момент откола t_{spall} , определяемый уравнением $-P_c(t_{spall}) = P_{coh}$. Отметим, что скорость $\Delta v(P_{coh})$ обращается в нуль при $P_{coh} = 0$ и растет с ростом величины P_{coh} . Таким образом, при малом напряжении когезии пленки к подложке ($P_{coh} \approx 0$) зазор между границами пленки и подложки при $t > t_{spall}$ расширяется медленно.

На рис. 3–7 анализируется случай пленки $d_f = 60$ нм и $F_{abs} = 40 \text{ мДж/см}^2$. Пленка отрывается от стекла в момент времени $t_{spall} = 35$ пс (см. таблицу). Полет пленки после откола происходит в расплавленном состоянии (см. рис. 7). Посмотрим, как величина поглощенной энергии влияет на фазовое состояние при других значениях F_{abs} . В таблице приведены значения моментов времени откола t_{spall} при пренебрежении механической прочностью контакта

стекло–пленка. Вместе со значениями t_{spall} даются величины скоростей центра масс пленки v_{cm} после отрыва пленки от стекла. Они понадобятся нам в разд. 2.3.

Таблица необходима для определения порога плавления, выше которого пленка после отрыва летит в полностью расплавленном состоянии. Она заменяет графики, приведенные на рис. 7 для $F_{abs} = 40 \text{ мДж/см}^2$, для случаев с другими значениями F_{abs} . Из таблицы следует, что флюенс $F_{abs} = 10 \text{ мДж/см}^2$ недостаточен для плавления. В этом случае на этапе динамического взаимодействия пленки со стеклом ($t < t_{spall}$) и после отрыва ($t > t_{spall}$) пленка остается в твердом состоянии. Поэтому доля жидкой фазы равна нулю. Количество жидкой фазы приведено в таблице. Воздействие УКЛИ нагревает металл до 0.9 кК. Начальная температура равна 0.3 кК. Приращение температуры ΔT легко оценить, записывая баланс энергии $d_f C \Delta T = F_{abs}$. При $d_f = 60$ нм, $C \approx 3k_B n^o$, $n^o \approx 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $F_{abs} = 10 \text{ мДж/см}^2$ находим $\Delta T = 0.67$ кК. Эта оценка примерно на 10 % завышает разность температур, поскольку не учитывает энергию, находящуюся в волне сжатия в стекле. В момент $t_{spall} = 25$ пс кинетическая энергия пленки составляет 0.3 % от энергии F_{abs} . Кинетическая энергия направленного движения $(1/2)\rho^o d_f v_{cm}^2$ в момент $t_{spall} = 25$ пс равна 0.18 % от энергии F_{abs} .

При $F_{abs} = 20 \text{ мДж/см}^2$ расчет с равновесным УРС показывает, что еще до момента откола золото достигает температуры тройной точки (см. таблицу). В расчетах с равновесным УРС плавление происходит быстрее, чем при учете кинетики плавления. Этот эффект существен, если перегревы невелики и не выходят за спинодаль перегретой твердой фазы. Как уже упоминалось, температура на спинодали на 25–40 % [61] превосходит температуру на кривой плавления. Вариант с $F_{abs} = 20 \text{ мДж/см}^2$ относится к случаю малых перегревов. Поэтому, видимо, в момент откола золото находится в состоянии перегретой твердой фазы. Частичное плавление происходит позже, уже в полете. Порог плавления находится между значениями 20 и 30 мДж/см². При $F_{abs} = 30 \text{ мДж/см}^2$ золото плавится еще до откола от стекла. При этой энергии мгновенное распределение фазового состава по пленке пересекает двухфазную область расплав–кристалл в интервале времен от 9 до 21 пс. Процесс пересечения двухфазной полосы при $F_{abs} = 40 \text{ мДж/см}^2$ проиллюстрирован на рис. 7.

В нашей постановке одной границей пленки является вакуум, а другой — стекло. Исследованиям

динамики свободной пленки, когда обе границы — это границы с вакуумом, посвящены работы [63, 64] (см. также [65]). В этих работах определены пороги плавления и абляции в зависимости от значений параметра $F_{abs}/d_f n^o$, приведенного в таблице. Данные таблицы согласуются с работами [63, 64] по порогу плавления.

2.3. Динамическое поведение

Причиной гидродинамического движения пленки и подложки является тепловое расширение золота. Поэтому динамические явления анализируются после тепловых. В данном подразделе рассматривается формирование и распространение двух волн разрежения в пленке и распространение волны сжатия в стекле. Обнаружены два новых любопытных эффекта. Во-первых, это «след» сверхбыстрого роста и снижения электронного давления P_e . След образуется на ультракороткой стадии сверхбыстрого роста и снижения давления P_e во время действия УКЛИ чрезвычайно малой длительности $\tau_L \sim 0.1$ пс. Образовавшись, след путешествует по характеристикам, идущим от границы с вакуумом в толщу пленки и затем стекла.

Во-вторых, интересным является процесс преломления и отражения волны разрежения, идущей от границы золото–вакуум, на контакте пленка–стекло с большим отношением акустических импедансов. Отмеченный след разделяется на два (прошедший и отраженный) во время преломления и отражения волны разрежения. Процесс отражения существенным образом сказывается на наборе импульса пленкой за время динамического взаимодействия между золотом и стеклом. Набранный импульс определяет скорость центра масс пленки v_{cm} (см. таблицу) после ее отделения от стекла. От распределения энергии $F_{abs}(x, y)$ по пятну освещения и функции $v_{cm}(F_{abs})$ зависит форма купола, который образует отслоившаяся пленка (см. рис. 2). Основной целью, стоящей перед одномерным гидродинамическим расчетом, является определение температуры $T(F_{abs})$ и скорости $v_{cm}(F_{abs})$ оторвавшейся пленки. Эти сведения требуются для решения трехмерной задачи о полете пленки. Трехмерной задаче посвящен разд. 3.

На рис. 8 показаны профили A , B и C волны разрежения, бегущей от границы с вакуумом. В конденсированной среде волна разрежения имеет вид, отличный от вида в случае газовой среды [4, 12, 13, 66]. Это связано с тем, что в конденсированной среде, в отличие от газа, имеется конечное сопротивление растяжению и волна разрежения состоит из участка

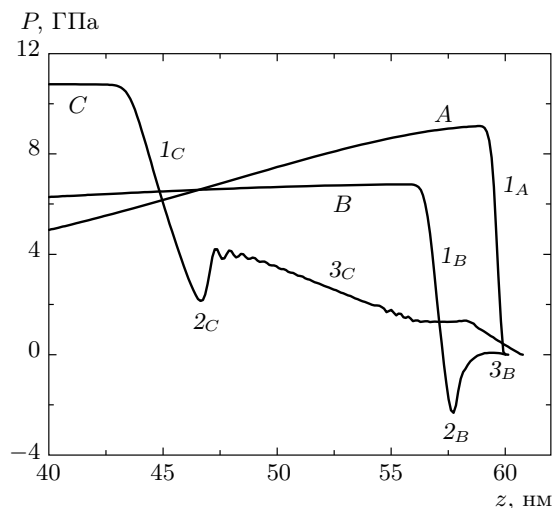


Рис. 8. Распространение волны разрежения от вакуумной границы в толщу пленки (справа налево). Профили A , B и C соответствуют моментам времени $t = 0.1, 1, 5$ пс. Параметры УКЛИ и пленки, как на рис. 3–7

спада давления и плотности и участка постоянного течения (плато, или полочка). На плато давление равно давлению внешней среды. При расширении в вакуум давление на плато равно нулю, а вещество на плато находится на бинадали, показанной на рис. 7. Соответственно, профили на рис. 8 имеют участки 1 крутого спада давления и участки «плато» 3. Чем меньше амплитуда волны, тем точнее течение описывается формулами линейной акустики и тем короче и круче участок спада давления 1. Из-за нелинейных эффектов крутизна участка 1 убывает со временем, поскольку скорость звука больше при большем давлении. Мерой нелинейности является отношение амплитуды давления к объемному модулю K ; для золота $K = 180$ ГПа. К моменту 0.1 пс плато на профиле еще не сформировалось (см. рис. 8). В нашей ситуации давление в толще пленки переменное по времени из-за электрон-ионного теплообмена. Поэтому вместо точного плато с нулевым градиентом давления и нулевым давлением, мы имеем участок «квазиплато» 3 с небольшим градиентом давления и небольшим давлением. Точное плато и автомобильный участок 1 соответствуют стационарной однородной ситуации [4, 12, 13, 66].

Обратим внимание на необычный провал 2 в профилях давления на рис. 8. Он располагается в изломе между участком 1 и квазиплато и движется влево вместе с этим изломом. Это означает, что провал бежит по характеристикам волны разрежения и

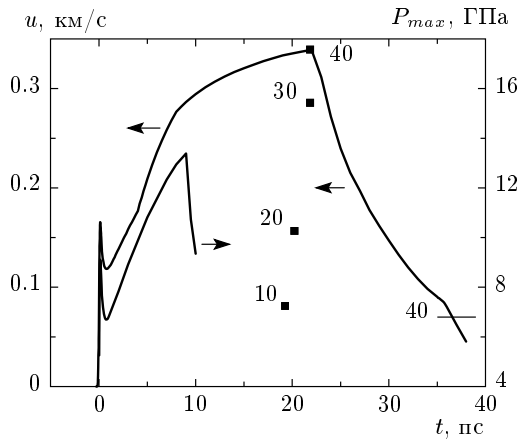


Рис. 9. Эволюция во времени скорости u границы золото–вакуум и максимального полного давления P_{max} при $F_{abs} = 40$ мДж/см². Значения $P_{max}(t)$ определяются максимальным значением на мгновенном профиле скорости, относящемся к моменту времени t . Квадраты соответствуют моменту времени и величине максимальной скорости вакуумной границы. Цифры 40, 30, 20 и 10 дают значения энергии F_{abs} . Горизонтальный отрезок с цифрой 40 дает величину скорости центра масс v_{cm} из таблицы. Обратите внимание на большое отношение скорости границы (квадрат 40) и скорости v_{cm} (отрезок 40)

что он образовался на границе с вакуумом в момент $t \approx 0$. Распространение провала справа налево можно проследить и по локальным понижениям ионной температуры T_i на рис. 6, на котором видно, что на момент $t = 10$ пс провал достигает середины пленки.

Внешне провал напоминает «Z-волну», состоящую из участка сжатия $P > 0$ и участка растяжения $P < 0$. Такая волна является типичной. Она всегда образуется вследствие термомеханического воздействия на толстую мишень, если мишень толще, чем d_T . В работах [67] (см. рис. 1 в [67]) и [68] приводится x, t -диаграмма, на которой видно, что участки $P > 0$ и $P < 0$ распространяются в паре. Профили давления с парой участков $P > 0$ и $P < 0$ показаны в работах [65, 69, 70]. Как образуется Z-волна, поясняется в статье [71]. Z-волна формируется вследствие пространственной неоднородности быстрого (сверхзвукового, изохорического) прогрева вещества у границы мишени. Неоднородность характеризуется толщиной d_T слоя прогрева. Соответственно участки Z-волны с положительным и отрицательным давлениями имеют протяженность порядка d_T .

Однако в нашей ситуации толщина провала (длина промежутка по оси z , который занимает провал)

намного меньше масштаба неоднородности d_T , который превышает толщину пленки $d_f = 60$ нм. Чтобы понять причины формирования провала, рассмотрим зависимости от времени скорости границы с вакуумом и максимума полного давления. Эти зависимости представлены на рис. 9. Видим, что существует короткий резкий пик полного давления и связанный с ним пик скорости границы. Этот же пик проявляется на зависимостях электронной температуры и энергии на рис. 4 и 5. Появление пика полного давления $P = P_i + P_e$ обусловлено высоким темпом выделения тепла в скин-слое из-за чрезвычайной кратковременности лазерного воздействия: $\tau_L = 100$ фс. Затем происходит резкий спад электронного вклада в давление вследствие быстрого пространственного распространения тепла из скин-слоя. Это проиллюстрировано выше на рис. 3 — видно, что выравнивание температуры T_e по пленке занимает лишь одну пикосекунду.

Снижение величин T_e и P_e в силу электрон-ионного теплообмена продолжается гораздо дольше по сравнению с их снижением из-за теплопроводности, и поэтому не имеет отношения к формированию провала. Из рис. 9 видно, что после резкого первого пика при $t \approx 0$ полное давление начинает расти на временах, определяемых электрон-ионным теплообменом. Этот рост связан с тем, что ионный параметр Грюнайзена $\Gamma_i \approx 2$ больше, чем электронный параметр Грюнайзена $\Gamma_e \approx 1$ [35]. Соответственно, при малом изменении удельного объема полное давление растет по мере того, как энергия переходит из электронной подсистемы в ионную.

Появление растяжения вещества у границы связано с тем, что сначала скорость границы была большой, а несколько позже снизилась. Поэтому более глубокие слои тормозят быстро летящий слой у границы. Таким образом, подъем и снижение давления (резкий пик на рис. 9) приводят к появлению слоя с растяжением и отрицательным давлением. Эта ситуация соответствует профилю B и провалу 2_B на рис. 8. Далее давление начинает расти и граница начинает относительно (относительно пика при $t \approx 0$) медленно ускоряться (см. рис. 9). Условия для растяжения вещества у границы пропадают. Но след провала, созданного на ранней стадии $t \approx 0$, переходит в волну разрежения и распространяется по характеристикам и, таким образом, сохраняется. При этом давление внутри следа становится положительным из-за роста полного давления и ускорения границы (см. пример с профилем C и провалом 2_C на рис. 8). При этом форма провала сохраняется. Ширина его медленно увеличивается из-за зависимости скорости

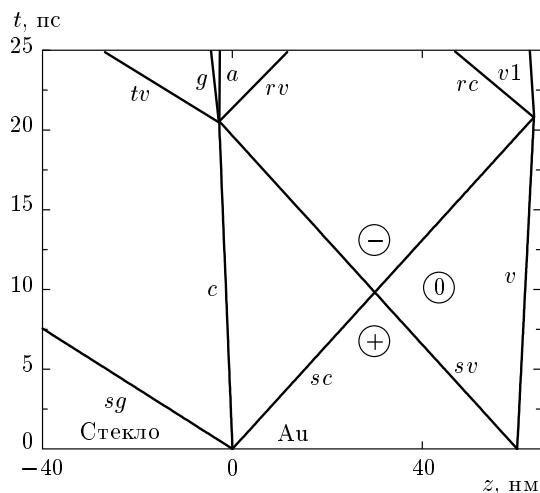


Рис. 10. Распространение двух встречных волн разрежения, sc и sv , по пленке золота. Волна sc бежит от контакта c , а sv — от границы с вакуумом v , $v1$. Передний фронт волны сжатия в стекле обозначен sg

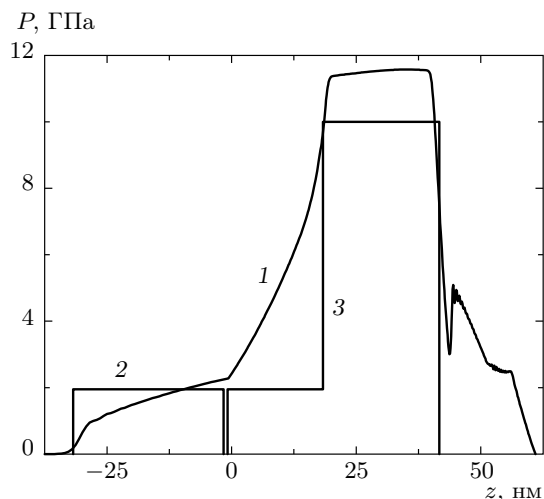


Рис. 11. Сравнение численного (кривая 1) и линейного аналитического (ломаные 2 и 3) решений. Момент времени $t = 6$ пс; $F_{abs} = 40$ мДж/см², $d_f = 60$ нм, $\tau_L = 100$ фс

звука от амплитуды (нелинейный эффект).

Обнаружение пика, провала и его следа в волне разрежения, бегущей на рис. 6, 8 налево, произошло благодаря тому, что система (3)–(6) решается численно с мелким шагом 0.02–0.1 нм по пространству. Ширина провала составляет 1–2 нм. Она определяется масштабом порядка $c_s \tau_L$. Вряд ли можно будет уловить такой тонкий эффект в молекулярной динамике, поскольку при $\tau_L = 0.1$ пс ширина провала сравнима с межатомным расстоянием.

Кроме рассмотренной выше волны разрежения, распространяющейся от вакуумной границы, имеется волна разрежения, которая распространяется по пленке от контакта стекло–золото. В золото идет волна разрежения, а в стекло — волна сжатия. Схема движения волн представлена на z, t -диаграмме на рис. 10. Акустический импеданс стекла $Z_g = 0.9 \cdot 10^6$ г/см²·с меньше, чем акустический импеданс золота $Z_a = 5.9 \cdot 10^6$ г/см²·с. Аналитическое акустическое решение в линейном приближении приведено в работе [72]. Анализируемое здесь численное решение значительно более содержательно, чем аналитическое решение. Сравнение решений показано на рис. 11. В гидродинамических 2Т-расчетах вместо стекла выбран алюминий, поскольку он имеет привычное нам УРС и близок по плотности и скорости звука к стеклам, но акустический импеданс алюминия $Z = 1.4 \cdot 10^6$ г/см²·с в полтора раза больше. Это обстоятельство (переход к алюминию) увеличивает скорость центра масс v_{cm} в 1.4 раза и умень-

шает скорость контакта на 8%. Аналитическое решение, приведенное на рис. 11, получено по формулам распада разрыва в сторону вакуума и в сторону стекла. Принято, что в случае с $F_{abs} = 40$ мДж/см² УКЛИ мгновенно создает однородное по пленке давление $P_o = 10$ ГПа; за P_o принято среднее по времени давление с рис. 9. При этом пренебрегается теплопроводным выравниванием температуры T_e по пленке (ср. с рис. 3), а также изменением полного давления из-за передачи энергии в ионную подсистему и разницы в электронных и ионных параметрах Грюнайзена (см. рис. 9).

В этих предположениях аналитическое решение состоит из набора двух постоянных давлений, показанных на рис. 11. С течением времени меняются положения и значения постоянных давлений. Это происходит согласно диаграмме на рис. 10. Представим вкратце аналитическое решение, чтобы понимать качественные особенности численного решения. На временном интервале $0 < t < t_s/2$ ($t_s = d_f/c_s \approx 20$ пс, $c_s = 3.05$ км/с — скорость звука в золоте в нормальных условиях) имеем значения трех давлений слева направо в аналитическом решении: $p_c = P_o Z/(Z + Z_a)$, P_o , 0 (см. три плато на рис. 11). Значения давлений P_o на среднем отрезке и $P = 0$ на правом отрезке выделены значками «плюс» и «0» на рис. 10. Границы прямоугольников по давлению (есть еще скачок плотности на контакте) движутся со скоростью звука в соответствующей среде. Скорость контакта $u_c = P_o/(Z + Z_a)$, скорость

границы с вакуумом равна P_o/Z_a .

На временном интервале $t_s/2 < t < t_s$ имеем следующие значения трех давлений: p_c ,

$$P_{neg} = -P_o + p_c = -P_o Z_a / (Z + Z_a) \quad (10)$$

и 0. Давления на втором и третьем отрезках выделены значками «минус» и «0» на рис. 10. Видим, что в треугольной области, помеченной значком минус на рис. 10, возникают большие растягивающие напряжения (отрицательное давление). С течением времени слой растяжения (значок «минус») расширяется. Расширение в сторону контакта продолжается до момента выхода звуковой волны sv на рис. 10 на границу пленки s . Координаты z, t точки пересечения траекторий sv и s на рис. 10 следующие:

$$\frac{z_{sp}}{d_f} = - \left[\frac{K}{P_o} \left(1 + \frac{Z}{Z_a} \right) - 1 \right]^{-1},$$

$$t_{sp} = \frac{t_s}{1 - (P_o/K)/(1 + Z/Z_a)} \approx t_s. \quad (11)$$

Видим, что в линейном режиме $P_o \ll K$ смещение z_{sp} мало по сравнению с толщиной пленки d_f (см. рис. 10). Мерой нелинейности является отношение давления к объемному модулю золота P_o/K , а мерой симметрии расширения пленки — отношение импедансов. При симметричном расширении, когда обе границы пленки — это границы с вакуумом, имеем $Z/Z_a = 0$ и $v_{cm} = 0$.

Подчеркнем, что случаю неподвижного контакта соответствует бесконечно большой импеданс стекла, соответственно $Z/Z_a = \infty$. В такой постановке задача рассматривалась в работах [1, 2]. В этом случае качественно меняется характер динамического взаимодействия пленки с контактом. Вместо волны разрежения sc , начинающей в момент $t/t_s \approx 0$ свое распространение в стекло влево и в золото вправо (см. рис. 10), вещество у контакта остается в положении покоя с неизменной плотностью до прихода на контакт волны разрежения sv , испущенной границей с вакуумом в момент $t \approx 0$. Это сказывается на течении в целом, например, скорость границы с вакуумом на рис. 9 не начинает уменьшаться в момент $t \approx t_s$, поскольку уменьшение связано с приходом волны разрежения sc от контакта. Скорость v_{cm} центра масс пленки после отделения пленки от стекла оказывается намного больше значений, приведенных в таблице. Это связано с отсутствием расширения в сторону стекла.

Вернемся к случаю $Z \ll Z_a$, который реализуется в опытах. При $t = t_{sp} + 0$ волна растяжения

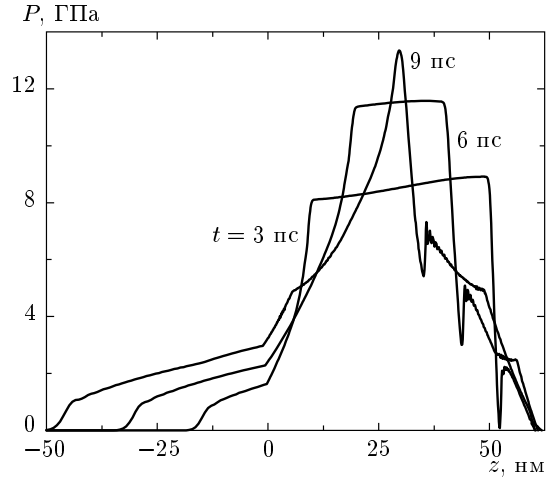


Рис. 12. Медленное расширение пленки и распространение волны сжатия в стекло. Трансформация левой sc и правой sv волн разрежения до их встречи примерно посередине пленки. $F_{abs} = 40$ мДж/см²

прибывает на границу s , и начинается растяжение контакта между пленкой и подложкой. Если пренебречь адгезией золота к стеклу ($P_{coh} = 0$), то отделение пленки от подложки происходит в момент t_{sp} (момент откола). На рис. 10 после откола вместо контакта s появляются две расходящиеся траектории, g и a . При этом профиль гидродинамического течения разбивается на пять участков: 1) $sg-tv$, давление равно p_c , tv — прошедшая волна, образовавшаяся в результате преломления волны разрежения sv на скачке импеданса на контакте c ; 2) $tv-g$, давление равно нулю; 3) $a-rv$, давление равно нулю; 4) $rv-rc$, давление отрицательное P_{neg} (10); 5) $rc-v1$, давление равно нулю.

Вернемся к описанию численного решения. Волны разрежения sc и sv на рис. 10 встречаются в момент времени $t \approx t_s/2 \approx 10$ пс в середине пленки. Со встречей волн разрежения sc и sv связано начало резкого падения давления (см. рис. 9). После встречи с волной sv волна разрежения sc продолжает движение к границе с вакуумом v ($v1$ на рис. 10). Волна sc достигает вакуумной границы в момент времени $t \approx t_s$. Этот момент времени разделяет участки v и $v1$ траектории границы с вакуумом, на которых скорость границы имеет разные знаки. Вблизи момента $t_s \approx 20$ пс начинается уменьшение скорости границы с вакуумом (см. рис. 9). Примерно одновременно при $t \approx t_s$ волна разрежения sv , бегущая от вакуумной границы, достигает контакта (см. рис. 10).

Эволюция профилей до встречи волн sc и sv

проиллюстрирована на рис. 12. Ситуация соответствует простому развитию распада скачка давления между золотом, находящимся под давлением, и стеклом, давление в котором равно нулю. Передача энергии в ионы объемным источником $\alpha (T_e - T_i)$ в уравнении (6) поднимает полное давление P (см. рис. 9) из-за разницы параметров Грюнайтзена. Электрон-ионная релаксация продолжается примерно 5–15 пс (см. рис. 5) по энергии и около 35 пс по температуре (см. рис. 4). Повышение давления P со временем существенно изменяет численное решение по сравнению с аналитическим (см. рис. 11). В областях, где находятся плато справа и слева на аналитическом решении, имеем растущие по оси z распределения P . Рост P в пространстве в направлении к слою высокого давления внутри золотой пленки вызван ростом P во времени в слое высокого давления. Излом градиента P на контакте c связан со скачком плотности на контакте. Ускорения частиц слева и справа от контакта одинаковы, а плотности разные: отношение градиентов P равно отношению плотностей, т. е. в золоте градиент круче.

Рассмотрим взаимодействие волны sv с контактом c . В линейной акустике взаимодействие мгновенно и в момент $t_{sp} \approx 20$ пс (11) приводит к отколу. В реальной ситуации откол происходит позже; например, при $F_{abs} = 40$ мДж/см² имеем $t_{spall} = 35$ пс (см. таблицу). Это вызвано размытостью фронта волны и наличием квазиplate с ненулевым давлением (см. рис. 8, на котором фронт волны отмечен цифрами 1 для трех моментов времени, а квазиplate — цифрами 3). В линейной акустике отражение $sv \rightarrow c$ приводит к появлению прошедшей в стекло волны tv , разрыва с берегами g и a , отраженной волны rv (см. рис. 10). Волна sv имеет две важные характеристики. Это бегущая впереди характеристика sv и характеристика на изломе между фронтом и квазиplate (см. рис. 8). Характеристика на изломе отмечена цифрой 2 на рис. 8.

На рис. 13 проиллюстрировано прохождение волны sv через контакт c в случае $F_{abs} = 40$ мДж/см². Положения контакта c в моменты времени 19, 25, 30, 35.3 пс отмечены четырьмя кружками. В момент 19 пс правая волна разрежения (см. рис. 12) подходит к контакту. В этот момент характеристики sv и 2 этой волны находятся правее контакта. Излом градиента ∇P все еще ускоряет контакт. Характеристики sv и 2 окаймляют крутой участок волны разрежения, бегущей справа налево от границы с вакуумом (см. рис. 12). Далее характеристика sv пересекает контакт и превращается в прошедшую характеристику tv (см. рис. 13). В момент 25 пс харак-

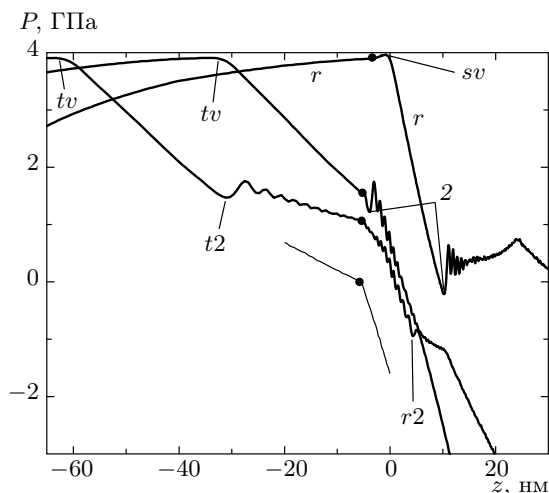


Рис. 13. Прохождение через контакт стекло–золото крутого участка $sv-2$ и квазиplate волны разрежения, идущей от границы с вакуумом. Показаны четыре профиля (справа налево), относящиеся к моментам времени $t = 19, 25, 30, 35.3$ пс. Чтобы не загромождать рисунок, от профиля 35.3 оставлен только кусок возле контакта. В момент 35.3 пс давление на контакте снижается до нуля. После этого начинается медленное расхождение границ стекла и золота

теристика 2 вплотную приближается к контакту. На профиле, соответствующем 30 пс, отмечены особенности, связанные с прошедшей характеристикой $t2$ и отраженной характеристикой $r2$. Характеристики $t2$ и $r2$ порождены характеристикой 2. При прохождении крутого участка $sv-2$ через контакт давление на нем быстро снижается. Поэтому ускорение контакта уступает место торможению контакта. Соответственно, градиент ∇P меняет знак. Но по-прежнему, в золоте абсолютное значение градиента больше, поскольку золото плотнее стекла.

Вычислим скорость v_{cm} центра масс пленки после ее откола от стекла. До воздействия УКЛИ импульс системы пленка + стекло равен нулю. Если пленка оторвалась от стекла, то суммарный импульс по-прежнему равен нулю (импульсом поглощенных фотонов пренебрегаем). Но импульс пленки

$$i = \int_{z^o=0}^{z^o=60} \rho u dx$$

становится конечной величиной, равной

$$i = \int_{-\infty}^{t_{sp}} p_c(t) dt.$$

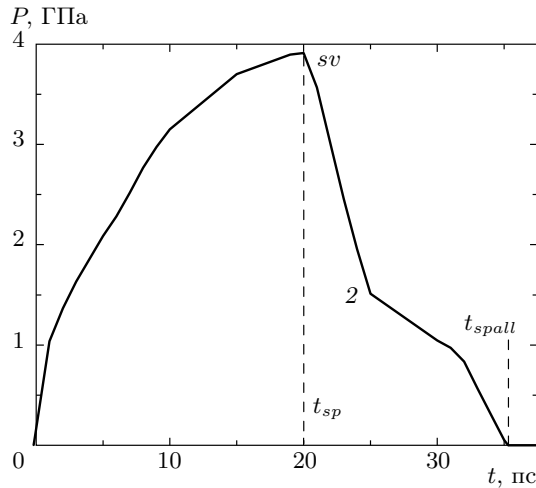


Рис. 14. Ускорение центра масс пленки за счет давления стекла на пленку через контакт стекло–золото. Сначала суммарное давление $P = P_e + P_i$ растет за счет электрон–ионной релаксации. Затем на контакт прибывает характеристика sv и давление $p_c(t)$ начинает быстро снижаться (см. также рис. 13). $F_{abs} = 40$ мДж/см²

Таким образом, скорость $v_{cm} = i/m$ определяется давлением на контакте; здесь

$$m = \int_{z^o=0}^{z^o=60} \rho dx = \rho^o d_f$$

— масса пленки.

Подынтегральная функция $p_c(t)$ приведена на рис. 14. В линейном случае импульс и скорость равны $p_c t_s$ и $v_{cm} = (Z_g/Z_a)u_c$, где $u_c = P_o/(Z_g + Z_a)$. В линейном случае функция $p_c(t)$ имеет прямоугольную форму. Эта функция равна нулю при $t > t_{sp} \approx t_s \approx 20$ пс (11), см. рис. 10 и 11. В реальной ситуации вместо прямоугольника на рис. 14 имеется растущая функция, значения которой начинают уменьшаться после того, как характеристика sv пересекла контакт. Пересечение происходит в момент $t_{sp} \approx 20$ пс. Между точками sv и 2 на рис. 14 давление $p_c(t)$ резко снижается. Этот участок соответствует прохождению крутого участка sv -2 волны разрежения, идущей со стороны вакуума (см. рис. 11–13). Затем на контакт прибывает квази-плато волны разрежения sv . Ему соответствует участок между точками 2 и t_{spall} . Значение t_{spall} для $F_{abs} = 40$ мДж/см² указано в таблице. В результате пленка набирает скорость v_{cm} , указанную в таблице. График на рис. 14 похож на зависимость скорости границы с вакуумом на рис. 9. Но на рис. 9 умень-

шение скорости определяет волна разрежения, бегущая от контакта, тогда как на рис. 14 спад давления задается волной разрежения, бегущей от вакуумной границы.

3. БЛИСТЕРИНГ ПЛЕНКИ НА ПОДЛОЖКЕ

3.1. Капиллярные эффекты

Приведенные выше вычисления, выполненные с помощью одномерного гидродинамического 2Т-кода, играют исключительную роль. Они поясняют механизм отскока металлической пленки от диэлектрической подложки и определяют начальное поле скоростей $v_{cm}(x, y) = v_{cm}[F_{abs}(x, y)]$. Код аппроксимирует систему уравнений (3)–(6). Важным параметром является диаметр R_L лазерного пучка. Именно с ним связаны неоднородные эффекты, которым посвящен настоящий раздел. В перпендикулярном оси пучка направлении распределение интенсивности убывает при удалении от оси пучка. В качестве функции, аппроксимирующей распределение интенсивности в перпендикулярной оси пучка плоскости, можно выбрать ту или иную куполообразную функцию, например функцию Гаусса. Распределение интенсивности по поверхности пленки пропорционально $\exp(-x^2/R_L^2)$ в случае пучка в форме полосы, $\exp(-r^2/R_L^2)$, $r^2 = x^2 + y^2$ в случае осесимметричного пучка, падающего на мишень по нормали к поверхности мишени, и $\exp[-(x^2 + y^2 \cos^2 \beta)/R_L^2]$ в случае осесимметричного пучка, падающего на мишень под углом β между нормалью и осью пучка.

Рассмотрим случай, когда пленка в пятне нагрева расплавилась в результате воздействия УКЛИ. Тогда на динамику полета пленки после ее отрыва от стекла влияет поверхностное натяжение горячего расплава. Коэффициент поверхностного натяжения является фиксированной (неизменяемой) функцией температуры жидкой фазы (рис. 15). То же (неизменяемость) относится к плотности золота ρ^o при нормальных условиях. Поэтому, казалось бы, характер влияния коэффициента σ на динамику определяется изменяемыми величинами R_L , d_f и v_o ; за v_o примем значение скорости центра масс пленки (см. таблицу) на оси лазерного пучка⁹). Но радиус R_L выпадает из числа параметров. Капиллярный масштаб

⁹ Как говорилось в разд. 1, процесс отрыва пленки, с одной стороны, и процесс полета пленки, с другой, могут рассматриваться отдельно. Действительно, временные масштабы этих двух процессов различаются на три порядка. Длительность первого процесса $t_s \sim 10$ пс, а длительность второго процесса $R_L/v_o \sim 10$ нс, т. е. $R_L/v_o \gg t_s$.

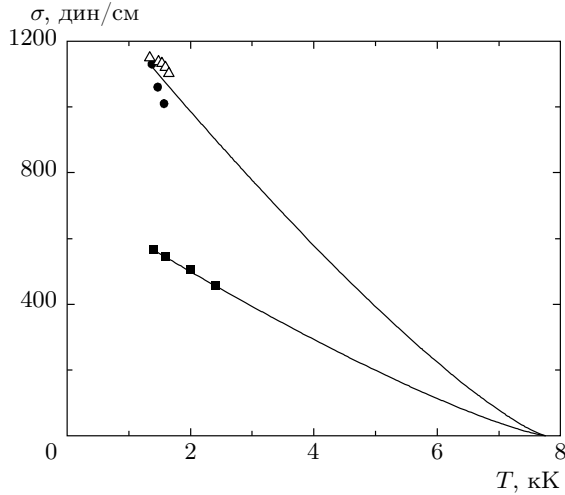


Рис. 15. Поверхностное натяжение σ на отрезке бинадали пар–жидкость, т.е. на кривой кипения (см. Приложение). Треугольники и черные кружки — экспериментальные данные из работ [73, 74]. Квадраты — значения σ согласно потенциалу золота [70], рассчитанному в приближении погруженного атома (embedded atom model, EAM). Кривые — аппроксимации вида $\sigma(T) = \sigma_3[(1 - T/T_c)/(1 - T_3/T_c)]^{1.25}$ [75], $T_3 = 1.337$ кК и $T_c = 7.756$ кК — температуры в тройной и критической точках, $\sigma_3 = \sigma(T_3)$. Известно, что EAM-потенциалы обычно заметно занижают коэффициент σ

скорости v_σ находится из сравнения поверхностной и кинетической энергий пленки:

$$2\sigma = \frac{\rho^\circ v_\sigma^2 d_f}{2}, \quad v_\sigma^2 = \frac{4\sigma}{\rho^\circ d_f} \equiv \frac{4\sigma}{\mu_o}, \quad (12)$$

где μ_o [г/см²] = $\rho^\circ d_f$ — поверхностная плотность пленки до начала движения. В параметр v_σ радиус R_L не входит. В равенстве (12) перед σ стоит множитель 2, поскольку после отрыва от стекла пленка имеет две свободные поверхности. Таким образом, при пренебрежении теплопроводным охлаждением вдоль металлической пленки и заморозкой расплава единственный безразмерный параметр, регулирующий движение, это безразмерная скорость

$$\hat{V}_o = v_o/v_\sigma. \quad (13)$$

Если пренебречь разрывом пленки (пленка бесконечной растяжимости), то поверхностное натяжение всегда остановит и повернет назад к подложке движение отлетающей пленки даже при $\hat{V}_o \gg 1$ (13), когда на начальном этапе кинетическая энергия до-

минирует. Форма пленки на подложке показана выше на рис. 2. Действительно, поверхностная энергия неограниченно увеличивается по мере увеличения поверхности пленки, тогда как кинетическая энергия ограничена.

В чем заключается роль радиуса R_L , если в определении параметра (13) он не входит? При фиксированном значении \hat{V}_o (13) процесс развития «вспучивания» (bumping), см. рис. 2, одинаков в безразмерных координатах

$$\hat{x} = \frac{x}{R_L}, \quad \hat{y} = \frac{y}{R_L}, \quad \hat{z} = \frac{z}{R_L}, \quad \hat{t} = \frac{t}{R_L/v_\sigma}, \quad (14)$$

т.е. при равных параметрах \hat{V}_o и в равные моменты времени \hat{t} размер вспучивания просто пропорционален величине R_L .

Запишем уравнения движения пленки в безразмерном виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \hat{r}}{\partial \hat{t}^2} &= -C \frac{\partial \hat{z}}{\partial \hat{a}}, \quad \frac{\partial^2 \hat{z}}{\partial \hat{t}^2} = C \frac{\partial \hat{r}}{\partial \hat{a}}, \\ \hat{R} &= \frac{k^3}{\hat{z}'' \hat{r}' - \hat{r}'' \hat{z}'}, \quad k = \sqrt{\hat{r}'^2 + \hat{z}'^2}, \\ \hat{r}' &= \frac{\partial \hat{r}}{\partial \hat{a}}, \quad \hat{z}' = \frac{\partial \hat{z}}{\partial \hat{a}}, \quad C = \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{r}}{\hat{a} \hat{R}} + \frac{\hat{z}'}{k \hat{a}} \right). \end{aligned} \quad (15)$$

Система из двух уравнений (15) соответствует осесимметричной геометрии. При этом ось z на рис. 2 является осью вращения, а r — цилиндрический радиус, т.е. расстояние до оси z , $\hat{r} = r/R_L$. Пленка считается бесконечно тонкой. Дуга пленки пробегается лагранжевой координатой a ; $\hat{a} = a/R_L$. Координата a задается как начальное значение радиуса r , на котором до начала движения находилась материальная частица пленки на подложке. До начала движения поверхность подложки — это плоскость $z = 0$.

В размерных переменных система (15) имеет вид

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = -2 \frac{\sigma}{\mu_o} \frac{r}{a} \frac{ds}{da} (R_{rz}^{-1} + R_t^{-1}) \mathbf{n}, \quad (16)$$

где $\xi = \{r, z\}$,

$$R_{rz} = \frac{s'^3}{z'' r' - r'' z'}$$

— радиус кривизны кривой, которая при вращении вокруг оси z образует осесимметричную поверхность выпучивания пленки на рис. 2, $r' = \partial r / \partial a$. Данная плоская кривая находится в плоскости rz . Второй радиус кривизны в уравнении (16),

$$R_t = \frac{r}{\cos \alpha} = \frac{rs'}{z'},$$

относится к плоской кривой, которая лежит в пересечении плоскости N и поверхности вращения, $\cos \alpha = dz/ds$; α — угол между осью z и касательной прямой к пленке. Эта касательная лежит в плоскости rz . Плоскость N проходит через вектор нормали \mathbf{n} к поверхности пленки и перпендикулярен к плоскости rz . Радиус R_t равен расстоянию от точки на пленке до оси z вдоль нормали \mathbf{n} .

Член слева в уравнении (16) связан с силой инерции $(2\pi a da)\mu_o \ddot{\xi}$ кольца с массой $(2\pi a da)\mu_o$, где $2\pi a da$ — площадь этого кольца на поверхности подложки до воздействия УКЛИ. Нормаль к точке с координатами r, z на поверхности пленки на рис. 2 направлена наружу, в сторону выпуклости пленки. Соответственно разность давлений, созданная поверхностным натяжением, направлена внутрь и тормозит пленку. Этому соответствует знак минус перед правой частью уравнения (16). Член справа получается из силы $(2\pi r ds)p$ капиллярного давления p на кольцо площадью $2\pi r ds$. Множитель $(1/\mu_o)(r/a)s'$ справа в уравнении (16) формируется из массы (без 2π) $\mu_o a da$ и площади (без 2π) $r ds$ кольца. Летящая пленка имеет две свободные поверхности, поэтому появляется множитель 2 в правой части уравнения (16).

В плоском случае система (15) принимает вид

$$\frac{\partial^2 \hat{x}}{\partial \hat{t}^2} = -\frac{1}{2\hat{R}_p} \frac{\partial \hat{z}}{\partial \hat{a}}, \quad \frac{\partial^2 \hat{z}}{\partial \hat{t}^2} = \frac{1}{2\hat{R}_p} \frac{\partial \hat{x}}{\partial \hat{a}}, \quad (17)$$

$$\hat{R}_p = \frac{k^3}{\hat{z}''\hat{x}' - \hat{x}''\hat{z}'}, \quad k = \sqrt{\hat{x}'^2 + \hat{z}'^2}, \quad \hat{x}' = \frac{\partial \hat{x}}{\partial \hat{a}}.$$

В плоской геометрии вспучивание имеет вид полосы вдоль оси y . Соответственно кривая $z(x, t)$ лежит в плоскости $y = \text{const}$. Вместо цилиндрического радиуса $r(a, t)$ в систему (17) входит координата $x(a, t)$.

3.2. Результаты интегрирования

Нелинейная система уравнений в частных производных (15) решалась численно с начальными и граничными условиями. Начальные условия имеют вид

$$\begin{aligned} r(a, t = -0) &= a, \quad z(a, t = -0) = 0, \\ \frac{\partial r(a, t = -0)}{\partial t} &= 0, \\ \frac{\partial z(a, t = -0)}{\partial t} &= \hat{V}_o v_o \cos^2 \frac{\pi a}{2R_L}. \end{aligned} \quad (18)$$

Условия (18) равномерно распределяют материальные частицы по плоскости подложки на отрезке $0 < a < R_L$ и задают начальное распределение скорости $\partial z/\partial t$ по нормали к подложке. Как говорилось в

разд. 2, 3, можно пренебречь временами $t_s \sim 20$ пс, за которые пленка отделяется от подложки, по сравнению с временами $R_L/v_o \sim 1$ [мкм]/100 [м/с] ~ 10 нс, за которые пленка перемещается на расстояния порядка R_L . Поэтому отсчет времени в условиях (18) ведется от момента $t = 0$. Задаче о воздействии УКЛИ подходят граничные условия

$$r(a = 0, t) = 0, \quad \partial z(a = 0, t)/\partial a = 0, \quad (19)$$

$$r(a = R_L, t) = R_L, \quad z(a = R_L, t) = 0, \quad (20)$$

которые соответствуют тому, что центральная лагранжева частица ($a = 0$) находится на оси z и кривизна пленки в вершине конечна (19). Кроме того, крайняя лагранжева частица ($a = R_L$) закреплена в точке $r = R_L, z = 0$ (20). Системы (15)–(17) четвертого порядка по времени и четвертого порядка по координате. Поэтому для их решения необходимо восемь начальных и граничных условий (18)–(20).

Системы (15)–(17) анализировались недавно в работе [72]. По сравнению с этой работой здесь будет представлена важная классификация решений в зависимости от определяющего параметра \hat{V}_o (13); тогда как в работе [72] рассмотрено несколько отдельных случаев, в которых происходит «прокидывание» решения и начинает зарождаться капля в вершине выпучивания. Будет исправлена допущенная в [72] неточность — формула для параметра C (15) должна содержать множитель 1/2. Кроме того, будут добавлены новые молекулярно-динамические (МД) расчеты в плоской геометрии, соответствующей уравнениям (17). Главное, ниже впервые представлены результаты МД-моделирования в осесимметричной геометрии. Они позволили теоретически объяснить происхождение обнаруженного недавно эффекта образования обратной струи (см. рис. 7 в работе [28]).

При малых значениях $\hat{V}_o \ll 1$ (13) пленка поворачивает назад в сторону подложки после небольшого удаления от подложки. Поэтому капля в вершине купола вспучивания образоваться не успеет. Формирование капли и струи в вершине происходит при $\hat{V}_o = \hat{V}_{cr}$. Прежде чем привести значения \hat{V}_{cr} для плоской и цилиндрической геометрий, проанализируем случай $\hat{V}_o > \hat{V}_{cr}$. Сравнение МД-расчета с решением системы (15) в этом случае представлено на рис. 16. Параметры расчета: осесимметричное лазерное воздействие; $\hat{V}_o = 2.60177$ (13); $R_L = 300$ нм; $v_o = 300$ м/с; $\mu_o = 1.64356 \cdot 10^{-5}$ г/см². До воздействия УКЛИ пленка ГЦК-кристалла золота имела толщину в 23 постоянных решетки 0.429434 нм

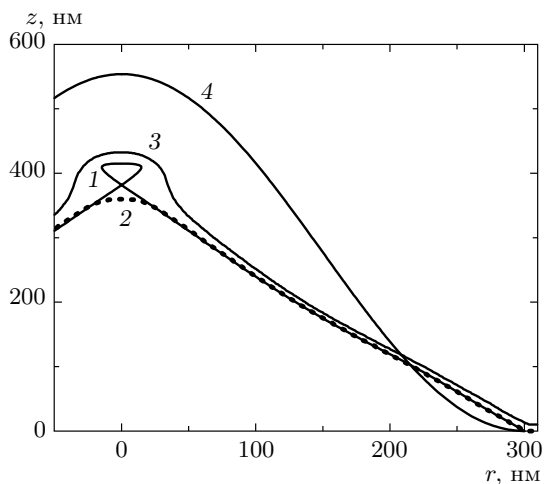


Рис. 16. Сравнение крупномасштабного (0.2 миллиарда частиц) МД-моделирования и результатов интегрирования системы (15): кривая 1 — в момент $t = 1.846$ нс, $\hat{t} = 0.70954 \approx 0.71$; кривые 2 и 3 — нижняя и верхняя границы пленки согласно МД-расчету. Параметры расчетов см. в тексте. Уровень $z = 0$ относится к поверхности подложки до воздействия УКЛИ. Для инерционной кривой 4 $\sigma = 0$ (полет пленки по инерции), а остальные параметры такие же, как в расчете системы (15)

при нормальных условиях ($p = 0$) для нашего ЕАМ-потенциала. При МД-расчете внутри области, ограниченной кругом $r = 300$ нм и квадратом 620×620 нм², постоянно работает термостат с нулевой скоростью, который принудительно удерживает край купола на подложке. Область МД-расчетов покрывала квадрат 620×620 нм². В расчете использовалось $191832512 \approx 200 \cdot 10^6$ атомов. Коэффициент поверхностного натяжения 546 дин/см для системы (15) такой же, как в МД-расчете (см. Приложение и рис. 15). В МД-расчете расплав золота имеет температуру 1600 К и плотность 16.55 г/см³, при этом вещество находится на бинадали (см. Приложение). После плавления термостатом и до начала движения толщина пленки составляла 9.9 нм. В МД-расчете принимается, что вещество находится между верхней и нижней границами пленки (см. рис. 16).

Из сравнения МД-данных и данных, полученных численным интегрированием системы (15), следует, что они очень хорошо соответствуют друг другу даже после начала формирования капли в вершине (см. рис. 16). В системе (15) капле соответствует петелька в вершине. На рис. 16 показан достаточно поздний момент времени, к которому капиллярные силы уже существенно затормозили купол (ср.

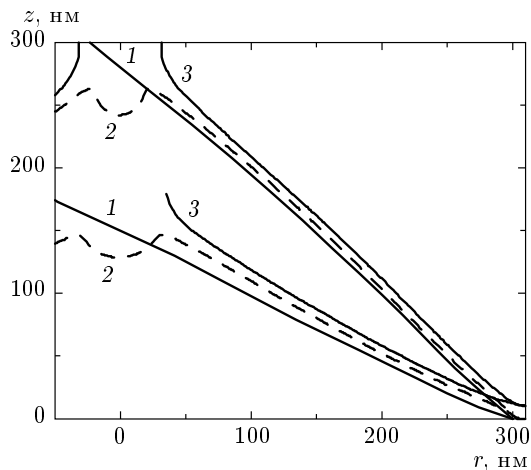


Рис. 17. Верхняя группа из трех кривых относится к $t = 2.86$ нс, а нижняя — к $t = 3.81$ нс. Имеются зоны центральной струи и контрструи. Пленка на показанные моменты времени прошла стадию останова и движется назад, к подложке. Номера кривых и параметры задачи такие же, как в случае рис. 16. Выпуклость вниз в центральной зоне на нижней из кривых 2 соответствует зарождающейся контрструе

кривые 1 и 4). Удовлетворительное согласие между МД-моделированием и расчетом системы (15) сохраняется даже на больших временах, когда становится велика масса капли (рис. 17).

Речь идет о сравнении форм пленки (в МД-расчете и согласно (15)) вне центральной зоны, в которой располагаются струя (летит вверх) и контрструя (летит вниз). Вычисление (с помощью решения системы (15)) дает для массы капли величины 26 % и 40 % на моменты времени $t = 2.86$ нс и $t = 3.81$ нс. Этим двум моментам времени соответствуют кривые на рис. 17. Проценты показывают отношение массы капли к полной массе пленки внутри круга радиуса R_L , см. условие (20). Для определения массы капли согласно решению системы (15), находим точку a_{drop} , в которой функция $r(a, t)$ первый раз обращается в нуль при вариации лагранжевой координаты a от 1 до a_{drop} . В этой точке происходит самопересечение пленки на оси z . Пример самопересечения показан на рис. 16 в виде петельки в вершине конусообразного купола. Форма пленки задается параметрически функциями $r(a, t)$ и $z(a, t)$, которые являются решениями системы (15). В момент $t = 1.846$ нс, представленный на рис. 16, координата точки самопересечения равна $\hat{a}_{drop} = 0.2285391$, а масса капли-петельки, отнесенная к полной массе,

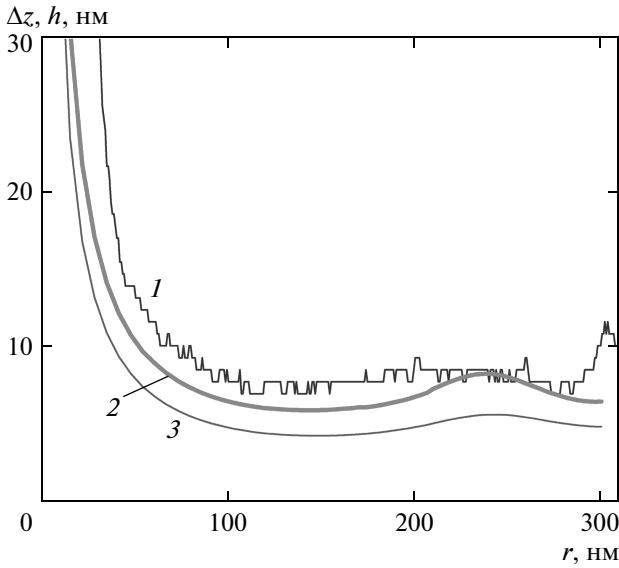


Рис. 18. Кривые $\Delta z = z_{high}(r, t) - z_{low}(r, t)$ дают разность высот верхней и нижней поверхностей вдоль оси z в момент $t = 2.86$ нс: кривая 1 — МД-расчет; 2 — система (15). Толщина пленки h (кривая 3) согласно (21). Параметры такие же, как для рис. 16

равна $\pi \hat{a}_{drop}^2 / \pi \hat{R}_L^2 = 0.228539^2 = 5.22\%$. Значение a_{drop} определяет координату, в которой кривые модели (15) на рис. 17 пересекают ось z .

До начала движения в результате воздействия УКЛИ пленка прилегала к оси z при значении $a = 0$. Лагранжева частица $a = 0$ является единственной частицей на оси z после начала движения и до момента t_{drop} , когда возникает самопересечение. В модели (15) в момент t_{drop} в вершине купола появляется зародыш капли. Далее этот зародыш развивается в струю и контрструю, как это следует из МД-моделирования. При $t > t_{drop}$ пленка покрывает отрезок от оси z до точки прикрепления $r = R_L$ за счет уменьшенного количества лагранжевых частиц a : $a_{drop} < a < R_L$. Таким образом, за счет раздувания купола при полете вверх и за счет ухода вещества в каплю имеет место растяжение пленки. Соответственно, толщина пленки уменьшается. Отметим, что в случае, показанном на рис. 17, раздувание купола сменяется движением назад к подложке. При этом аккумуляция вещества в капле действует в направлении уменьшения толщины пленки, а сокращение площади боковой поверхности купола действует в обратном направлении.

Распределение массы по радиусу r показано на рис. 18. В модели (15) имеем

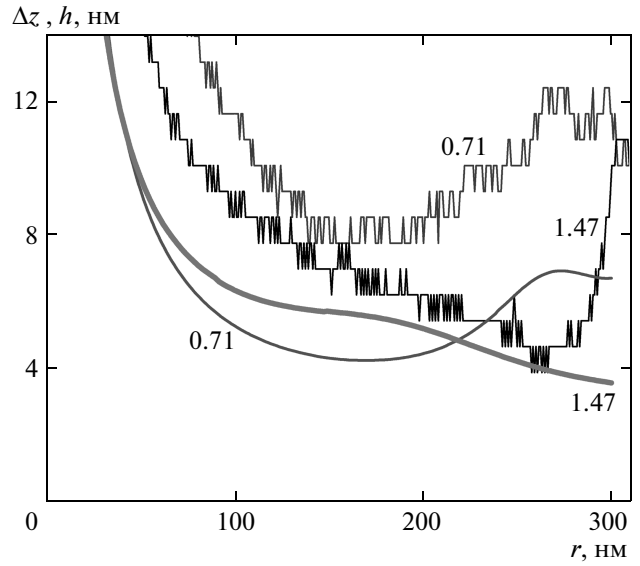


Рис. 19. Разность Δz (верхние две ступенчатые кривые) из МД-расчетов и толщины пленок h согласно (21). Параметры такие же, как для рис. 16. Разности Δz и толщины h даны на два момента времени: $\hat{t} = 0.70954$ ($t = 1.846$ нс) и $\hat{t} = 1.46594$ ($t = 3.81403$ нс). Цифры около кривых дают округленные значения безразмерного времени \hat{t} (14). Зависимости $\Delta z(r)$ и $h(r)$ постепенно сближаются (ср. пару Δz и h в моменты $t = 1.8$ нс и $t = 3.8$ нс). Это происходит из-за увеличения угла раскрытия конуса по мере приближения пленки к подложке (см. рис. 16 и 17)

$$h = \frac{\mu_o}{\rho} \frac{a/r(a, t)}{\partial s / \partial a}, \tag{21}$$

$$\Delta z = \frac{\mu_o}{\rho} \frac{a/r(a, t)}{\partial r / \partial a},$$

где h — толщина пленки, равная расстоянию между двумя точками, которые лежат на векторе нормали к поверхности пленки и принадлежат одна верхней, а другая нижней границам пленки, Δz — разность высот $z_{high}(r, t) - z_{low}(r, t)$, μ_o — масса на единицу площади пленки до воздействия УКЛИ, ρ — плотность золота в пленке, при температуре расплава 1.6 кК эта плотность равна 16.55 г/см³. Приведенные формулы следуют из сохранения массы $2\pi a da \mu_o = 2\pi r ds \rho h$. Толщина пленки резко возрастает в центральной зоне (см. рис. 18), где происходит постепенное превращение округлой капли (см. рис. 16) в вытянутое по оси z образование в виде струи и контрструи.

Процесс изменения толщины пленки со временем

проиллюстрирован на рис. 19. Как видим, толщина растёт к оси купола $r = 0$. Купол принимает конусообразный вид (см. рис. 16 и 17). Высота конуса (без учета струи) снижается на временах 2–4 нс с 0.4 до 0.15 мкм. С течением времени вещество пленки перетекает в центральную зону — струя в этой зоне действует как сток массы для остальной части пленки. Перетекание обусловлено знаком торможения — вниз к подложке и к оси z . Как говорилось выше, на стадии движения купола назад к подложке, сток массы действует в сторону уменьшения толщины пленки, а сокращение площади купола — в обратную сторону¹⁰⁾. На отрезке эволюции, показанном на рис. 19, масса центрального образования увеличивается с 5 до 40% (см. выше). Площадь конуса при этом снижается примерно с 0.5 мкм² до 0.3 мкм².

Видимо, уменьшение площади купола несколько компенсирует сток вещества в приосевую зону. Поэтому за 2 нс, с $t = 1.846$ нс до $t = 3.81$ нс, толщина пленки изменилась мало. Зато по сравнению с начальным значением $h \approx 10$ нм толщина уменьшилась примерно вдвое. К моменту времени $t = 3.81$ нс минимум толщины сместился к подножию конуса (см. рис. 19). Возможно, это означает, что если пленка не кристаллизуется, то кольцо отрыва будет находиться ближе к подложке (ср. с [33]). Жидкий купол, отрываясь от мишени, в полете постепенно превращается из образования, имеющего сложную форму, в шаровидную каплю [72]. Это происходит по мере диссипации капиллярных осцилляций. В момент $t = 3.81$ нс, показанный на рис. 19, минимальная толщина пленки примерно равна 4 нм. Для разрыва жидкой пленки необходимо, чтобы ее толщина уменьшилась до величины примерно 1 нм (3–4 межатомных расстояния). Заключение о разрыве пленки при ее истончении до 3–4 межатомных расстояний следует из расчетов нановспучивания в плоской геометрии [72] и расчетов вспенивания и разрушения пены расплавленных металлов [5, 55]. Капиллярные эффекты, процессы нуклеации и развития пены при широком пятне нагрева (R_L — десятки микрометров) [5, 55, 76–78] и при рассматриваемой здесь острой фокусировке ($R_L \sim 1$ мкм) имеют много общего. Вспенивание расплава и заморозка пены предлагаются в работах [5, 55, 76–78] в качестве механизма формирования хаотических структур, наблюдаемых в экспериментах [79–81].

¹⁰⁾ Это так, пока не началось замерзание пленки купола. Вопрос тепловода и рекристаллизации требует отдельного обсуждения.

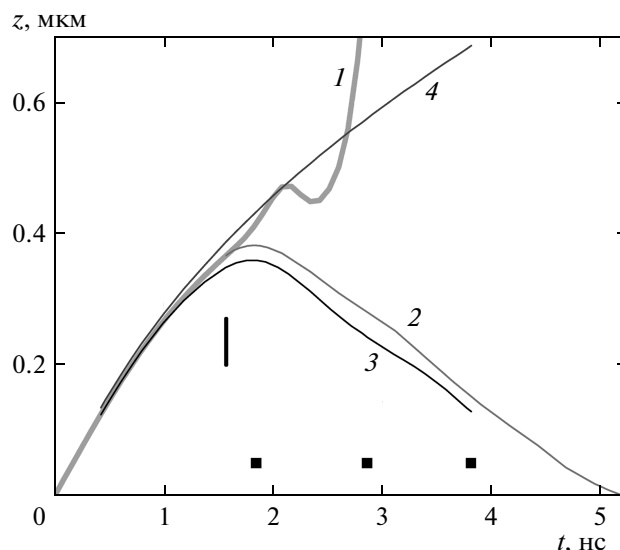


Рис. 20. Эволюция центральной зоны, заключающаяся в формировании и развитии мощного приосевого образования. При зарождении это образование имеет вид капельки в вершине (см. рис. 16). Далее капелька трансформируется в струю и контрструю. С течением времени струя высоко поднимается над поверхностью купола. В момент $t = 3.8$ нс скорость струи $\partial z_{high}/\partial t = 120$ м/с. Напомним, $v_o = 300$ м/с (см. параметры в описании рис. 16). Кривые 1 — $z(a = 0, t)$; 2 — $z_{drop}(t)$; 3 — $z_{low}(t)$; 4 — $z_{high}(t)$. Квадраты соответствуют моментам времени, относящимся к рис. 16–19

3.3. Струя и контрструя

На рис. 20 представлена кинематика подъема вверх и опускания вниз к подложке центральной зоны купола. Этот рисунок иллюстрирует рост струи и зарождение контрструи. Кривая $z(0, t)$ показывает, как в модели (15) удаляется от подложки материальная частица, которая до воздействия УКЛИ находилась в центре пятна нагрева. Вскоре после образования самопересечения кривой, отображающей бесконечно тонкую пленку на плоскости rz , траектория $z(0, t)$ теряет физический смысл, поскольку в этой зоне нельзя пренебрегать толщиной пленки. Кривая $z_{drop}(t)$ на рис. 20 соответствует траектории точки самопересечения $a_{drop}(t)$, $r[a_{drop}(t), t] = 0$, $z_{drop}(t) = z[a_{drop}(t), t]$. В этой точке вспученная в виде купола тонкая пленка пересекает ось z . Из рис. 16 ясна разница между точками $z(0, t)$ и $z_{drop}(t)$ — они соответствуют верхней и нижней точкам петельки. Мгновенное положение дуги пленки задается решением $r(a, t), z(a, t)$ системы (15). Здесь параметр a

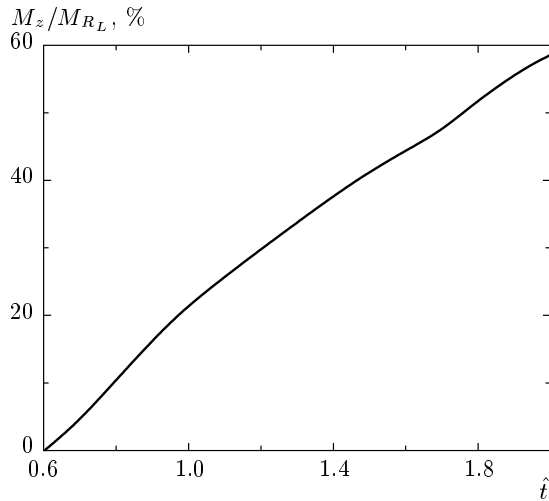


Рис. 21. Рост доли массы в процентах. Речь идет о массе $M_z(t)$, которая в модели (15) к моменту времени t прошла через точку самопересечения в приосевую зону. Величина M_z отнесена к массе пленки M_{R_L} в круге радиуса R_L . На достаточно поздних временах M_z — это, в основном, масса струи, возвышающейся над куполом. В модели (15) зарождение приосевого образования происходит в момент начала самопересечения. Этот момент отмечен вертикальным отрезком на рис. 20. До начала пересечения масса $M_z(t)$ равна нулю. Параметры такие же, как для рис. 16

пробегают дугу. Точка пересечения дуги $r(a, t), z(a, t)$ с осью z показана на рис. 16 и 17. На рис. 20 начало кривой $z_{drop}(t)$ отмечено вертикальным отрезком. Это начало мы называем моментом зарождения капли в вершине купола. Координаты точки зарождения есть $t_{drop} = 1.571$ нс и $z_{drop} = 0.3663$ мкм.

Сравним результаты МД-моделирования с решением системы (15). При МД-расчете зарождение капли происходит постепенно. Этому соответствует увеличение расстояния по оси z между кривыми 3 и 4 на рис. 20. Стадия зарождения и дальнейшая эволюция при МД-расчете согласуются с решением системы (15) — кривые 1 и 2 на рис. 20. Как говорилось, если нет разрыва пленки, то капиллярные силы всегда остановят рост купола. При выбранных параметрах задачи максимальное удаление купола 0.37 мкм достигается в момент 1.8 нс в точке поворота движения назад к подложке. Три квадратики на рис. 20 отмечены моменты времени, относящиеся к рис. 16–19.

На рис. 21 показано, как растет количество золота в центральной зоне. Конечной точкой графика является момент $t \approx 5.2$ нс, в который точка само-

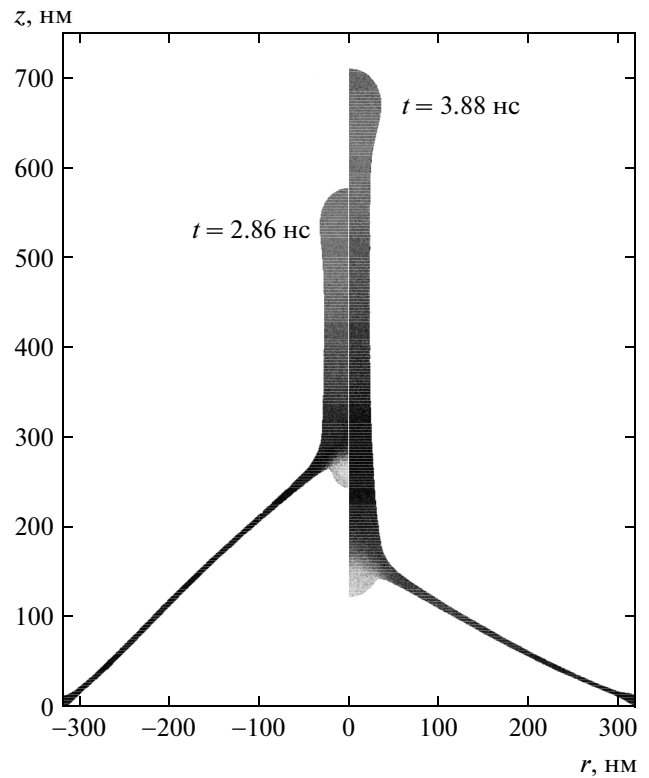


Рис. 22. Морфология и эволюция приосевого образования в осесимметричном случае на поздних стадиях МД-моделирования. Показаны распределения вертикальной скорости в тонком сечении, проходящем через ось вращения струи ($r = 0$). Правая половина относится к моменту $t = 3.88$ нс, левая — $t = 2.86$ нс. Верхняя точка струи справа (слева) движется вверх со скоростью +131 м/с (+139 м/с), а нижняя точка движется вниз со скоростью -164 м/с (-134 м/с)

пересечения на рис. 20 приходит на подложку. По горизонтальной оси на рис. 21 отложено безразмерное время \hat{t} . Размерное время равно $t = 2.60177\hat{t}$ нс. Вещество, перешедшее из пленки в центральную зону, в основном расходуется на формирование мощной струи (рис. 22). Диаметр цилиндрической струи меняется медленно по сравнению с длиной струи. Он составляет примерно 50 нм, т. е. около 10% от диаметра круга, в котором пленка оторвалась от подложки.

На приведенном выше рис. 17 линия 3 внешней границы купола в центральной зоне убрана. Это сделано для того, чтобы рис. 17 был ясным. Дело в том, что рис. 17 посвящен анализу конусовидного купола. Приосевое образование по всей его высоте показано на рис. 20 и 22. Рассмотрим приосевую

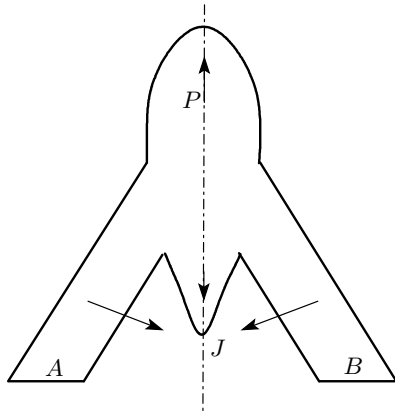


Рис. 23. Столкновение пластин A и B (плоская геометрия) или схождение стенок конуса A, B к оси конуса (осесимметричный случай). Из-за столкновения возникают кумулятивная струя J и пест P . Стрелки показывают направления скоростей пластин в лабораторной системе координат

структуру. В верхней части струи на рис. 22 располагается капля. Рост суммарной длины образования $z_{high}(x=0, t) - z_{low}(x=0, t)$ приведен на рис. 20. На начальной стадии ($t \approx 1.6$ нс) стекания вещества на ось z приосевое образование имеет вид капли в вершине купола (см. рис. 16, 20). На последующей стадии длина струи растет гораздо быстрее, чем длина контрструи. Контрструя представляет собой бугорок на внутренней поверхности купола на рис. 17, 22.

В технике хорошо известны кумулятивные явления [82, 83]. Косое столкновение плоских пластин или схождение конуса к оси в несжимаемой жидкости приводит к появлению кумулятивной струи (рис. 23). Схожим образом обстоит дело и в нашей задаче. Вершина контрструи имеет значительную скорость $v_{aj} = 120$ м/с, которая направлена вниз. Скорость v_{cup} вещества в пленке купола недалеко от оси z направлена в основном горизонтально в сторону оси; вертикальная составляющая скорости этих частиц вещества мала. Из-за того что пленка расположена под углом к оси z , а скорость v_{cup} пленки направлена к оси, точка пересечения образующих конусообразного купола движется вниз. Оказывается, что скорость перемещения точки пересечения образующих примерно равна скорости вершины контрструи. Поэтому, несмотря на значительную скорость v_{aj} вершины контрструи, контрструя развивается медленно (ср. с рис. 7 в работе [28]). Возможно, более длинная контрструя образуется, если начнется замерзание купола и снизится скорость v_{cup} . Тем

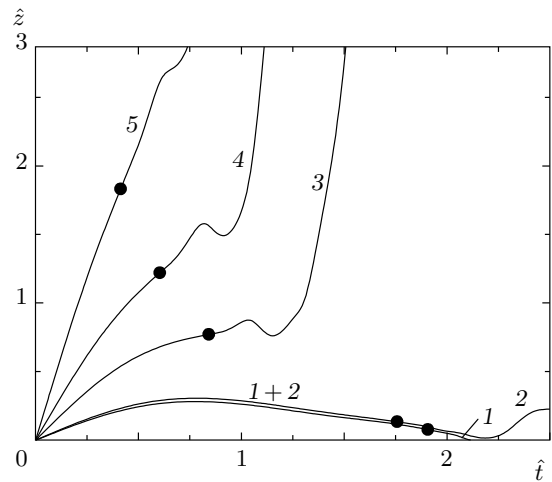


Рис. 24. Модификация решений при вариации отношения кинетической и капиллярной энергий, см. уравнения (12), (13). Показаны зависимости $z(0, t; \hat{V}_0)$ от времени при значениях $\hat{V}_0 = 0.6$ (кривая 1), 0.65 (2), 1.5 (3), 2.6 (4), 5 (5). Чем больше параметр \hat{V}_0 , тем больше кинетическая энергия и тем быстрее движется пленка. В таблице приводятся значения \hat{V}_0 , относящиеся к соответствующим кривым. Случай $\hat{V}_0 = 2.60177$ подробно разобран выше (см. рис. 20 и 16–22). Маркеры указывают точку образования капли $\hat{t}_{drop}, \hat{z}_{drop}$ в вершине

не менее, из рис. 17 и 22 следует, что указание на существование контрструи несомненно имеется.

3.4. Классификация решений

Классификатором решений является безразмерная начальная скорость \hat{V}_0 (13). Имеются три типа решений, соответствующие малым, средним и большим значениям: $\hat{V}_0 \ll 1$, $\hat{V}_0 \sim 1$ и $\hat{V}_0 \gg 1$. Рассмотрим их по порядку. При малых значениях скорости (13), оторвавшаяся от подложки пленка поднимается на небольшую высоту $z \ll R_L$, $\hat{z} \ll 1$, затем происходит поворот назад, и в момент t_{bck} пленка возвращается на подложку (см. рис. 24) с отходом и возвращением осевой точки купола $z(a=0, t)$ на плоскость $z=0$ при $\hat{V}_0 = 0.6$. При малых амплитудах \hat{V}_0 пленка, натянутая на окружность радиуса R_L , могла бы совершать капиллярные осцилляции, если бы не было подложки. Время t_{bck} удара пленки о подложку примерно равно половине периода колебания на низшей моде. На рис. 24 показаны зависимости $z(0, t; \hat{V}_0)$ при разных значениях скорости \hat{V}_0 (13). Даже при малых значениях $\hat{V}_0 \ll 1$ график $z(t)$ отличается от синусоиды, поскольку пропорци-

ональная квадрату косинуса функция (18), задающая начальное распределение скорости $\hat{z}(a, t = -0)$, не является собственной модой задачи о колебаниях пленки на круговом контуре. Максимальный подъем пленки над подложкой достигается в момент $t_{max} \approx t_{bck}/2$, примерно равный четверти периода. В безразмерных координатах $t/(R_L/v_\sigma)$ имеем $\hat{t}_{max} \approx 1$.

Ограничение $\hat{z} \ll 1$ относится к линейной по амплитуде возмущения теории. Представим линейный анализ. Это позволит точно вычислить указанные выше времена достижения максимума, \hat{t}_{max} , и удара пленки о подложку, t_{bck} , в пределе малых амплитуд $\hat{V}_o \ll 1$. Будет видно, что данные времена выходят на постоянные значения в пределе $\hat{V}_o \rightarrow 0$. Кроме того, польза от линейного решения следующая. Пленка начинает свое движение с плоскости $z = 0$, когда выполняется условие $z \ll 1$. Поэтому линейное решение описывает начальный участок эволюции при произвольных значениях \hat{V}_o (13). Длительность этого участка ограничена величиной, составляющей малую долю от времени $1/\hat{V}_o$; в размерных переменных это время равно R_L/v_σ .

Вычислим период малых капиллярных колебаний пленки, натянутой на окружность радиуса R_L . Линеаризуем систему (15) возле невозмущенного состояния: $\hat{r} = \hat{a} + \delta r$, $|\delta r| \ll 1$, $|\hat{z}| \ll 1$. Имеем

$$k \equiv \frac{ds}{da} = 1, \quad \hat{R} = \frac{1}{\partial^2 \hat{z} / \partial \hat{a}^2}, \quad C = \frac{1}{2} \left(\hat{z}'' + \frac{\hat{z}'}{\hat{a}} \right),$$

где $\hat{z}' = \partial \hat{z} / \partial \hat{a}$. Безразмерные переменные были введены выше (14). Подставляя эти формулы в систему (15), находим, что поправка δr является поправкой второго порядка малости, т. е. в линейном приближении равна нулю. Видим, что в первом приближении материальные частицы пленки совершают колебания, двигаясь строго по нормали (в линейной аппроксимации). Уравнение для $\partial^2 r / \partial t^2$ выпадает из системы (15); функцию $r(a, t)$ и лагранжеву координату a можно заменить на горизонтальную координату — цилиндрический радиус r . Линеаризованное уравнение для $\partial^2 z / \partial t^2$ имеет вид

$$\hat{z}'' + \frac{\hat{z}'}{\hat{r}} - 2 \frac{\partial^2 \hat{z}}{\partial \hat{t}^2} = 0, \quad \hat{z}' = \frac{\partial \hat{z}}{\partial \hat{r}}. \quad (22)$$

Ищем решение в виде $\hat{z}(\hat{r}, \hat{t}) = \exp(-i\hat{\omega}\hat{t}) Z(\hat{r})$. Подставляя в уравнение (22), получаем, что функция Z подчиняется уравнению Бесселя нулевого порядка:

$$\hat{r} Z'' + Z' + 2\hat{\omega}^2 \hat{r} Z = 0. \quad (23)$$

Интересующее нас решение уравнения (23) имеет вид $Z \propto J_0(\sqrt{2}\hat{\omega}\hat{r})$. Второе независимое реше-

ние отбрасываем, поскольку оно имеет логарифмическую сингулярность на оси $r = 0$. Из граничного условия (20) при $\hat{r} = 1$ ($\hat{r} = r/R_L$ (14)) определяем спектр собственных мод:

$$\hat{\omega}_i = \frac{b_i}{\sqrt{2}}, \quad \hat{T}_i = \frac{2\pi}{\hat{\omega}_i}, \quad T_i = \frac{2\sqrt{2}\pi R_L}{b_i v_\sigma}, \quad (24)$$

где b_i — корни уравнения $J_0(b_i) = 0$. Первые три значения равны $b_1 = 2.4048255$, $b_2 = 5.5200781$, $b_3 = 8.6537279$. Период основной моды $\hat{T}_1 = 3.69497$.

Разложим безразмерную начальную скорость (18) в ряд по функциям Бесселя:

$$\hat{V}_o \cos^2\left(\frac{\pi \hat{r}}{2}\right) = \hat{V}_o \sum_{i=1}^{\infty} a_i J_0(b_i \hat{r}), \quad (25)$$

где коэффициенты разложения равны

$$a_i = \frac{\int \cos^2\left(\frac{\pi \hat{r}}{2}\right) J_0(b_i \hat{r}) r dr}{\int J_0^2(b_i \hat{r}) r dr}.$$

Для нескольких первых значений коэффициентов (25) имеем $a_1 = 0.7793$, $a_2 = 0.26771$, $a_3 = -0.06562$. Решение задачи о полете вершины купола пленки дается сходящимся рядом:

$$\hat{z}(\hat{r}, \hat{t}) = \hat{V}_o \sum_{i=1}^{\infty} \frac{a_i}{\hat{\omega}_i} \sin(\hat{\omega}_i \hat{t}) J_0(b_i \hat{r}).$$

Используя этот ряд, найдем времена t_{bck} , t_{max} и максимальное удаление пленки от подложки, $\hat{z}(\hat{r} = 0, \hat{t}_{max})$, в пределе $\hat{V}_o \rightarrow 0$. Значения t_{max} и t_{bck} определяют точку наивысшего подъема пленки и момент удара пленки о подложку (см. рис. 24, кривая $z(0, t; \hat{V}_o = 0.6)$). Указанные времена являются корнями уравнений

$$\hat{z}(\hat{r} = 0, \hat{t}_{bck}) = 0, \quad \hat{t}_{bck} = 1.94128,$$

$$\frac{\partial \hat{z}(\hat{r} = 0, \hat{t}_{max})}{\partial \hat{t}} = 0, \quad \hat{t}_{max} = 0.736047. \quad (26)$$

$$\hat{z}(\hat{r} = 0, \hat{t}_{max} = 0.736047) = 0.463843 \hat{V}_o.$$

Начальная скорость $\partial \hat{z}(\hat{a}, \hat{t} = 0) / \partial \hat{t} = \hat{V}_o \cos^2(\pi \hat{a} / 2)$ (18) представляет собой смесь мод. Из-за этого время $\hat{t}_{max} = 0.736$ не равно половине времени возвращения на подложку $\hat{t}_{bck}/2 = 0.97$, а время возвращения $\hat{t}_{bck} = 1.94$ не равно половине периода низшей моды $\hat{T}_1/2 = 1.85$.

Сравнение линейного решения с решением полной системы (15) показано на рис. 25. Заметный на

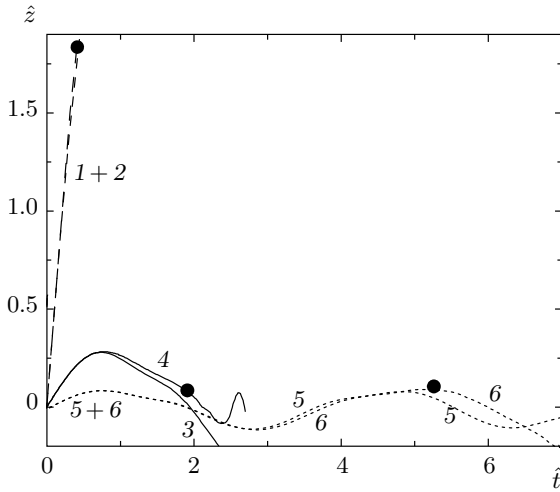


Рис. 25. Сопоставление линейного (кривые 1, 3, 5) и нелинейного (кривые 2, 4, 6) решений системы (15) при $\hat{V}_o = 5$ (1,2), 0.6 (3,4), 0.2 (5,6). Образование капли в вершине означает, что нелинейные поправки стали существенными. Как и на рис. 24, черные кружки (t_{drop}, z_{drop}) относятся к моменту появления капли и к позиции, в которой она находится

глаз отход нелинейного решения от линейного начинается после образования капли. Капля образуется в точках (t_{drop}, z_{drop}) , отмеченных маркерами на рис. 25. При $t > t_{drop}$, как видно из рис. 21, начинает расти из нуля масса приосевого образования. Кроме того, в решении системы (15) появляются две точки на оси z вместо одной (см. рис. 16 (петелька в вершине) и 20). А именно, кроме точки $z(a = 0, t)$ появляется точка самопересечения $z_{drop}(t)$. В какую мощную приосевую структуру постепенно преобразуется первоначально маленькая капля показано на рис. 22.

При малых значениях \hat{V}_o амплитуда $|z| \sim \hat{V}_o$; при этом капля формируется поздно. Дело в том, что на слабоискривленной поверхности время образования капли велико. Время t_{drop} быстро растет по мере уменьшения значения \hat{V}_o (см. рис. 24–26). Увеличение скорости \hat{V}_o (13) в нелинейной системе приводит к небольшому уменьшению величины \hat{t}_{max} . При $\hat{V}_o < 1.4$ время образования капли $\hat{t}_{drop}(\hat{V}_o)$ больше, чем \hat{t}_{max} . Это означает, что капля формируется на нисходящей ветви временной зависимости $z(0, t; \hat{V}_o)$. При $\hat{V}_o < 0.555$ имеем $\hat{t}_{drop}(\hat{V}_o) > \hat{t}_{bck}(\hat{V}_o)$, т. е. при достаточно малых амплитудах капля не успевает образоваться на всем отрезке времени $(0, t_{bck})$ существования пленки в полете от момента ее отделения

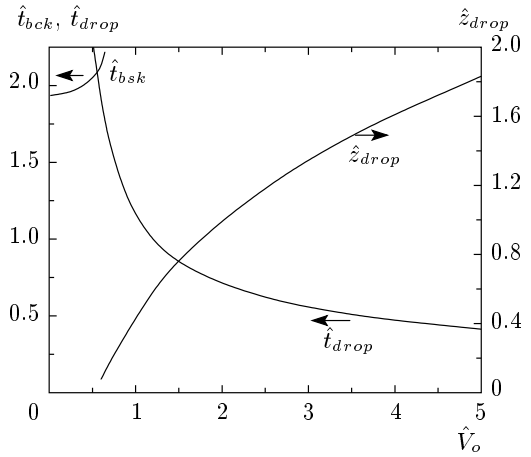


Рис. 26. Классификация решений в зависимости от параметра \hat{V}_o (13). При $\hat{V}_o > 0.6435$ пленка перестает возвращаться на подложку. Точка $\hat{V}_o = 0.6435$, $\hat{t}_{bck} = 2.22$ является точкой окончания кривой $\hat{t}_{bck}(\hat{V}_o)$. Кривые $z(0, t; \hat{V}_o)$ на рис. 24 при $\hat{V}_o = 0.6$ и $\hat{V}_o = 0.65$ окаймляют критическое значение $\hat{V}_o = 0.6435$. Функции $\hat{t}_{drop}(\hat{V}_o)$ и $\hat{z}_{drop}(\hat{V}_o)$ дают координаты точки зарождения капли в вершине купола. Эти функции параметрически задают кривую, отдельные точки которой показаны маркерами на рис. 24 и 25

от подложки до момента ее возвращения на подложку. Соответственно, на временной зависимости $z(0, t; \hat{V}_o)$ при $\hat{V}_o < 0.555$ нет точки образования капли. При $\hat{V}_o > 0.555$ точка зарождения капли на зависимости $z(0, t; \hat{V}_o)$ имеется (см. рис. 24 и 25). В точке $\hat{V}_o = 0.555$, $\hat{t} = 2.09$ зависимости $\hat{t}_{bck}(\hat{V}_o)$ и $\hat{t}_{drop}(\hat{V}_o)$ пересекаются (рис. 26).

При $\hat{V}_o > 0.555$ капля успевает зародиться во время полета купола. После формирования капли, $t > t_{drop}$, зависимость $z(0, t; \hat{V}_o)$ становится достаточно условной. Действительно (см. рис. 20), на оси z появляются три точки: (снизу вверх) апекс контрструи (кривая 3); примыкание купола к центральной зоне (кривая 2); вершина струи (кривая 4), см. также рис. 22. Функции $\hat{t}_{drop}(\hat{V}_o)$ и $\hat{z}_{drop}(\hat{V}_o)$ дают координаты точки зарождения капли в вершине купола, выделенные маркерами на рис. 24 и 25. Как видно из рис. 24, при увеличении параметра \hat{V}_o растет расстояние $\hat{z}_{drop}(\hat{V}_o)$, на котором образуется капля. При этом время образования $\hat{t}_{drop}(\hat{V}_o)$ становится меньше. Оба эти обстоятельства вызваны увеличением скорости \hat{V}_o .

Как ясно из сказанного, асимптотика $\hat{V}_o \ll 1$ проста. Рассмотрим противоположный предел $\hat{V}_o \gg$

$\gg 1$ (см. рис. 24–26). Поверхностное натяжение остановит купол при сколь угодно большой кинетической энергии. Но z -координата точки остановки будет велика. При наличии остановки обязательно произойдет формирование капли. Разумеется, сказанное справедливо при бесконечной растяжимости пленки. На самом деле в условиях УКЛИ и тонких пленок ($d_f = 10\text{--}100$ нм) пленка разрывается при растяжении до толщины порядка 1 нм. Из исследования зависимости мгновенной толщины пленки от радиуса (см. рис. 19) следует, что разрыв происходит примерно по окружности недалеко от основания купола (без учета кристаллизации). При этом в пленке, покрывающей подложку, остается круглая дырка.

Если задать начальное распределение (18) и принять, что поверхностное натяжение $\sigma = 0$, $v_\sigma = 0$, $\hat{V}_o = \infty$, то правая часть системы (15) обращается в нуль, т. е. вещество летит по инерции с постоянной скоростью в направлении по нормали к поверхности подложки:

$$\hat{r}(\hat{a}, \hat{t}) = \hat{a}, \quad \hat{z}(\hat{a}, \hat{t}) = \hat{V}_o \hat{t} \cos^2(\pi \hat{a}/2). \quad (27)$$

При больших радиусах R_L пятна нагрева именно этим только и ограничиваются; но при изучении вспенивания капиллярность учитывают [55, 76–78]. Движение (27) растягивает пленку. Вычислим степень растяжения по формуле (21):

$$\frac{h}{h_o} = \frac{a/r}{s'_a} = \frac{1}{s'_a} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left[\frac{\pi}{2} \hat{V}_o \hat{t} \sin(\pi \hat{a})\right]^2}}.$$

Внутри произведения $\hat{V}_o \hat{t}$ капиллярная скорость v_σ сокращается. Как видим, максимум растяжения находится в точке перегиба начального профиля скорости, т. е. посередине отрезка $(0, R_L)$. На концах этого отрезка растяжения нет: $h = h_o$, а в середине отрезка толщина пленки убывает по закону

$$\frac{h}{h_o} = \frac{1}{1 + \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{v_o t}{R_L}\right)^2}$$

с асимптотикой

$$\frac{2}{\pi} \frac{R_L}{v_o t} = \frac{2}{\pi} \frac{R_L}{z(a=0, t)}$$

на больших временах.

3.5. Блистеринг в плоской геометрии

В качественном отношении осесимметричный случай $2D_a$ (15), (16) аналогичен плоскому случаю

$2D_p$ (17). Поэтому будем действовать по схеме, примененной выше: линейное решение, классификация по параметру \hat{V}_o и сопоставление линейных, нелинейных и МД-решений. Линеаризация $2D_p$ -системы (17) приводит к волновому уравнению

$$z_{tt} - v_\sigma^2 z''/2 = 0, \quad (28)$$

или

$$\hat{z}_{tt} - \hat{z}''/2 = 0.$$

Кроме того, в линейном приближении можно пренебречь смещениями лагранжевых частиц в горизонтальном направлении x ; в $2D_p$ -геометрии координата x используется вместо радиуса r . Соответственно, $x(a, t) = a$, $a \rightarrow x$. После подстановки $\hat{z}(\hat{x}, \hat{t}) = \exp(-i\hat{\omega}\hat{t})Z(\hat{x})$ получаем

$$Z'' + 2\hat{\omega}^2 Z = 0.$$

Это уравнение заменяет уравнение (23) для цилиндрических волн.

Нас интересуют стоячие капиллярные волны. В общем случае такая волна складывается из суперпозиции собственных мод:

$$\hat{z}(\hat{x}, \hat{t}) = \hat{V}_o \sum_{m=1}^{\infty} \frac{a_m}{\hat{\omega}_m} \sin(\hat{\omega}_m \hat{t}) \cos \frac{\pi(2m-1)\hat{x}}{2} \quad (29)$$

с дискретным спектром

$$\hat{\omega}_m = \frac{\pi(2m-1)}{2\sqrt{2}},$$

$$\hat{T}_m = \frac{2\pi}{\hat{\omega}_m} = \frac{4\sqrt{2}}{2m-1}, \quad m = 1, 2, \dots$$

Период первой моды равен $\hat{T}_1 = 4\sqrt{2} = 5.657$. Как видим, из-за уменьшения суммарной кривизны пленки (в $2D_p$ -случае нет кривизны $1/R_t$, см. уравнения (16), (17)) этот период существенно больше периода первой моды цилиндрической стоячей волны $\hat{T}_1^{2D_a} = 3.695$ (24).

Коэффициенты a_m ряда Фурье (29) определяются профилем начальной скорости (18):

$$a_m = \frac{\int_{-1}^1 \cos^2(\pi \hat{x}/2) \cos[\pi(2m-1)\hat{x}/2] d\hat{x}}{\int_{-1}^1 \cos^2[\pi(2m-1)\hat{x}/2] d\hat{x}} = -\frac{(8/\pi) \cos(\pi m)}{(-3-4m+4m^2)(1-2m)}. \quad (30)$$

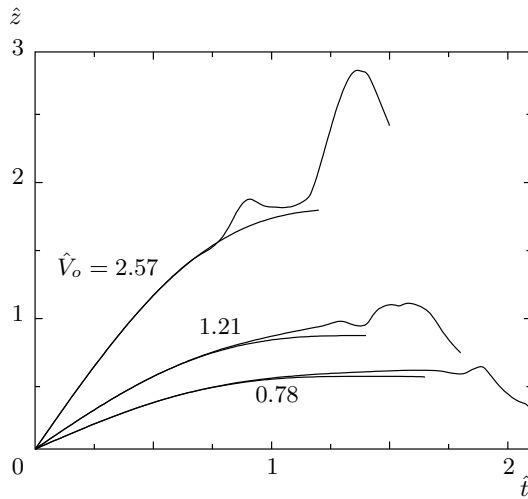


Рис. 27. Подъем вершины купола в $2D_p$ -геометрии. Показаны траектории вершины $z(a=0, t)$ согласно решению полной нелинейной системы (17) — верхние кривые — в сравнении с линейным решением (29) — нижние кривые. В каждой паре полное решение идет выше и устроено сложнее

Разложение Фурье (29) с коэффициентами (30) полностью определяет линейное решение. Отметим, что двучлен $\cos^2(\pi \hat{x}/2) = 1/2 + (1/2) \cos(\pi \hat{x})$ не есть отрезок ряда (29). Действительно, ни константа, ни $\cos(\pi \hat{x})$ по отдельности не удовлетворяют граничным условиям (20) и поэтому не являются собственными модами задачи.

Линейное решение (29), (30) позволяет определить координаты t_{max}, z_{max} точки остановки купола в его движении вверх и момент t_{bck} удара пленки о подложку, см. (26). Эти значения относятся к пределу малых параметров \hat{V}_0 (13). В $2D_p$ -геометрии получаем

$$\hat{t}_{bck} = 2.82843 (1.94128), \quad \hat{t}_{max} = 1.41421 (0.736047),$$

$$\begin{aligned} \hat{z}_{max} = \hat{z}(\hat{x} = 0, \hat{t}_{max} = 1.41421) = \\ = 0.707155 \hat{V}_0 (0.463843 \hat{V}_0). \end{aligned}$$

Здесь для сравнения в круглых скобках приведены значения (26), соответствующие $2D_a$ -случаю. Как видим, уменьшение кривизны в $2D_p$ -геометрии сказывается в увеличении времен t_{max} и t_{bck} и в увеличении дистанции остановки z_{max} .

Классификация решений в зависимости от безразмерной скорости \hat{V}_0 (13) показана на рис. 27, который представляет собой обобщение рис. 24 и 25 на случай $2D_p$ -геометрии. Приведенные кривые

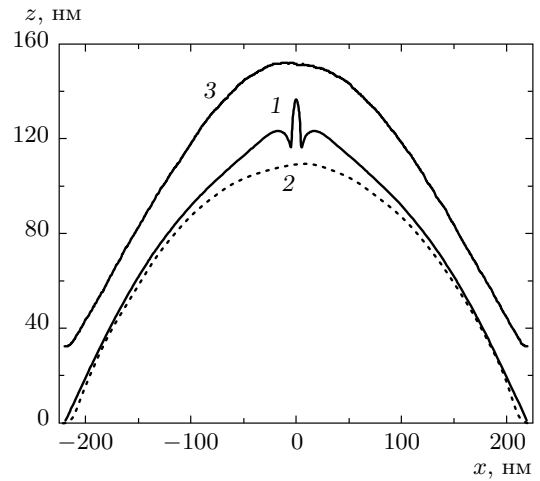


Рис. 28. Сопоставление МД-расчета (кривые 2, 3) и модели (17) — кривая 1, см. подпись к рис. 16. Параметры МД-расчета: толстая пленка с начальной толщиной $h = 32$ нм; $\hat{V}_0 = 0.776379$. Приведено безразмерное время $\hat{t} = 1.89$ ($t = 6.47$ нс), чтобы можно было сопоставить этот рисунок с рис. 27

соответствуют трем МД-расчетам в $2D_p$ -геометрии при следующих значениях параметра \hat{V}_0 : 0.776379, 1.21293 и 2.56695 (их округленные значения приведены на рис. 27). Чем больше скорость, тем больше расстояние, на которое вершина купола приподнимается над плоскостью подложки $z = 0$. Более гладкие кривые относятся к линейному решению (29), (30); они идут ниже. Нелинейные эффекты становятся важными, когда нелинейное решение начинает существенно отклоняться от линейного.

На рис. 28–30 показано сравнение результатов МД-моделирования и численного расчета системы (17). Это достаточно поздние моменты времени, когда сгущивание вещества пленки в центральную зону становится существенным. Поэтому в приосевой области описание (17) в приближении бесконечно тонкой пленки теряет свою применимость. Тем не менее вне этой области решение системы (17) хорошо согласуется с МД-расчетом. Неплохое соответствие сохраняется долго даже в случае толстой пленки (рис. 28). В МД-расчете на рис. 28 после термализации термостатом и перед самым началом движения масса на единицу площади пленки $\mu_o = 5.27 \cdot 10^{-5}$ г/см². Соответствующая толщина $h_o = 32$ нм, $R_L/h_o = 6.9$.

Были выбраны разные параметры для МД-расчетов, чтобы оценить влияние физических условий на блистеринг. В расчете (см. рис. 28) безразмерная скорость равна $\hat{V}_0 = 0.776379$. Остальные парамет-

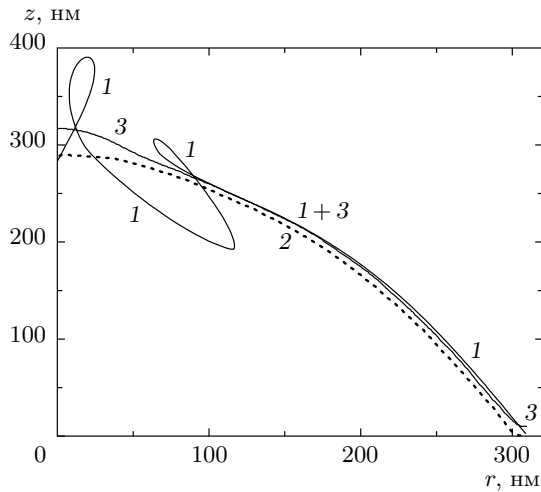


Рис. 29. Сопоставление результатов МД-моделирования (кривые 2, 3) и расчета системы (17) — кривая 1 — в случае в три раза более тонкой пленки, чем в случае рис. 28, в три раза большей скорости и в 1.5 раза увеличенного размера R_L (см. также подпись к рис. 16). $\hat{V}_o = 1.21293$; $\hat{t} = 1.75$ ($t = 4.39$ нс)

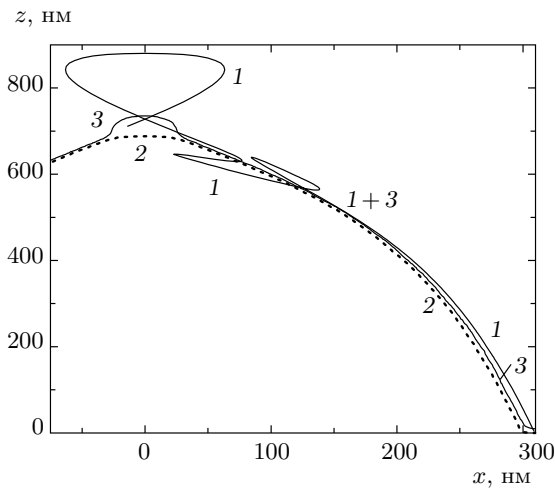


Рис. 30. Сопоставление результатов МД-расчетов и модели (17) в случае высокой начальной скорости: $v_o = 300$ м/с в два раза больше, чем в случае рис. 29 (обозначения кривых как на рис. 16, 28, 29). $\hat{V}_o = 2.56695$; $\hat{t} = 1.4$ ($t = 3.71$ нс)

ры: начальная скорость $v_o = 50$ м/с; число атомов $N_{at} = 2976320 \approx 3 \cdot 10^6$; $R_L = 220$ нм; толщина расчетного домена по координате, перпендикулярной плоскости рис. 28, $l_{\perp} = 4.2$ нм; $v_{\sigma} = 64.4$ м/с; во всех расчетах золото нагревалось до 1600 К, коэффици-

ент поверхностного натяжения при этой температуре 546 дин/см, а равновесная плотность 16.55 г/см³ (см. Приложение).

Параметры МД-расчета, показанного на рис. 29, следующие: $\hat{V}_o = 1.21293$; $v_o = 150$ м/с; $R_L = 310$ нм; $N_{at} = 1093752 \approx 1.1 \cdot 10^6$; $l_{\perp} = 4.04$ нм; $\mu_o = 1.43 \cdot 10^{-5}$ г/см²; $h_o = 8.63$ нм; $v_{\sigma} = 124$ м/с.

МД-расчет на рис. 30 имел следующие параметры: $\hat{V}_o = 2.56695$; $v_o = 300$ м/с; $R_L = 310$ нм; $N_{at} = 1169640 \approx 1.2 \cdot 10^6$; $l_{\perp} = 3.865$ нм; $\mu_o = 1.60 \cdot 10^{-5}$ г/см²; $h_o = 9.7$ нм; $v_{\sigma} = 117$ м/с.

Обратим внимание на небольшую неустойчивость в МД-расчете на рис. 28. Она нарушает симметрию $x \rightarrow -x$. Это явление связано с тепловыми флуктуациями в МД-расчете (инициация, точной симметрии нет) и торможением (усиление возмущений). Неустойчивость приводит к потере симметрии при распаде жидкой пленки на капли (см. ниже). В расчетах по модели (17) при повышенных значениях безразмерной начальной скорости неустойчивость выражена сильнее (ср. рис. 28 и 29, 30). Она охватывает центральную зону купола. В $2D_a$ -геометрии накопление нелинейных эффектов проявляется прежде всего в появлении капли на оси z (см. рис. 16, 24, 25). При этом вне капли поверхность купола остается некоторое время гладкой. В $2D_p$ -геометрии «разбалтывание» приосевой зоны может начаться раньше, чем образуется центральная капля (см. рис. 28, 29). В модели (17) мы полагаем, что капля начинает формироваться после появления самопересечения пленки. Вне центральной зоны купола решения по модели (17) и результаты МД-моделирования согласуются хорошо (см. рис. 29, 30). В $2D_p$ -геометрии наибольшее растяжение пленки и, соответственно, ее наименьшая толщина находятся ближе к центральной зоне, чем в $2D_a$ -случае (см. рис. 29, 30).

3.6. Разрыв пленки

Разрыв купола из-за его растяжения и утоньшения до толщины около 1 нм показан на рис. 31 (см. также рис. 3с в работе [84]). Разрыв происходит не мгновенно при $t \approx 4.44$ нс; это процесс, видимо, связанный с развитием жизнеспособного зародыша от тепловой флуктуации на сильнорастянутой пленке. Длительность процесса порядка 10 пс (см. рис. 31). Явления, связанные с зарождением прокола пленки и его трехмерным развитием, рассматривались в работе [84]. Параметры МД-расчета в случае рис. 30 и 31 совпадают. Шаг оцифровки по горизонтали и вертикали МД-данных (размер пикселя) составлял 0.8 нм.

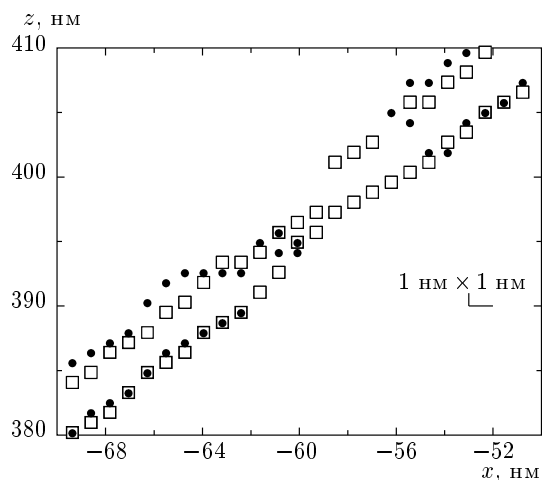


Рис. 31. Разрыв пленки вследствие ее растяжения. Параметры соответствуют рис. 30. Маркеры отслеживают границу пленки. Показаны два момента: перед самым разрывом, $t = 4.435$ нс (квадраты) и сразу после него (кружки), $t = 4.454$ нс

Дисперсионное соотношение для капиллярных волн на глубокой воде имеет вид $\omega = \sqrt{\sigma/\rho} k^{3/2}$, где ρ — плотность воды. Колебания малой амплитуды на тонкой пленке описываются волновым уравнением (28). Подстановка $z \propto \exp(-i\omega t + ikx)$ в уравнение (28) определяет линейный по волновому вектору k закон дисперсии

$$\omega = \left(v_\sigma / \sqrt{2} \right) k. \tag{31}$$

Согласно (31), фазовая и групповая скорости поверхностной волны одинаковы и равны $v_\sigma / \sqrt{2}$. Таким образом, волна, связанная с поверхностным натяжением на тонкой пленке, аналогична звуковой волне в упругой среде.

Разрыв пленки (см. пример на рис. 31) вызывает резкое изменение силовых напряжений. В силу уравнений (28) и (31) сигнал о том, что произошел разрыв, распространяется по пленке с конечной скоростью $v_\sigma / \sqrt{2}$. Динамика формирования и расширения разрыва пленки имеет некоторые общие черты с динамикой нуклеации несплошности [85] в растянутом конденсированном веществе. В случае объемной среды возмущение от разрыва локализовано в области между откольным импульсом и границей паровой полости. Этот импульс разбегается от точки разрыва со скоростью звука. Откольный импульс снимает напряжение растяжения (разгружает растянутое вещество), поскольку за ним растянутое (отрицательное давление $p < 0$) вещество сжимается в нормальное состояние, $p \rightarrow 0$. Таким образом,

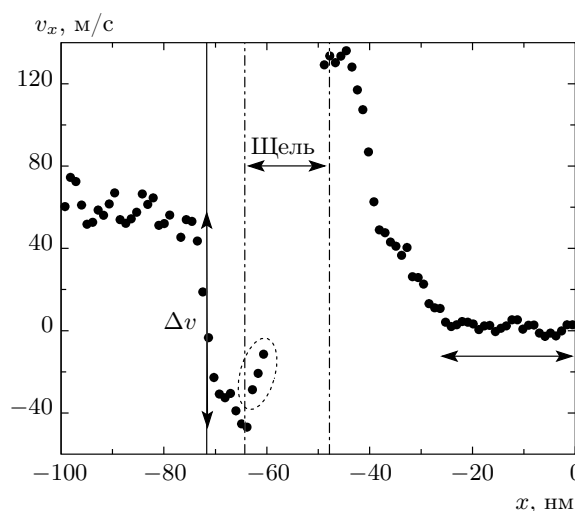


Рис. 32. Скачок скорости, напоминающий откольный импульс, в момент $t = 4.512$ нс. Фронт скачка отмечен вертикальной стрелкой Δv . Это фронт слева от разрыва «щель». Фронт, бегущий направо, находится в данный момент в точке $x = -40$ нм. Параметры расчета соответствуют высокоскоростному случаю, показанному на рис. 30. Двусторонняя горизонтальная стрелка отмечает положение центральной капли, которая формируется в вершине купола (см. рис. 30 и 33)

откольный импульс является волной сжатия, которая повышает давление от значения $p < 0$ до значения $p \approx 0$. Из-за уменьшения удельного объема при снятии растяжения (разгрузка), объем полости (несплошности), возникшей при нуклеации, растет. На начальной стадии нуклеации скорости откольного импульса и расширения полости сопоставимы. Затем расширение полости резко замедляется и переходит в сильнодозвуковой режим движения.

Обычный звук распространяется в расплаве золота, нагретом до температуры 1600 К, со скоростью примерно 2.25 км/с [36, 37, 53, 54]. Следов его распространения на пленке не видно. Дело в том, что пленка тонкая, с двух сторон она граничит с областью постоянного давления (вакуум). Поэтому обычный звук, распространяясь по пленке, затухает на расстоянии порядка толщины пленки. Посмотрим, как обстоит дело со звуком (28), (31).

На рис. 32 представлено мгновенное распределение горизонтальной компоненты скорости $v_x(x, t = 4.512$ нс) в окрестности разрыва, показанного на рис. 31, через 70 пс после разрыва. Разрыв выделен двумя вертикалями «щель» на рис. 32 и 33, которые относятся к одному моменту времени. Эл-

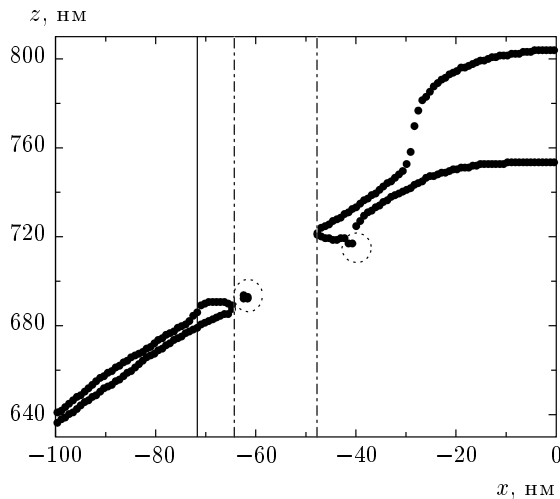


Рис. 33. Образование капель (утолщений) на берегах разрыва. Это новые капли по отношению к центральной капле. Крошечные нанокapли, взятые в кружки, не существенны. Видим, что фронт скачка скорости на рис. 32 совпадает с границей между каплями и пленкой. На рис. 32 скачок отмечен вертикальной стрелкой, а здесь — сплошной вертикальной прямой

липсом внизу отмечена крошечная самостоятельная капля, отделившаяся в процессе разрыва. Есть еще одна такая капля возле правого края разрыва (см. рис. 33). Она также выделена с помощью эллипса. Размеры этих капель меньше нанометра. От разрыва в две стороны по пленке распространяются два скачка скорости (см. рис. 32). Идущий налево скачок выделен вертикальной стрелкой на рис. 32. В той же точке находится левая вертикаль на рис. 33. Правый скачок распространяется в сторону центральной капли. В момент $t = 4.512$ нс, показанный на рис. 32 и 33, координата правого скачка равна $x = -40$ нм. Горизонтальная протяженность левой половины центральной капли отмечена двусторонней горизонтальной стрелкой на рис. 32. Внутри центральной капли горизонтальная компонента скорости v_x близка к нулю. Это связано с тем, что потоки массы, входящие в центральную каплю слева и справа, приносят в каплю горизонтальные импульсы противоположного знака.

Подсчет скорости движения вещества за скачком относительно вещества пленки перед скачком дает $\Delta v_t = 165$ м/с в момент $t = 4.512$ нс, относящийся к рис. 32 и 33. Для подсчета величины Δv_t векторы скорости слева \mathbf{v}_- и справа \mathbf{v}_+ от скачка вычитались. Проекция разности $\mathbf{v}_- - \mathbf{v}_+$ на направление

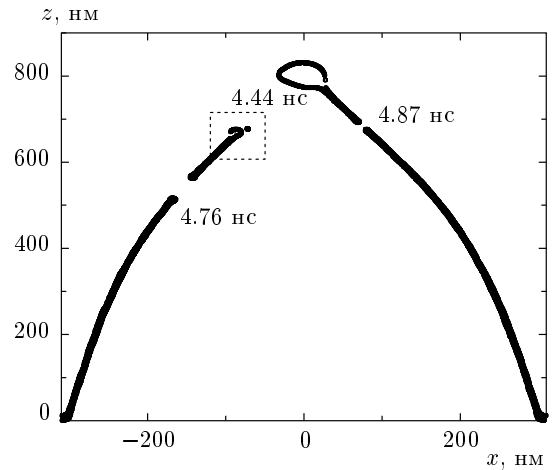


Рис. 34. Эволюция купола для начальных параметров, заданных на рис. 30 (большая начальная скорость 300 м/с); $t = 4.896$ нс. Имеется выраженная центральная капля и капли на берегах разрывов. Капля на правом берегу первого разрыва уже слилась с центральной каплей. Цифры у трех разрывов указывают моменты времени, в которые произошел данный разрыв. Капля на левом берегу первого разрыва показана крупно на рис. 35

вдоль пленки равняется Δv_t . Вычисление скорости $v_\sigma/\sqrt{2}$ (31) по формуле (12) с учетом уменьшения толщины пленки до 2.35 нм дает $v_\sigma/\sqrt{2} = 168$ м/с. Получается, что на начальной стадии после разрыва фронт скачка движется по пленке со скоростью звука (31). В этом смысле этот фронт похож на откольный импульс, который тоже распространяется со скоростью звука (слабая УВ).

На рис. 34 представлена ситуация на момент $t = 4.896$ нс, когда на поверхности купола имеются уже три разрыва. Моменты образования разрывов приведены у каждого разрыва. Дальнейшая судьба купола на рис. 34 состоит в формировании центральной капли, которая затягивает в себя кусочек пленки от третьего разрыва (4.87 нс), и образовании боковой капли слева. Обе капли улетают вверх. В боковую каплю слева трансформируется кусочек пленки между первым (4.44 нс) и вторым (4.76 нс) разрывами. Второй разрыв происходит независимо от первого. Хотя первый разрыв, наподобие откольного импульса, прекращает растяжение пленки, область утолщения пленки (в которой действует откольный импульс и прекращается растяжение) ограничена каплей. Поэтому вне капли растяжение пленки продолжается и происходит второй разрыв пленки.

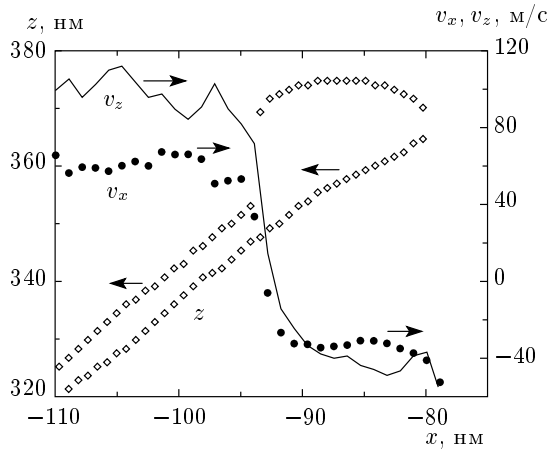


Рис. 35. Вид области внутри прямоугольника на рис. 34. Видны крупная капля и скачок скорости, связанный с границей между каплей и пленкой. Это вид капли, показанной на рис. 33 слева, в более поздний момент времени. С течением времени капля поглощает новые и новые порции пленки, ее размер растет

На рис. 35 показан вид капли с рис. 33, но в более поздний момент времени. Вместе с формой капли на рис. 35 приведены распределения скорости, как на рис. 32. Вычисление скорости капли относительно вещества пленки и сравнение этой скорости с местной текущей скоростью звука (31) показывают, что скачок скорости продолжает двигаться со скоростью звука! Это кажется удивительным. Действительно, капля большая, с момента ее образования прошло 456 пс, а она по-прежнему движется со скоростью звука, как малое возмущение системы уравнений (17), ср. с рис. 32. Получается, что скачок скорости эквивалентен откольному импульсу в объемном случае, капля эквивалентна области сжатия между фронтом откольного импульса и полостью, а трехмерная полость эквивалентна разрыву пленки. Это плохо согласуется с очевидным нелинейным характером течения при наличии крупной капли. Мы не видим преобразования пленка → пленка при переходе через скачок скорости. Вместо этого вещество пленки присоединяется к веществу капли. Последнюю считать пленкой не приходится. Кажется бы, капля должна действовать как некоторое граничное условие на пленку вне капли (см. в этой связи рис. 16, 29 и 30 с центральной каплей и примыкающей пленкой; см. также обсуждение сравнений этих рисунков с МД-моделированием).

Совпадение скорости движения капли (относительно вещества пленки перед ней) со скоростью

звука (31) можно объяснить. Запишем закон сохранения импульса

$$2\sigma t = d_f l \rho \Delta v. \quad (32)$$

В балансе импульса (32) слева стоит сила, действующая на каплю, а справа — набранный импульс. Коэффициент 2 пишется, поскольку пленка имеет две поверхности. Этот импульс накапливается за время t . За это время в каплю переходит кусок пленки длиной l . Толщина пленки обозначена d_f . При пересечении фронта скачка скорости, который одновременно является границей капли, скорость частицы вещества изменяется на величину Δv . Материальная частица в капле и фронт скачка движутся со скоростью Δv относительно вещества пленки. Подставим в (32) кинематическое условие $l = t \Delta v$. В результате получаем

$$\Delta v = v_\sigma / \sqrt{2}, \quad (33)$$

т. е. закон сохранения импульса заставляет каплю двигаться со скоростью звука (31).

Запишем закон сохранения энергии. Пусть пленка покоится. С одного из ее концов на пленку надвигается капля. Например, на рис. 35 капля движется справа налево. Скорость капли относительно пленки равна Δv (33). Приравнявая работу сил поверхностного натяжения к кинетической энергии капли и диссипировавшей энергии Q , получаем

$$2l\sigma = l d_f \rho (\Delta v)^2 / 2 + Q l,$$

где слева стоит израсходованная капиллярная энергия, а справа — сумма кинетической энергии капли и энергии, перешедшей в тепло в расчете на единицу площади. Подставляя сюда приращение скорости (33), находим, что половина поверхностной энергии переходит в кинетическую энергию, а половина диссипирует: $Q = \sigma$. В формулах выше полагалось, что пленка тонкая. Поэтому площадь пленки много больше площади образовавшейся из нее капли. Соответственно капиллярной энергией капли пренебрегаем.

Наличие соотношения (33) не означает, что на поверхности пленки (т. е. вне концевой капли) волновое уравнение (28) и скорость звука (31) отменяются. Из соотношения (33) следует, что концевая капля, сформированная разрывом пленки, движется со скоростью звука (как откольный импульс). Поэтому материальная частица пленки (вплоть до ее поглощения каплей) «не знает» о произошедшем разрыве. В связи с обсуждением числа Маха отметим, что

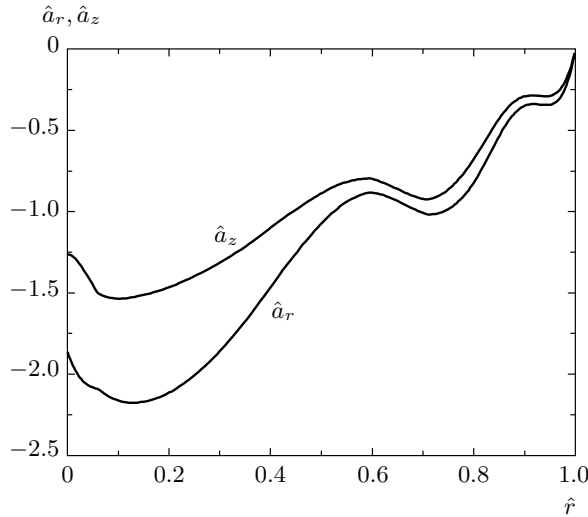


Рис. 36. Ускорения a_r материальных частиц пленки к оси z и замедление a_z частиц вдоль оси в момент времени $t = 1.846$ нс ($\hat{t} = 0.70954$). Параметры и момент времени соответствуют осесимметричному ($2D_a$) лазерному воздействию на рис. 16

при подъеме купола на высоту $z \sim R_L$, скорость втекания вещества в центральную каплю сравнима со скоростью звука (31), $\Delta v \approx 0.5 v_\sigma / \sqrt{2}$.

Подчеркнем, что с ростом начальной скорости v_o (18) и безразмерного определяющего параметра \hat{V}_o (13) (пусть значения σ и μ_o (16) фиксированы) меняется направление преимущественного вылета (вниз или вверх) оторвавшейся от подложки массы пленки золота. Это можно понять из графиков на рис. 24, 25 и 27. При $\hat{V}_o < A$ основная масса возвращается на подложку, в обратном случае большая часть массы улетает (абляция); величина $A \approx 1.8$. Понятие «основная масса» относится к центральной капле, которая всегда движется примерно по вертикали (вдоль оси z). Это связано с приближительной симметрией купола. Угол вылета малой капли, если она есть, определяется вектором импульса, который имелся на оторвавшемся кусочке пленки до его отрыва от основной пленки. Пример такого кусочка показан на рис. 34 (кусочек между разрывами 4.76 и 4.44 нс). В случае, представленном на рис. 29, центральная капля ударяет в подложку. В случае на рис. 30 центральная капля уходит по вертикали вверх.

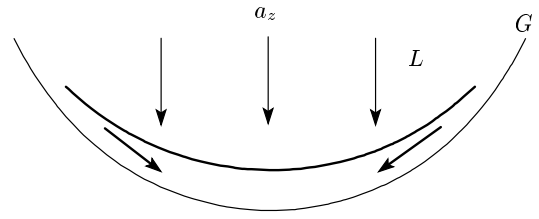


Рис. 37. Поле тяжести a_z в системе координат, связанной с границей G , прижимает жидкость L к границе G . Скатывающая сила является причиной ускорения жидкости к оси z . Эта картина объясняет появление центральной капли (см. рис. 16, 17, 22, 28–30, 33, 34) и приосевой струи (см. рис. 22, 23)

3.7. Физические причины стекания вещества к оси и образования струи

Капиллярные силы принципиально меняют характер движения пленки по сравнению со случаем без поверхностного натяжения (ср. кривые 1–3 на рис. 16 с кривой 4). Сопротивление поверхности купола его растяжению приводит к появлению мощных ускорений и замедлений, $\partial^2 r / \partial t^2 \equiv a_r$ и $\partial^2 z / \partial t^2 \equiv a_z$. Типичный пример представлен на рис. 36. Это повтор рис. 16, на котором вместо смещений показаны ускорения, которые приводят к таким смещениям. Мы не стали приводить на рис. 36 ускорений в веществе, которое попало в петельку, см. рис. 16. Безразмерные ускорения \hat{a} в капиллярной системе единиц переводятся в размерные ускорения по формуле $|\partial^2 r / \partial t^2| = (v_\sigma^2 / R_L) \hat{a}$. Подставляя параметры МД-расчета, приведенного на рис. 16, для масштаба ускорения v_σ^2 / R_L получаем величину $4.4 \cdot 10^{12}$ см/с². Эта величина на девять порядков больше ускорения земного тяготения, в сто раз превышает ускорение свободного падения на белых карликах и составляет проценты от громадного ускорения на нейтронных звездах.

В неинерциальной системе координат, связанной с замедляющимся куполом G (см. рис. 36), замедление a_z эквивалентно эффективному полю тяжести (эффект торможения автобуса), см. рис. 37. Составляющая ускорения, касательная к поверхности купола, приводит к соскальзыванию жидкости вниз к оси симметрии. Таким образом, легко выясняется происхождение скоростей, направленных к центру. Поток вещества, текущего к оси, во-первых, вызывает уменьшение толщины пленки купола, во-вторых, формирует массивное приосевое образование (см. рис. 22). Столкновение радиального потока пленки с осью приводит к появлению

струи и контрструи. Это стандартный эффект теории столкновения струй [82, 83]. Таким образом, складывается ясное понимание физики лазерного наноструктурирования в актуальных экспериментах [1, 2, 28–33, 86–88], в которых наблюдаются наноструйки и контрструя (см. рис. 7 в работе [28]). В предыдущих теоретических построениях не удавалось объяснить происхождение радиального течения жидкой фазы в центральную зону.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренная выше задача о пространственно-локализованном лазерном воздействии на пленочную мишень важна для многих приложений от микроэлектроники до биомедицины и наноплазмоники [1, 2, 28–33, 86–88]. В работе построена детальная модель воздействия на пленки. Она охватывает как стадию отслойки, длящуюся десятки пикосекунд, так и стадию развития купола, которая продолжается единицы и десятки наносекунд. Изучены тонкости взаимодействий гидродинамических волн в пленке и в подложке. Представлена физическая картина отслаивания (блистеринг) пленки от подложки. Описания абляции тонких пленок от диэлектрических подложек ранее не существовало.

Хотя представления о термомеханическом характере быстрой (изохорический нагрев) абляции развиты к настоящему времени хорошо [4, 5, 14–18, 44–47, 56, 63, 65, 67, 69, 89], в данной работе излагается ряд новых аспектов. Найдена связь между поглощенным флюенсом и скоростью отлета пленки золота от подложки (разд. 2). Осуществлен крупномасштабный МД-расчет в осесимметричной геометрии (разд. 3.2, 3.3). Продемонстрировано, каким образом формируется наноструя (см. рис. 22). Исследована нелинейная система уравнений в частных производных, описывающая полет купола (разд. 3.4, 3.5). Изучено влияние геометрии (плоский и осесимметричный случаи), разд. 3. Аналитически рассмотрен случай малых скоростей отлета пленки от подложки (линейная теория, случаи $2D_a$ и $2D_p$, соответственно разд. 3.4 и 3.5). Проанализированы процессы распада пленки и формирования нанок капель (разд. 3.6). Найдено простое объяснение феномену стекания вещества в зону вершины купола (разд. 3.7). Именно этот процесс приводит к формированию струй и контрструй (разд. 3.7).

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 14-19-01599). Молекулярно-динамическое моделирование было прове-

дено на суперкомпьютере «Ломоносов» Московского государственного университета.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Межчастичный потенциал, бинадаль и поверхностное натяжение

В МД-расчетах был использован межчастичный потенциал золота из работы [70]. Этот потенциал соответствует методу погруженного атома (ЕАМ-потенциал). Сравним данные, полученные с помощью УРС [36, 37, 53, 54] и согласно потенциалу ЕАМ. Данное УРС было использовано при гидродинамических расчетах абляции пленки золота с подложки в разд. 2. Метод нахождения термодинамических параметров представлен на рис. 38. Берется пленка золота толщиной примерно 25 нм. Пленка имеет две свободные границы. Координата x на рис. 38 направлена перпендикулярно плоскости пленки. На рисунке крупно показаны два околограничных слоя пленки, средняя часть опущена.

Методика определения поверхностного натяжения и термодинамических параметров на бинадали заключается в следующем. Вещество пленки разогревается термостатом до заданной температуры. Затем в течение достаточно продолжительного времени система термостатируется. Параметры определяются тогда, когда система пришла в термодинамическое равновесие. Значения поверхностного натяжения для четырех температур, найденные таким методом, приведены выше на рис. 15. Отметим, что

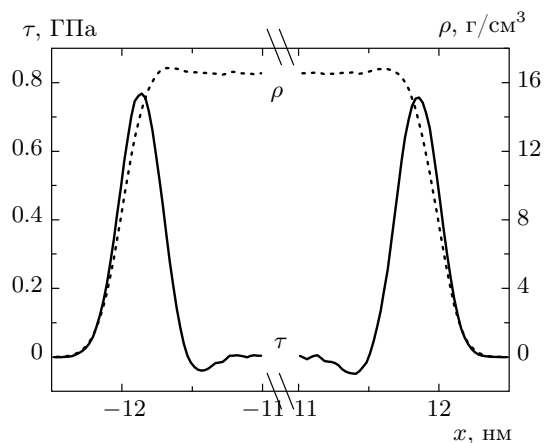


Рис. 38. Методика определения поверхностного натяжения и термодинамических параметров на бинадали с помощью МД-моделирования;
 $\tau = (P_x - P_y)/2$

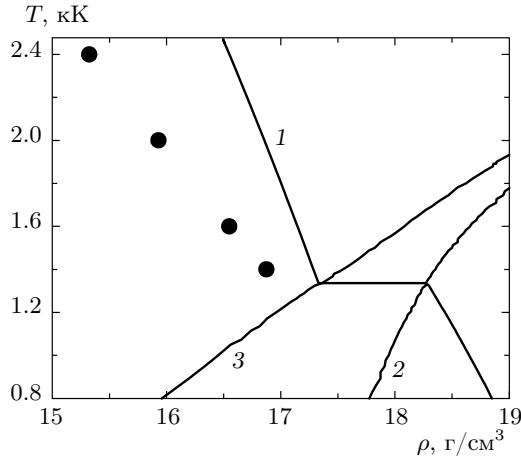


Рис. 39. Сравнение кривых кипения (сплошные кривые — УРС [36, 37, 53, 54], маркеры — ЕАМ-потенциал): 1 — бинодаль, 2 — солидус, 3 — ликвидус. Тройной точке соответствует горизонтальный отрезок

они неплохо укладываются на зависимость $\sigma(T)$ из работы [75]. Чтобы определить σ , нужно проинтегрировать напряжение сдвига τ на рис. 38 по координате x .

Вне пленки на рис. 38 давление мало, пленка очень медленно (температуры низкие) испаряется. Температура кипения золота составляет 3243 К. При этой температуре давление насыщенных паров над расплавом золота достигает одной атмосферы. Давления порядка даже сотен атмосфер ничтожны по сравнению с напряжением сдвига τ на рис. 38. Поэтому наличие паров не сказывается на точности определения капиллярного коэффициента в интересующем нас диапазоне температур.

Плотность вещества в центральной части пленки на рис. 38 соответствует состоянию на бинодали согласно использованному ЕАМ-потенциалу. Интересующий нас участок бинодали называется кривой кипения. На нем конденсированная фаза (жидкость) граничит с двухфазной областью пар-жидкость. Сравнение кривых кипения, полученных с помощью УРС и МД-моделирования, показано на рис. 39. МД-значениям на бинодали соответствуют маркеры.

Потенциал ЕАМ значительно занижает коэффициент поверхностного натяжения σ (в два раза, см. рис. 15). Коэффициент теплового расширения $\beta = (\partial \ln V / \partial T)_p$, наоборот, оказывается завышенным (см. рис. 39). Поэтому кривая кипения, полученная из МД-расчета, идет ниже. Соответственно, крити-

ческая температура, определенная по ЕАМ-потенциалу, будет меньше, а давление насыщенных паров — больше (при равных температурах). Любопытно, что коэффициенты β , так же как σ , различаются в два раза: $\beta_{EOS} = 0.48 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$, $\beta_{EAM} = 0.96 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$. В твердой фазе погрешность определения $\beta \approx 0.43 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ гораздо меньше. Параметры твердой фазы использованный ЕАМ-потенциал описывает с хорошей точностью [70].

ЕАМ-потенциал аккуратно представляет параметры тройной точки: температуру плавления T_m и разность плотностей твердой и жидкой фаз. Для температуры T_m ЕАМ-потенциал [70] дает значение 1330 К, тогда как справочное значение T_m равно 1337 К. Поэтому МД-кривая кипения на рис. 39 исходит из левого конца отрезка, относящегося к тройной точке на плоскости ρ, T . Величина β — это дифференциальный коэффициент, ее вычисление требует дифференцирования. Соответственно ошибка больше. Плотность расплава, найденная с помощью ЕАМ-потенциала [70], хорошо согласуется с плотностью полученной с использованием УРС. Даже в точке с наибольшей температурой 2.4 кК на рис. 39 плотность лишь на 8% меньше.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. S. Ivanov, A. I. Kuznetsov, V. P. Lipp et al., Appl. Phys. A **111**, 675 (2013).
2. Y. P. Meshcheryakov, M. V. Shugaev, Th. Mattle et al., Appl. Phys. A **113**, 521 (2013).
3. K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, A. Cavalleri et al., Phys. Rev. Lett. **81**, 224 (1998).
4. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, Ю. В. Петров и др., Письма в ЖЭТФ **69**, 284 (1999).
5. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskiy, Yu. V. Petrov et al., Proc. SPIE **9065**, 906502 (2013).
6. С. И. Анисимов, Б. Л. Капелиович, Т. Л. Перельман, ЖЭТФ **66**, 776 (1974).
7. Ю. В. Петров, Н. А. Иногамов, К. П. Мигдал, Письма ЖЭТФ **97**, 24 (2013).
8. Z. Lin, L. V. Zhigilei, and V. Celli, Phys. Rev. B **77**, 075133 (2008).
9. K. P. Migdal, Yu. V. Petrov, and N. A. Inogamov, Proc. SPIE **9065**, 906503 (2013).
10. N. A. Inogamov, A. Ya. Faenov, V. V. Zhakhovskiy et al., Contrib. Plasm. Phys. **51**, 419 (2011).

11. Ю. В. Петров, Н. А. Иногамов, Письма ЖЭТФ **98**, 316 (2013).
12. Н. А. Иногамов, С. И. Анисимов, Б. Ретфельд, ЖЭТФ **115**, 2091 (1999).
13. S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, A. M. Oparin et al., Appl. Phys. A **69**, 617 (1999).
14. В. В. Жаховский, К. Нишихара, С. И. Анисимов, Н. А. Иногамов, Письма в ЖЭТФ **71**, 241 (2000).
15. L. V. Zhigilei and B. J. Garrison, J. Appl. Phys. **88**, 1281 (2000).
16. С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др., Письма в ЖЭТФ **77**, 731 (2003).
17. P. Lorazo, L. J. Lewis, and M. Meunier, Phys. Rev. Lett. **91**, 225502 (2003).
18. M. E. Povarnitsyn, T. E. Itina, M. Sentis et al., Phys. Rev. B **75**, 235414 (2007).
19. F. Baset, K. Popov, A. Villafranca et al., Opt. Express **21**, 12527 (2013).
20. B. Nagler, U. Zastra, R. R. Fäustlin et al., Nature Phys. **5**, 693 (2009).
21. J. Colgan, J. Abdallah, Jr., A. Ya. Faenov et al., Phys. Rev. Lett. **110**, 125001 (2013).
22. B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis, At. Data Nucl. Data Tables **54**, 181 (1993).
23. N. A. Inogamov, A. Ya. Faenov, V. V. Zhakhovskii et al., Contrib. Plasm. Phys. **51**, 361 (2011).
24. M. Ishino, A. Ya. Faenov, M. Tanaka et al., Appl. Phys. A **110**, 179 (2013).
25. M. Ishino, A. Ya. Faenov, M. Tanaka et al., Proc. SPIE **8849**, 88490F (2013); doiL 10.1117/12.2022425.
26. E. N. Borodin, A. E. Mayer, and V. S. Krasnikov, Current Appl. Phys. **11**, 1315 (2011).
27. P. K. Patel, A. J. Mackinnon, M. H. Key et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 125004 (2003).
28. C. Unger, J. Koch, L. Overmeyer, and B. N. Chichkov, Opt. Express **20**, 24864 (2012).
29. Y. Nakata, T. Okada, and M. Maeda, Jpn. J. Appl. Phys. **42**, L1452 (2003).
30. F. Korte, J. Koch, and B. N. Chichkov, Appl. Phys. A **79**, 879 (2004).
31. Y. Nakata, N. Miyanaga, and T. Okada, Appl. Surf. Sci. **253**, 6555 (2007).
32. A. I. Kuznetsov, J. Koch, and B. N. Chichkov, Appl. Phys. A **94**, 221 (2009).
33. В. И. Емельянов, Д. А. Заярный, А. А. Ионин и др., Письма ЖЭТФ **99**, 601 (2014).
34. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskii, S. I. Ashitkov et al., Appl. Surf. Sci. **255**, 9712 (2009); arXiv:0812.2965.
35. N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, V. V. Zhakhovsky et al., AIP Conf. Proc. **1464**, 593 (2012).
36. А. В. Бушман, И. В. Ломоносов, В. Е. Фортов, Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии, ИХФЧ РАН, Черногловка (1992).
37. A. V. Bushman, G. I. Kanel', A. L. Ni, and V. E. Fortov, *Intense Dynamic Loading of Condensed Matter*, Taylor & Francis (1993).
38. Д. М. Медведев, Ю. В. Петров, ЖЭТФ **115**, 231 (1999).
39. V. Recoules, J. Clerouin, G. Zerah et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 055503 (2006).
40. М. Б. Агранат, Н. Е. Андреев, С. И. Ашитков и др., Письма ЖЭТФ **85**, 328 (2007).
41. М. Е. Veysman, М. В. Агранат, Н. Е. Андреев et al., J. Phys. B **41**, 125704 (2008).
42. S. Khakshouri, D. Alfe, and D. M. Duffy, Phys. Rev. B **78**, 224304 (2008).
43. P. R. Levashov, G. V. Sin'ko, N. A. Smirnov et al., J. Phys.: Condens. Matter. **22**, 505501 (2010).
44. E. G. Gamaly, Phys. Rep. **508**, 91 (2011).
45. P. A. Loboda, N. A. Smirnov, A. A. Shadrin, and N. G. Karlykhanov, High Energy Density Phys. **7**, 361 (2011).
46. С. В. Стариков, В. В. Стегайлов, Г. Э. Норман и др., Письма ЖЭТФ **93**, 719 (2011).
47. С. Г. Бежанов, А. П. Канавин, С. А. Урюпин, КЭ **41**, 447 (2011).
48. Г. Э. Норман, С. В. Стариков, В. В. Стегайлов, ЖЭТФ **141**, 910 (2012).
49. G. Norman, S. Starikov, V. Stegailov et al., J. Appl. Phys. **112**, 013104 (2012).
50. G. V. Sin'ko, N. A. Smirnov, A. A. Ovechkin et al., High Energy Density Phys. **9**, 309 (2013).
51. G. E. Norman, S. V. Starikov, V. V. Stegailov et al., Contrib. Plasma Phys. **53**, 129 (2013).

52. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Наука, Москва (1966).
53. <http://teos.ficpr.ac.ru/rusbank/>.
54. К. В. Хищенко, Письма в ЖТФ **30**(19), 65 (2004).
55. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov et al., J. Phys.: Conf. Ser. **510**, 012041 (2014).
56. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov et al., J. Phys.: Conf. Ser. **500**, 192023 (2014).
57. V. V. Stegailov, Contrib. Plasma Phys. **50**, 31 (2010).
58. D. Fisher, M. Fraenkel, Z. Henis et al., Phys. Rev. E **65**, 016409 (2001).
59. *Физические величины*. Справочник под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова, Энергоатомиздат, Москва (1991).
60. W. Ebeling, A. Foerster, V. Fortov et al., *Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas*, Teubner-Texte zur Physik, Vol. 25, Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart (1991).
61. A. Yu. Kuksin, G. E. Norman, V. V. Stegailov, and A. V. Yanilkin, Comp. Phys. Comm. **177**, 34 (2007).
62. D. K. Ilnitsky, V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov et al., J. Phys.: Conf. Ser. **500**, 032021 (2014).
63. A. K. Upadhyay, N. A. Inogamov, B. Rethfeld, and H. M. Urbassek, Phys. Rev. B **78**, 045437 (2008).
64. Ya. Cherednikov, N. A. Inogamov, and H. M. Urbassek, J. Opt. Soc. Amer. B **28**, 1817 (2011).
65. B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, and I. I. Oleynik, Phys. Rev. B **82**, 064113 (2010).
66. B. Chimier and V. T. Tikhonchuk, Phys. Rev. B **79**, 184107 (2009).
67. L. V. Zhigilei, Zh. Lin, and D. S. Ivanov, J. Phys. Chem. C **113**, 11892 (2009).
68. M. E. Povarnitsyn, T. E. Itina, K. V. Khishchenko, and P. R. Levashov, Appl. Surf. Sci. **253**, 6343 (2007).
69. A. N. Volkov and L. V. Zhigilei, J. Phys.: Conf. Ser. **59**, 640 (2007).
70. V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov et al., Appl. Surf. Sci. **255**, 9592 (2009).
71. N. A. Inogamov, A. Ya. Faenov, V. A. Khokhlov et al., Contrib. Plasma Phys. **49**, 455 (2009).
72. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, Письма в ЖЭТФ **100**, 6 (2014).
73. F. Aqra and A. Ayyad, Materials Lett. **65**, 2124 (2011).
74. E. B. Webb III and G. S. Grest, Phys. Rev. Lett. **86**, 2066 (2001).
75. V. K. Semenchenko, *Surface Phenomena in Metals and Alloys*, Pergamon, New York (1961).
76. В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, К. Nishihara, Письма в ЖЭТФ **87**, 491 (2008).
77. V. Zhakhovskii, N. Inogamov, and K. Nishihara, J. Phys.: Conf. Ser. **112**, 042080 (2008).
78. С. И. Ашитков, Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский и др., Письма в ЖЭТФ **95**, 192 (2012).
79. Е. В. Голосов, А. А. Ионин, Ю. Р. Колобов и др., ЖЭТФ **140**, 21 (2011).
80. J. Reif, Springer Ser. IN Mater. Sci. **130**, 19 (2010).
81. A. Ya. Vorobyev and Chunlei Guo, Opt. Express **14**, 2164 (2006).
82. G. Birkhoff and E. H. Zarantonello, *Jets, Wakes and Cavities*, Acad. Press, New York (1957).
83. М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат, *Проблемы гидродинамики и их математические модели*, Наука, Москва (1973).
84. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, S. I. Ashitkov et al., J. Phys.: Conf. Ser. **500**, 112070 (2014).
85. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, С. И. Ашитков и др., ЖЭТФ **134**, 5 (2008).
86. Y. P. Meshcheryakov and N. M. Bulgakova, Appl. Phys. A **82**, 363 (2006).
87. D. S. Ivanov, B. Rethfeld, G. M. O'Connor et al., Appl. Phys. A **92**, 791 (2008).
88. D. S. Ivanov, Zh. Lin, B. Rethfeld et al., J. Appl. Phys. **107**, 013519 (2010).
89. А. А. Ионин, С. И. Кудряшов, Л. В. Селезнев и др., ЖЭТФ **143**, 403 (2013).