Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук «ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН»

На правах рукописи

# Хохлов Виктор Александрович

# Двухтемпературная гидродинамика при воздействии ультракоротких лазерных импульсов на твердые мишени

Специальность 1.3.3— «теоретическая физика (физико-математические науки)»

> Диссертация на соискание учёной степени доктора физико-математических наук

Черноголовка Московской обл. $-\,2024$ 

# Оглавление

Стр.

| Введе | ние .  |  | 6        |  |  |
|-------|--|--|----------|--|--|
| Глава | 1. Воз   | здействие ультракоротких лазерных импульсов на           | 19       |  |  |
| 11    | Лвухт  |  | 19       |  |  |
| 1.1   | 1 1 1  | Основные уравнения двухтемпературной гидродинамики       | 20       |  |  |
|       | 1.1.1  | Уравнения состояния                                      | 20<br>26 |  |  |
|       | 1 1 3  | Кинетические коэффициенты                                | 33       |  |  |
| 1.2   | Нагре  | Нагрев металлической мишени ультракоротким лазерным      |          |  |  |
|       | импул  | БСОМ   | 41       |  |  |
|       | 1.2.1  | Нагрев и двухтемпературная стадия                        | 42       |  |  |
|       | 1.2.2  | «Холодное» поверхностное испарение                       | 45       |  |  |
| 1.3   | Распространение тепловой и акустической волн вглубь вещества |  |          |  |  |
|       | 1.3.1  | Движение области плавления. О задаче Стефана             | 47       |  |  |
|       | 1.3.2  | Волна сжатия и растяжения                                | 50       |  |  |
| 1.4   | Лазерная абляция   |  |          |  |  |
|       | 1.4.1  | Критерий разрыва   | 54       |  |  |
|       | 1.4.2  | Возникновение кратера и откольной оболочки. Кольца       |          |  |  |
|       |  | Ньютона  | 58       |  |  |
| Глава | 2. Оті   | кольная абляция диэлектриков ( <mark>01:2, 02:2</mark> ) | 68       |  |  |
| 2.1   | Уравн  | ения двухтемпературной гидродинамики для диэлектриков    | 70       |  |  |
|       | 2.1.1  | Уравнения состояния и кинетические коэффициенты в        |          |  |  |
|       |  | двухтемпературном LiF                                    | 71       |  |  |
|       | 2.1.2  | Электрон—ионный теплообмен                               | 72       |  |  |
| 2.2   | Динам  | мика нагрева кристалла LiF                               | 75       |  |  |
| 2.3   | Распр  | остранение волны сжатия/расширения                       | 75       |  |  |
| 2.4   | Преде  | Предельное растягивающее напряжение и разрыв             |          |  |  |
| Глава | 3. Пр  | охождение тепловых и акустических возмущений             |          |  |  |
|       | чер  | ез мишень конечной толщины.                              |          |  |  |
|       | Уда  | арные волны. (01:3, 02:3)                                | 81       |  |  |

Стр.

| 3.1   | Учет упругого сдвигового напряжения в 1D—гидродинамике<br>(O2:3:5) |  |  |  |  |
|-------|--|--|--|--|--|
| 3.2   | Влиян<br>(О2:3:  | ие сдвиговой упругости в гидродинамических расчетах<br>5, O1:3:18)   |  |  |  |
|       | 3.2.1  | Напряжение сдвига в твердом теле на 27—стадии и  |  |  |  |
|       |  | распространение волны сжатия от жидкости к твердому  |  |  |  |
|       |  | телу (О1:3:18)   |  |  |  |
|       | 3.2.2  | Движение волны сжатия по упруго-пластичному  |  |  |  |
|       |  | веществу (О2:3:5)  |  |  |  |
| 3.3   | Упругопластические явления в сильных ударных волнах.               |  |  |  |  |
|       | Сверх  | упругость (О2:3:4)   |  |  |  |
| Глава | <b>4. Bo</b> a   | здействие коротких лазерных импульсов на   |  |  |  |
|       | тон  | кие пленки на подложке   |  |  |  |
|       | ИМ   | ногослойные мишени (О1:4, О2:4)  |  |  |  |
| 4.1   | Особе  | нности использования лагранжевой гидродинамики при   |  |  |  |
|       | налич  | ии слоев различных веществ   |  |  |  |
| 4.2   | Метал  | Металлические пленки на подложке: Осцилляции и отслоение   |  |  |  |
|       | пленк  | и от подложки (О1:4:20–22)   |  |  |  |
|       | 4.2.1  | Колебания пленки на подложке $(F_{\rm abs} < F_{\rm del})$ (O1:4:20,21, §3) 98   |  |  |  |
|       | 4.2.2  | Отслоение пленки от подложки и разрыв в пленке   |  |  |  |
|       |  | $(F_{\rm del} < F_{\rm abs}) (O1:4:20,21) \dots \dots$ |  |  |  |
| 4.3   | Возде  | Воздействие коротких лазерных импульсов на многослойные  |  |  |  |
|       | мишени (О1:4:24, 25)   |  |  |  |  |
|       | 4.3.1  | Физическая модель и расчетная схема $(O1:4:24, \ \$3)$ 117   |  |  |  |
|       | 4.3.2  | Ранняя стадия, первая пикосекунда, аномальные  |  |  |  |
|       |  | температурные профили (O1:4:24, §4)  |  |  |  |
|       | 4.3.3  | Передача энергии в ионную подсистему и плавление   |  |  |  |
|       |  | $(O1:4:24, \S5)$   |  |  |  |
|       | 4.3.4  | Разрыв в первом слое никеля  |  |  |  |
|       | 4.3.5  | Увеличение поглощенной энергии до второго порога 127   |  |  |  |
| Глава | 5. Лаз   | верная абляция в жидкость (О1:5)   |  |  |  |

| 5.1    | Абляция при воздействии ультракороткого лазерного импульса |  |  |
|--------|--|--|--|
|        | $(F_{\rm abs} =$   | = 400 мДж/см <sup>2</sup> , $\tau_{\rm L} = 0.1$ пс) (О1:5:27) |  |
|        | 5.1.1  | Ранняя стадия, 2 <i>T</i> —релаксация (О1:5:27, §5.1)          |  |
|        | 5.1.2  | Формирование «атмосферы» из-за торможения водой и              |  |
|        |  | увеличение массы и импульса атмосферы за счет                  |  |
|        |  | аккреции (О1:5:27, §5.2)                                       |  |
|        | 5.1.3  | Нуклеация и средняя стадия торможения контакта                 |  |
|        |  | $(O1:5:27, \S5.3)$   |  |
|        | 5.1.4  | Поздние стадии торможения контакта (O1:5:27, §5.4) 148         |  |
|        | 5.1.5  | Степень неустойчивости контакта (O1:5:27, §5.4) 151            |  |
|        | 5.1.6  | Результаты молекулярно-динамического (МД)                      |  |
|        |  | моделирования (О1:5:27, §5.4)                                  |  |
| 5.2    | Абляция при воздействии лазерного импульса до              |  |  |
|        | мульти   | и—пикосекундного диапазона (O1:5:28,31)                        |  |
| 5.3    | Воздей   | аствие субнаносекундного импульса                              |  |
|        | 5.3.1  | Нагрев, расширение и акустическое излучение: роль              |  |
|        |  | плавления (O1:5:32, §3)  |  |
|        | 5.3.2  | Превышение критической температуры золота,                     |  |
|        |  | появление контактного слоя газообразного золота                |  |
|        |  | $(O1:5:32, \S4)$   |  |
|        | 5.3.3  | Формирование слоя паров воды и золота вблизи                   |  |
|        |  | поверхности контакта   |  |
| Заклю  | чение .  |  |  |
| Списон | к рисуі  | нков   |  |
| Основн | ные пу   | бликации   |  |
| O1     | Статы  | и в рецензируемых журналах, индексируемых Web of               |  |
|        | Science  | e: Core Collection, и/или Scopus                               |  |
|        | O1:1   | Воздействие ульракоротких лазерных импульсов                   |  |
|        |  | (УКЛИ) на объемные мишени и толстые пленки.                    |  |
|        |  | Абляционный кратер. Кольца Ньютона                             |  |
|        | O1:2   | Рентгеновские УКЛИ. Прозрачные диэлектрики 192                 |  |

|                   | O1:3  | Прохождение тепловых и акустических возмущений      |  |
|-------------------|-------|---|--|
|                   |       | через мишень. Ударные волны                         |  |
|                   | O1:4  | Воздействие УКЛИ на тонкие металлические пленки и   |  |
|                   |       | многослойные мишени                                 |  |
|                   | O1:5  | Лазерная абляция в жидкость                         |  |
| O2                | Статы | и в сборниках конференций                           |  |
|                   | O2:1  | Воздействие ульракоротких лазерных импульсов на     |  |
|                   |       | объемные мишени и толстые пленки. Абляционный       |  |
|                   |       | кратер. Кольца Ньютона                              |  |
|                   | O2:2  | Рентгеновские УКЛИ. Прозрачные диэлектрики 198      |  |
|                   | O2:3  | Прохождение тепловых и акустических возмущений      |  |
|                   |       | через мишень. Ударные волны                         |  |
|                   | O2:4  | Воздействие УКЛИ на тонкие металлические пленки 199 |  |
| Список литературы |       |   |  |

#### Введение

Актуальность темы. Благодаря большой разнице масс электронов и атомов электрон—электронная и ион—ионная (фононная) релаксация в металлах происходит значительно быстрее, чем электрон—ионная релаксация (см., например, [1]). Это позволяет на промежуточных временах  $\tau_{ee}, \tau_{ii} \ll t \ll \tau_{ei}$ считать, что электронная (электронов проводимости) и ионная (фононная) подсистемы металла являются квазиравновесными и имеют установившиеся температуры  $T_e$  и  $T_i$ , но эти температуры могут не совпадать. Поскольку лазерное излучение сначала поглощается электронами, а затем передается ионам, на таких временах может быть  $T_e \gg T_i$  [2; 3]. Длительность рассматриваемых ниже ультракороткие (фемто- пискосекундные) лазерных импульсов попадает именно в этот диапазон.

Воздействие на твердые тела ультракоротких (пико- фемтосекундной длительности) импульсов лазерного излучения (УКЛИ) оптического или мягкого рентгеновского диапазона имеет большое значение как с теоретической, так и с практической точки зрения. Оно представляет собой незаменимый инструмент для исследований в науке [4–10] и в технологиях обработки материалов [11–15]: используется для микроструктурной обработки поверхностей металлов, полупроводников и диэлектриков. Эксперименты показывают, что воздействие таких импульсов позволяет получить большую точность и аккуратность обработки, чем воздействие более длительных импульсов. Исследование воздействия УКЛИ на твердые мишени показало, что при этом наблюдается ряд эффектов, отсутствующих при воздействии более длинных импульсов. Соответственно изучение взаимодействия УКЛИ с веществом ведется широким фронтом и уже продолжительное время [3;16–23]. При этом многие проблемы сохраняют свою актуальность.

Существенное значение для экспериментального исследования воздействия УКЛИ сыграло развитие техники "pump—probe" («накачка—зонд») экспериментов [24–27]. Типичная схема такого эксперимента приведена на рис. 1. В таких экспериментах от основного импульса, воздействующего на мишень (pump), отделяется импульс малой мощности (probe), который после определенной регулируемой задержки используется для микроскопического или микроинтерферометрического исследования облучаемой области



Рисунок 1 — Схема pump-probe эксперимента ([25], Рис. 1)

(или тыльной стороны) мишени. Это позволило с очень точным, не достижимым ранее разрешением по времени порядка длительности импульса (зондирующего импульса) и пространственной точностью порядка длины волны зондирующего импульса фиксировать изменение оптических свойств поверхности мишени, ее движения. Интересным развитием техники pump-probe экспериментов является использование «чипированных» (chirped) — растянутых по времени с линейной зависимостью частоты от времени — пробных импульсов. [28; 29] В этом случае микроинтерферометрия с отраженногым импульсом дает сразу временной профиль.

При этом проявилось существенное отличие процессов при ультракороткоимпульсном лазерном воздействии от воздействия более длинных (микро наносекундного диапазона и длиннее) импульсов.

Важную роль при этом играют процессы на двухтемпературной (2T) стадии, когда имеется большое различие электронной и ионной температур  $T_{\rm e} \gg T_{\rm i}$ . Несмотря на краткость этой стадии она существенно влияет на развитие процессов на больших временах. При этом непосредственное наблюдение процессов в веществе мишени на таких масштабах времени невозможно. Поэтому теоретическое исследование 2T—стадии, проведенное в диссертации, несомненно актуально и имеет большое значение для изучения воздействия ультракоротких лазерных импульсов на твердые мишени.

Для описания такой ситуации, возникающей при воздействии ультракоротких (пикосекундных) лазерных импульсов на металлическую мишень, приводящем к эмиссии электронов с их поверхности, в работе С.И. Анисимова и др. [3] впервые была успешно применена двухтемпературная (2*T*) модель. В такой модели тепловой баланс в электронной и ионной подсистемах описывается отдельными уравнениями [3, система (2)]),

$$c_{\rm e}(T_{\rm e})\frac{\partial T_{\rm e}}{\partial t} = \chi \Delta T_e - \alpha (T_{\rm e} - T_{\rm i}) + f(\mathbf{r}, t),$$
  

$$c_{\rm i}(T_{\rm i})\frac{\partial T_{\rm i}}{\partial t} = \alpha (T_{\rm e} - T_{\rm i}),$$
(1)

а теплообмен между подсистемами описывается слагаемым  $\alpha(T_{\rm e}-T_{\rm i})$ , которое в работе [3] взято в виде

$$\Delta E = \alpha (T_{\rm e} - T_{\rm i}), \qquad \alpha = \frac{\pi^2}{6} \frac{m \, n \, s^2}{\tau_{\rm e} T_{\rm e}}, \tag{2}$$

обратно пропорционально электронной температуре в соответствии с [1]. Такая 2*T* модель хорошо описывает и ряд других эффектов, возникающих при воздействии УКЛИ на металлы [30–32], см. также [33].

Использованная в указанных выше работах [3; 30-32] 2*T* модель хороша при не слишком больших интенсивностях излучения и при электрон—ионной релаксации достаточно быстрой по сравнению со временами, когда становится существенным движение вещества мишени. В противном случае уравнения 2*T* модели (1)-(2) необходимо рассматривать совместно с уравнениями движения (уравнениями гидродинамики).

В первую очередь движение вещества становится заметным в испаренном факеле. Система уравнений двухтемпературной гидродинамики — уравнения гидродинамики и уравнения теплового баланса для электронной и ионной подсистем — была использована для исследования такой задачи в работе [34]. Недостатком данной работы является то, что все двухтемпературное (2T) вещество рассматривается в ней как двухтемпературная плазма, в то время как значительная часть 2T вещества, что видно и из результатов этой работы, остается при твердотельной плотности. Ниже внимание будет сосредоточено на процессах, происходящих в двухтемпературном конденсированном веществе. При этом 2T—гидродинамика  $(2T\Gamma Д)$  в конденсированном веществе является новой теорфизической сущностью, имеющей принципиально важные отличия



Рисунок 2 — Микрофотографии алюминиевой мишени после воздействия ультракороткого лазерного импульса ([25], Рис. 3). В нижнем правом углу фотографий указано время после импульса.

в том числе от 2T плазмы — важным является учет совсем других эффектов, и возникают новые явления.

Короткоимпульсная лазерная абляция — удаление поверхностного слоя мишени в результате воздействия на нее ультракоротких (пико- фемтосекундного диапазона) лазерных импульсов — широко изучается со времени появления соответствующих лазеров.

В работах [25; 26] было обнаружено принципиально новое интересное явление, отсутствующее при лазерной абляции под действием более длительных импульсов. На полученных с помощью pump—probe техники микрофотографиях облученных мишеней наблюдаются кольца, похожие на **кольца Ньютона** (см. рис. 2).

В работах [35; 36] было показано, что такие кольца могут возникать в результате интерференции зондирующего луча, отраженного от отлетающего от мишени конденсированного абляционного купола и от дна кратера. На качественном уровне показано, что появление конденсированного слоя, отлетающего от мишени, может быть связано с быстрым распространением тепла вглубь мишени на двухтемпературной стадии, что приводит к качественному отличию абляции в этом случае от более длительных импульсов. Последовательное исследование процесса короткоимпульсной лазерной абляции, позволившее объяснить наблюдаемые эффекты, впервые проведено в нашей работе [37, (O1:1:1)] и подробно будет рассмотрено ниже в главе 1. Кратко на качественном уровне:

Лазерное излучение поглощается электронами, переводя вещество мишени в двухтемпературное состояние. Благодаря большой температуропроводности электронной подсистемы  $\chi_e = \kappa_e/c_e$  тепло быстро распространяется в глубь вещества. Одновременно происходит теплообмен между электронной и ионной подсистемой, и через время порядка  $t_{eq} \approx c_e/\alpha$  система переходит в однотемпературное состояние с значительно меньшей температуропроводностью. За это время тепло успевает распространиться на расстояние  $d_{2T} \approx \sqrt{\chi_e t_{eq}} \approx \sqrt{\kappa_e/\alpha}$ . В результате создается приповерхностный слой с высокой электронной (затем и ионной) температурой и практически невозмущенной плотностью, а, следовательно, с высоким давлением. Разгрузка этого слоя порождает уходящую в глубь вещества волну сжатия, за которой следует волна разряжения.

Эта стадия является существенно двухтемпературной, и в работе [37, (O1:1:1)] рассмотрена с помощью двухтемпературной гидродинамики (2*T*ГД). Поскольку за это время смещения малы, по сравнению с характерными поперечными размерами, гидродинамика рассматривается одномерная (см. гл. 1, §1.1.1).

Растяжение приповерхностного слоя приводит (при достаточной интенсивности выше порога абляции) к его отрыву. Этот процесс является существенно неоднородным и неодномерным. Затем становятся существенными трехмерные эффекты, связанные с неоднородностью распределения излучения по фокальному пятну. Для изучения этой стадии используется 3D молекулярно динамическое моделирование (МДМ), однотемпературное, поскольку до данной стадии электронная и ионная температура успевают сравнятся. В качестве начальных данных для МДМ используются результаты 2*T*ГД расчета. Грубо, без подробностей, которые дает МД, разрыв может быть получен и в гидродинамике, при добавлении в схему дополнительного **критерия разрыва** (см. [38;39]). Подробнее использование критерия разрыва будет рассмотренно ниже, см. 1.4.1.

Распределение интенсивности по пятну, спадающее от центра к периферии, приводит к тому, что в центре отлетает более тонкая пленка с большей скоростью, в результате чего возникает купол, высота которого растет со временем. Дно кратера в силу того, что глубина кратера оказывается порядка толщины прогретого на 2T—стадии слоя  $d_{2T}$  и слабо зависит от интенсивности оказывается практически плоской. Анализ интерференции излучения зондирующего импульса на таком куполе показывает, что в результате возникают «кольца Ньютона» в соответствии с результатами [25; 26].

Разработанная в работе [37, (O1:1:1)] схема —  $2T1D\GammaД$  расчет и затем, при необходимости, 1T3D MДМ, в качестве начальных данных для которого используются результаты 2ТГД расчета — оказалась очень плодотворной. В работе [37, (01:1:1)] использовался модельный потенциал межатомного взаимодействия типа Ленарда-Джонса в МДМ и соответствующее модельное уравнение состояния (УРС) в ГД. Поэтому результаты работы показали только качественное соответствие экспериментам. Использование в дальнейших работах разработанных для конкретных веществ уравнений состояния (см. 1.1.2), коэффициентов теплопроводности и электрон-ионного теплообмена в ГД (см. 1.1.3) и потенциалов межатомного взаимодействия в МДМ позволило получать не только качественное, но хорошее количественное соответствие результатов расчетов и экспериментов (см. [40; 41, (О2:1:1, О1:1:2)] и последующие работы). Для ионной подсистемы используются в частности широкодиапазонные многофазные УРС, разработанные К.В.Хищенко, см. например [42–51], по типу [52–57], см. также [58; 59]). Для электронной подсистемы УРС (см. 1.1.2) и коэффициенты теплопроводности и электрон-ионного теплообмена (см. 1.1.3) это частично выведенные теоретически формулы или полуэмпирические аппроксимации, разработанные с использованием результатов DFT-моделирования [45; 60-64]. При этом было выяснено, что использовавшиеся ранее, в том числе в [37, (O1:1:1)] приближение ферми-жидкости для электронного УРС применимо только для простых металлов, как алюминий, а при расчете теплопроводности и электронионного теплообмена других металлов необходимо учитывать процессы переброса [62].

Целью данной работы является изучить (на масштабах сплошной среды: термо—гидродинамики) процессы, происходящие в веществе твердых мишеней (металлических, диэлектрических) при воздействии ультракоротких (фемто пикосекундного диапазона) лазерных импульсов.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Разработать физическую модель и соответствующую расчетную схему 2*T*—гидродинамики (2*T*ГД).

- 2. Разработать расширение 2*T*ГД с учетом возбуждения электронов в диэлектрике под действием импульсов рентгеновского диапазона.
- Разработать расширение 2*T*ГД с учетом сдвиговой упругости твердых веществ.
- 4. Разработать расширение 2*T*ГД при наличии слоев веществ с существенно разными физическими свойствами.

# Основные положения, выносимые на защиту:

1. При воздействии ультракороткого (фемто—пикосекундного диапазона) лазерного импульса на металлическую мишень возникает двухтемпературное состояние, с электронной температурой, значительно превосходящей ионную  $T_{\rm e} \gg T_{\rm i}$ . Несмотря на краткость 2T—фазы, она существенно влияет на дальнейшие процессы.

Разработанная физическая модель и на ее основе рассчетная схема 2Tгидродинамики ( $2T\Gamma Д$ ) позволила впервые корректно описать 2T эффекты в конденсированном веществе мишеней.

- 2. Молекулярно—динамическое (МД) моделирование, стартующее с состояния, полученного в 2*T*ГД расчете, или 2*T*ГД расчет с использованием впервые предложенного варианта критерия разрыва дает правильное описание процесса откольной абляции. Получаемые порог абляции, момент отрыва, толщина отрывающегося слоя и его скорость точно соответствуют экспериментальным результатам.
- 3. Учет радиального распределения интенсивности лазерного излучения — падения интенсивности излучения от центра к периферии лазерного пятна — дает, что отлетающий слой имеет вид полупрозрачного купола, опирающегося на практически плоское основание, что соответствует схеме в опытах Ньютона (с перевернутой линзой). Это позволило впервые объяснить наблюдающиеся при лазерной абляции «кольца Ньютона» в микрофотографиях отраженного зондирующего импульса.
- 4. При воздействии на прозрачные диэлектрики ультракоротких (пико—фемтосекундного диапазона) рентгеновских (ультрафиолетовых) импульсов необходимо схему двухтемпературной гидродинамики, рассмотренную выше для металлов, дополнить уравнением для дополнительной термодинамической переменной — плотности числа электронов в зоне проводимости (степенью ионизации).

Использование такой дополненной схемы впервые позволило корректно описать происходящую при этом термомеханическую абляцию диэлектриков, в частности значительное снижение порога абляции по сравнению с наблюдаемым для более длительных импульсов (микросекундных и длиннее).

- 5. В динамике твердых тел существенную роль играет сдвиговая упругость. Без ее учета качественная картина движения сохраняется, но скорости получаются неправильными (заниженными) Разработанная модель с включением сдвиговой упругости позволяет (впервые) получить результаты, полностью соответствующие МД—моделированию и экспериментам.
- Разработанное расширение модели и расчетной схемы позволило впервые описать воздействие ультракоротких лазерных импульсов на мишени, состоящие из двух (пленка на подложке) и более (наноламинаты) слоев веществ с существенно различными свойствами.
- Прослежен переход от колебаний пленки на подложке (при F<sub>abs</sub> < F<sub>del</sub>) к отслоению пленки и к разрыву в пленке.
   Полученные результаты хорошо соответствуют экспериментальным данным.
- 8. Впервые теоретически исследовано поведение наноламината (на примере из чередующихся тонких слоев никеля и алюминия). Показано, что существует порог разрыва в первом слое никеля, а следующий порог соответствует разрыву в первом слое алюминия вблизи границы с первым слоем никеля. Полученные пороги соответствуют наблюдаемым в эксперименте порогам разрыва в слое никеля и вблизи границы первых слоев никеля и алюминия.
- Проведено исследование лазерной абляции в жидкость (на примере абляции золота в воду) в широком диапазоне длительностей лазерных импульсов от фемто- до наносекундного диапазона.

Впервые корректно объяснено образование наночастиц золота в воде в результате развития неустойчивости Рэлея—Тейлора на границе воды и оторвавшегося слоя золота (в случае коротких лазерных импульсов) и при конденсации золота, продиффундировавшего в воду при контакте сверхкритических воды и золота (при длинных импульсах) Научная новизна: Все результаты, выносимые на защиту, являются новыми. В ряде случаев они обобщают результаты, полученные ранее другими авторами — в таких случаях сопоставление с предыдущими результатами подробно обсуждается в тексте и даются необходимые ссылки. Такое сопоставление одновременно подтверждает достоверность представленных результатов.

Достоверность полученных результатов обеспечивается надёжностью применявшихся методов, согласием с результатами, полученными в других работах, и согласием с данными физических и численных (МД) экспериментов, выполненных соавторами публикаций и другими авторами.

Практическая значимость. Построенная в работе модель 2*T*—гидродинамики необходима для корректного описания процессов в веществе мишеней при воздействии ультракоротких лазерных импульсов. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации условий при различных применениях лазерных технологий, в частности лазерной обработке материалов, включая лазерную абляцию и лазерное упрочнение поверхности, получением взвеси наночастиц металла в жидкости (золота в воде) при лазерной абляции в жидкость.

Основным **методом исследования** является построение и использование теорфизической модели и расчетной схемы 2T—гидродинамики, ее расширение для учета необходимых для исследования рассматриваемых вопросов дополнительных эффектов. Важным методом является комбинация 2T гидродинамики с проводимым на основе ее результатов МД—моделированием.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на: Международных конференциях по уравнениям состояния вещества (International Conference on Equations of State for Matter), по физике экстроемальных состояний вещества (Physics of Extreme States of Matter) и по взаимодействию мощных потоков энергии с веществом (International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter) Эльбрус – 2010–2024, Kaбардино-Балкария, Россия, 19th EUROPEAN CONFERENCE ON FRACTURE, European Structural Integrity Society (ESIS), 2012, 26-31 августа 2012, Казань, Россия, 18th Biennial Intl. Conference of the APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter, Seattle, Washington, USA, July 7-12, 2013, 19th — June 14–19, 2015; Tampa, Florida, 12-th International Conference on Laser Ablation COLA-2013, October 6-11, 2013, Ishia, Italy, 9th International Conference on Photo-Excited Processes and Applications September 30 – October 3, 2014 Matsue, Japan, The Seventh International EMMI Workshop on Plasma Physics

14

with Intense Heavy Ion and Laser Beams at FAIR December 9-10, 2014, Moscow, Russia, International Symposium "Fundamentals of Laser Assisted Micro- and Nanotechnologies" (FLAMN-16) June 27- July 01, 2016, St. Petersburg, Pushkin, Russia, 5-th International Conference on Advanced Nanoparticle Generation and Excitation by Lasers in Liquids (ANGEL-2018) June 3-7 2018, Lion, France, V Международной конференции «Лазерные, плазменные исследования и технологии» Лаплаз-2019 12 февраля по 15 февраля 2019 и конференциях Landau days 2013, 2015, 2016

Личный вклад. Автором разработана модель и расчетная схема 2*T* гидродинамики. Во всех совместных публикациях автором проведено моделирование начальной 2*T*—стадии, по результатам которого, при необходимости, проводилось МД—моделирование. Автор принимал активное участие на всех этапах обсуждения постановки задачи и анализа полученных результатов.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 35 статьях в рецензируемых журналах, индексируемых Web of Science: Core Collection, и(или) Scopus (O1) и 7 статьях в сборниках конференций (O2).

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 5 глав, и заключения. Полный объём диссертации составляет 220 страниц, включая 113 рисунков. Список литературы содержит 184 наименования.

Во введении на основе обзора современного состояния экспериментальных и теоретических исследований воздействия ультракоротких лазерных импульсов на твердые мишени, в том числе с использованием численного моделировиния, (0.1) обоснована актуальность темы диссертации, (0.2) сформулирована цель работы, и (0.3) перечислены основные результаты, (0.4) охарактеризована новизна и практическая ценность развитых методов и полученных результатов, а также раскрыто содержание диссертации по главам.

В главе 1 (публикации O1:1, O2:1) рассмотрено построение двухтемпературной (2*T*) гидродинамики (2*T*ГД) и ее применение для описания воздействия ультракоротких (фемто- пикосекундной длительности) лазерных импульсов (УКЛИ) на объемные металлические мишени.

В разделе 1.1.1 на основе двухтемпературной модели С.И. Анисимова и др. [3], дополненной лагранжевой гидродинамикой [65, глава VIII, §2], построена система основных уравнений  $2T\Gamma Д$  и рассмотрены необходимые для ее замыкания уравнения состояния электронной и ионной подсистем (1.1.2) и кинетические коэффициенты (теплопроводности и электрон—ионного теплообмена) (1.1.3) для различных металлов.

Далее в главе рассмотрено применение 2*T*ГД в случае простейшей геометрии задачи — воздействии лазерных импульсов на объемную (занимающую полупространство) металлическую мишень.

Рассмотрены нагрев мишени ультракоротким лазерным импульсом (1.2) и движение возникающих тепловой и акустической волн вглубь вещества (1.3). При этом проанализировано (1.3.1) принципиальное отличие плавления в 2T случае от рассматриваемого обычно (при бо̀льших характерных временах). Вместо движения фронта плавления имеется гомогенное плавление по мере подтягивания ионной температуры  $T_i$  к распространившейся на большую глубину на 2T—стадии электронной температуре  $T_e$ .

При отражении волны сжатия на свободной поверхности возникает волна растяжения, следующая вглубь мишени за волной сжатия (1.3.2). При достаточно большой поглощенной энергии  $F_{\rm abs} > F_{\rm abl}$  растягивающее напряжение может превысить прочность вещества, что приводит к его разрыву — абляции, как это рассмотрено в разделе 1.4.

Абляция является существенно неравновесным процессом, не описываемым в рамках гидродинамики. В наших работах [37; 40; 41; 66; 67, (O1:1:1–3, O2:1:1)] и последующих такая абляция была исследована с помощью комбинированной схемы —  $2T\GammaД$  расчет начальной стадии и МД—моделирование (В.В. Жаховским), использующее результаты  $2T\GammaД$  при задании начальных условий. Если не требуется детальное описание, которое дает МД—моделирование, а достаточно грубых обобщающих характеристик, как порог абляции  $F_{abl}$ , момент и глубина разрыва, толщина оторвавшегося слоя и глубина оставшегося кратера, их можно получить в рамках гидродинамики, дополнив схему критерием разрыва 1.4.1. Такое рассмотрение проведено в разделе 1.4.2.

Глава 2 (публикации O1:2, O2:2) посвящена изучению откольной абляции диэлектриков под действием ультракоротких импульсов рентгеновского диапазона (жесткого ультрафиолета). В отличие от рассмотренных в главе 1 металлов, в диэлектриках при низкой (комнатной) температуре практически отсутствуют электроны проводимости, но они возбуждаются рентгеновским излучением. Это делает необходимым расширить модель 2T—гидродинамики включением в нее уравнения динамики степени ионизации (плотности числа электронов в зоне проводимости) при возбуждении электронов в прозрачном диэлектрике под действием рентгеновских импульсов, и зависимости от нее электронных составляющих энергии и давления (2.1).

В главе 3 (публикации O1:3, O2:3) рассматривается воздействие УКЛИ на мишени конечной толщины и анализируется прохождение акустических и ударных волн через мишень и их выход на тыльную поверхност. Для получения правильных скоростей таких волн рассмотренную в главе 1 2*T*ГД необходимо дополнить (3.1) учетом в гидродинамике действия упругих сдвиговых напряжений в твердом веществе, которые возникают и при одноосной деформации, и их исчезновения при плавлении. При этом было показано, что в УВ, возникающей при воздействии короткого лазерного импульса, вещество остается упругим при давлении в УВ, значительном превышающем классический порог упругости наблюдаемые в экспериментах скорости движения сильных УВ соответствуют УВ в упругом веществе (3.2).

Глава 4 (публикации O1:4, O2:4) посвящена описанию воздействия УКЛИ на мишени, состоящие из слоев веществ с существенно различными свойствами: металлические пленки на стеклянных подлжках, нанонламинаты из чередующихся тонких слоев различных металлов.

В разделе 4.1 рассмотрены особенности использования лагранжевой гидродинамики при наличии слоев веществ с разными УРС, начальной плотностью и коэффициентами теплопроводности и электрон—ионного теплообмена.

В последующих разделах исследованы колебания пленки на подложке при небольших поглощенных энергиях ( $F_{\rm abs} < F_{\rm del} - 4.2.1$ ), ее отслоение от подложки и разрыв в пленке при увеличении поглощенной энергии ( $F_{\rm del} < F_{\rm abs} - 4.2.2$ ).

Воздействие УКЛИ на многослойную мишень исследуется на примере наноламината из чередующихся тонких слоев никеля и алюминия (4.3, 4.3.1). Рассмотрены особенности нагрева наноламината поглощаемым лазерным импульсом, связанные с значительным различием термодинамических свойств (теплоемкостей) никеля и алиминия (4.3.2, 4.3.3), разрыв в первом слое никеля при превышении первого порога ( $F_{abs} > F_{abl1} - 4.3.4$ ) и увеличение поглощенной энергии до второго порога (4.3.5).

Особым случаем ситуации, когда при воздействии лазерного излучения на мишень необходимо учитывать слои двух веществ с существенно разными свойствами (рассмотренной в главе 4) является лазерная абляция в жидкость (ЛАЖ), которой посвящена **Глава 5** (публикации O1:5). Конкретно рассматривается абляция золота в воду. Кроме теоретического интереса ЛАЖ представляет определенные преимущества, по сравнению с другими методами получения коллоидных наночастиц, хотя имеет и свои недостатки.

Особое внимание уделено ЛАЖ при воздействии УКЛИ ( $F_{abs}$  = 400 мДж/см<sup>2</sup>,  $\tau_L$  = 0.1 пс), расмотренная в разделе 5.1. В отличие от случая с нагревом со стороны свободной поверхгости, рассмотренного в главе 1, вода не дает свободно разлетаться испаренному (оторвавшемуся) золоту, в результате чего на поверхности раздела формируется «атмосфера» из золота, относительно большой плотности, на которую налетают более глубокие слои золота (подобно акреции) (5.1.2). Поскольку вода тормозит поверхность раздела в неинерциальной системе отсчета это соответствует тому, что тажелая жидкость (золото) располагается поверх легкой (воды). Это создает условия развития неустойчивости Рэлея—Тейлора (НРТ) (5.1.4, 5.1.5).

Такой механизм образования наночастиц залота в воде наизолее существенен при воздействии коротких лазерных импульсов. При воздействии импульсов большей энергии и большей длительности (5.3) становится существенно, что в результате нагрева не только вода, но и золото вблизи их границы становится сверхкритическим флюидом (5.3.3). Это приводит к свободной взаимной диффузии золота и воды (в лагранжевой гидродинамике диффузия отсутствует, она только указвает на возникновение условий для нее). При остывании пара золота в воде образуются наночастицы меньших размеров, чем в результате HPT.

Проанализирована смена режимов возникновения наночастиц металла пленки, приводящих к образованию частиц различных размеров при увеличении длительности лазерных импульсов.

# Глава 1. Воздействие ультракоротких лазерных импульсов на объемные металлические мишени (O1:1, O2:1)

#### 1.1 Двухтемпературная гидродинамика

Как обсуждалось во введении (см. 0.1), благодаря большой разнице масс электронов и атомов, электрон-электронная и ион-ионная (фононная) релаксация в металлах происходит значительно быстрее, чем электрон-ионная релаксация (см., например, [1]). На самых ранних стадиях необходимо кинетическое описания распределения фотовозбужденных электронов [23; 68; 69]. Далее наступает стадия, на которой электронную и ионную подсистемы можно описывать как две квазиравновесные подсистемы, каждая со своей температурой: T<sub>e</sub> и T<sub>i</sub> соответственно. Переход, после которого устанавливается фермиевское распределение электронов с температурой T<sub>e</sub>, требует определенного времени. Это время порядка обратной частоты электрон-электронных столкновений. Указанная частота растет, примерно, как квадрат электронной температуры, поскольку время свободного пробега между электрон-электронными столкновениями,  $\tau_{e-e} \propto 1/T_{\rm e}^2$  [70] и убывает с поглощенной энергией  $F_{\rm abs}$ . Дело в том, что  $au_{e-e} \propto 1/E_{
m e}$ , где энергия электронов при не слишком больших температурах  $E_{\rm e} \propto T_{\rm e}^2$ . Оценки [71; 72] показывают, что, если поглощенная за время ультракороткого импульса энергия превышает величину порядка 1 мДж/см<sup>2</sup>, то установление фермиевского распределения в металле происходит за время порядка длительности рассматриваемых далее импульсов ~ 0.1 пс. В рассматриваемых ниже задачах поглощенные энергии существенно превышают значение 1 мДж/см<sup>2</sup>. Это позволяет с самих ранних стадий на промежуточных временах  $au_{ee}, au_{ii} \ll t \ll au_{ei}$  описывать состояние вещества как квазиравновесное, считая, что электронная (электронов проводимости) и ионная (фононная) подсистемы металла имеют установившиеся температуры T<sub>e</sub> и T<sub>i</sub>, но эти температуры могут не совпадать [2;3]. Для описания такой ситуации, возникающей при воздействии ультракоротких (пикосекундных) лазерных импульсов на металлическую мишень, приводящем к эмиссии электронов с их поверхности, в работе С.И. Анисимова и др. [3] впервые была успешно применена двухтемпературная (2T) модель. В такой модели тепловой баланс в электронной

и ионной подсистемах описывается отдельными уравнениями (см. (1), [3, система уравнений (2)]). В работе [3] 2T-термодинамика рассмотрена на фоне неподвижного вещества. При не слишком малых поглощенных энергиях излучения и при электрон—ионной релаксации не очень быстрой по сравнению со временами, когда становится существенным движение вещества мишени, такую 2T тепловую задачу необходимо рассматривать совместно с уравнениями движения (уравнениями гидродинамики) в единой двухтемпературной гидродинамике ( $2T\Gamma Д$ ) [37, (O1:1:1)].  $2T\Gamma Д$  подход [3; 37, (O1:1:1)] применим и при бо́льших временах. При этом на больших временах, как правило, различие 2Tи 1T становится исчезающе малым, и 1T рассмотрение может быть предпочтительнее, как более простое и менее затратное.

#### 1.1.1 Основные уравнения двухтемпературной гидродинамики

Предположим, что в пространстве двух температур можно ввести координаты, ортогононализующие свободную энергию, т.е. она разбивается на сумму слагаемых, каждое из которых зависит только от одной из температур (см. [73, (O1:4:21)])

$$\tilde{F}(\rho, T_1, T_2) = \tilde{F}_1(\rho, T_1) + \tilde{F}_2(\rho, T_2).$$
(1.1)

Соответственно разбиваются внутренняя энергия  $\tilde{E} = \tilde{E}_1(\rho, T_1) + \tilde{E}_2(\rho, T_2)$  и давление  $P = P_1(\rho, T_1) + P_2(\rho, T_2)$ . Тогда в уравнении теплового баланса с учетом внешнего источника тепла Q

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{E}}{\mathrm{d}t} + \nabla \mathbf{Q}_T + P \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = Q,$$

подставляя разбиение (1.1), в том числе разбивая тепловой поток, связанный с теплопроводностью  $Q_T$  на составляющие, связанные с каждой из подсистем  $\mathbf{Q}_T = \kappa_1 \nabla T_1 + \kappa_2 \nabla T_2$ , а изменение объема V считая общим (двухтемпературное одножидкостное приближение)

$$\frac{\mathrm{d}(\tilde{E}_1 + \tilde{E}_2)}{\mathrm{d}t} + \nabla(\kappa_1 \nabla T_1 + \kappa_2 \nabla T_2) + (P_1 + P_2)\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = Q,$$

можно собрать отдельно члены, зависящие от одной и от другой температур:

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{E}_{1}}{\mathrm{d}t} + \nabla(\kappa_{1}\nabla T_{1}) + P_{1}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}\tilde{E}_{2}}{\mathrm{d}t} + \nabla(\kappa_{2}\nabla T_{2}) + P_{2}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = Q.$$

$$(1.2)$$

Слагаемые в верхней строке (1.2) не зависят от температуры  $T_2$ , а в нижней строке от температуры  $T_1$ , кроме, возможно, зависимости от обеих температур коэффициентов теплопроводности  $\kappa_1$ ,  $\kappa_2$ . Это позволяет разбить уравнение теплового баланса на два, отдельно для каждой подсистемы, введя дополнительно, теплообмен между подсистемами  $Q_{1-2}$ 

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{E}_1}{\mathrm{d}t} + \nabla(\kappa_1 \nabla T_1) + P_1 \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = -Q_{1-2} + Q$$
$$\frac{\mathrm{d}\tilde{E}_2}{\mathrm{d}t} + \nabla(\kappa_2 \nabla T_2) + P_2 \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = Q_{1-2}.$$

Внешний нагрев отнесен к одной подсистеме. В металлах энергия лазерного излучения поглощается электронами.

Надо отметить, что добавка к термодинамическим (ТД) функциям каждой из подсистем вклада, не зависящего от соответствующей температуры, и удовлетворяющего ТД тождеству  $d\tilde{E} = -P \, dV$ , тождественно сокращается в уравнении теплового баланса этой подсистемы. Если такой не зависящий от обеих температур (холодный) вклад добавить к одной из подсистем и вычесть из другой, и уравнения теплового баланса, и суммарные величины, входящие в уравнения гидродинамики, тождественно сохранятся.

Удобно ТД параметры одной из подсистем, для определенности возьмем 1, отсчитывать от состояния, с соответствующей температурой равной нулю. Это всегда можно сделать, так как при любом выборе  $\tilde{F}_1^{(0)}(\rho, T_1)$  можно перейти к  $\tilde{\tilde{F}}_1 = \tilde{F}_1^{(0)}(\rho, T_1) - \tilde{F}_1^{(0)}(\rho, 0)$ , а «холодный» вклад добавить к другой подсистеме  $\tilde{\tilde{F}}_2 = \tilde{F}_2^{(0)}(\rho, T_2) - \tilde{F}_1^{(0)}(\rho, 0)$ . Как сказано выше все уравнения при этом тождественно сохраняются. Тогда по определению  $\tilde{F}_2 = \tilde{F}(\rho, 0, T_2)$  не зависит от  $T_1$ , и для выполнения условия ортогональности (1.1) остается требование, чтобы  $\tilde{F}_1 = \tilde{F} - \tilde{F}_2 = \tilde{F}(\rho, T_1, T_2) - \tilde{F}(\rho, 0, T_2)$  с достаточной точностью не зависело от  $T_2$  во всей интересующей области параметров состояния вещества.

Как уже отмечалось, «равновесные» электронная и ионная температуры с хорошей точностью являются ортогональными. При моделировании уравнений состояния (УРС) веществ обычно используется разложение  $\tilde{F} = \tilde{F}_0(\rho) +$   $\tilde{F}_{i}(\rho, T_{i}) + \tilde{F}_{e}(\rho, T_{e})$ , при этом каждая из составляющих считается независимой [53; 56; 57; 74–76]. Холодную составляющую можно включить в любую из подсистем, обычно удобнее бывает включить в ионную  $\tilde{F}_{i} = \tilde{F}_{0}(\rho) + \tilde{F}_{i}(\rho, T_{i})$ , а электронный вклад отсчитывать от состояния с нулевой электронной температурой. В считающемся сейчас наиболее надежном подходе к расчету электронных свойств металлов с использованием матрицы плотности (DFT), как, например, VASP [77; 78], расчет электронной структуры ведется на фоне неподвижных ионов.

Иногда говорится, что при больших температурах и сжатиях тяжелых металлов возможна зависимость электронных свойств от ионной температуры или ионных свойств от электронной температуры. Скорее всего при этом во многих случаях можно слегка переопределить ионную и электронную температуры, чтобы они стали ортогональными. Во всяком случае, для веществ, давлений и температур, которые будут рассматриваться ниже, эта проблема отсутствует, и дальше будут рассматриваться электронная и ионная подсистемы, предполагая, что электронная и ионная температуры с достаточной точностью ортогональны во всей интересующей области.

Сказанное выше относится, строго говоря, к металлам в однофазном состоянии. Двухфазное состояние — область плавления, испарения — в двухтемпературном случае достаточно аккуратно не рассматривалось. В однотемпературном случае сосуществующие фазы находятся в тепловом и механическом равновесии — одна температура и равное давление при разной плотности. В 2T случае механическое равновесие очевидно должно сохраняться — полное давление в обеих фазах должно совпадать, нет оснований предполагать, что могут различаться температуры электронных подсистем, и, по—видимому, температуры ионных подсистем тоже должны совпадать. Поскольку при большей плотности электронное давление растет с ростом температуры несколько сильнее, это должно приводить к некоторому сдвигу равновесия в сторону менее плотной фазы.

При плавлении плотность металлов изменяется, как правило, не сильно, квантово—механические (DFT) расчеты электронных свойств металлов указывают на то, что при таких плотностях зависимость электронного давления от плотности не сильная. Это позволяет пренебрегать ниже влиянием электронной температуры, и считать, что фазовое состояние вещества полностью определяется плотностью и ионной температурой. В 2T случае плавление происходит гомогенно по мере достижения достаточной температуры, зависящей, конечно, от плотности (подробнее см. 1.3.1). На больших временах 1T фронт плавления движется достаточно медленно. В связи с этим кинетикой плавления можно пренебречь, и считать фазовый состав соответствующим мгновенным значениям температуры и плотности.

В рассматриваемых ниже задачах нагрев вещества не настолько велик, чтобы температуры в плазме испаренного факела достигали величин, при которых электронное давление при газовой плотности является значительным. Поэтому и при испарении влияние электронной температуры на фазовое состояние учитываться не будет.

Кинетика испарения может приводить к неустойчивости плоского фронта испарения [79;80], однако характерное время развития такой неустойчивости велико (порядка миллисекунд), и при рассматриваемых ниже масштабах времен она не существенна. Ниже всегда будет считаться, что кинетика испарения определяется давлением в испаренном и в конденсированном веществе (полным), и фазовое состояние так же, как и в других областях, полностью определяется плотностью и ионной температурой.

Подчеркнем еще раз, что, строго говоря, ортогональность электронной и ионной температур (малость перекрестных членов), должна с достаточно хорошо выполнятся во всей рассматриваемой области температур и плотностей.

С учетом уравнений движения полная система 2*T* гидродинамики имеет вид (см., например, [41, (O1:1:2)])

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} &= 0, \\ \rho \frac{\mathrm{d}\vec{v}}{\mathrm{d}t} &= -\nabla P, \qquad P = P_{\mathrm{e}} + P_{\mathrm{i}} \\ \frac{\mathrm{d}\tilde{E}_{\mathrm{e}}}{\mathrm{d}t} + \nabla(\kappa_{\mathrm{e}}\nabla T_{\mathrm{e}}) &= -P_{\mathrm{e}}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} - Q_{\mathrm{e-i}} + Q \\ \frac{\mathrm{d}\tilde{E}_{\mathrm{i}}}{\mathrm{d}t} + \nabla(\kappa_{\mathrm{i}}\nabla T_{\mathrm{i}}) &= -P_{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} + Q_{\mathrm{e-i}}, \end{aligned}$$

где полная производная по времени  $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\nabla$ ,  $\vec{v}$  – скорость вещества,  $\rho = 1/V$  – плотность вещества.

Теплообмен между электронной и ионной подсистемами будет записываться в виде

$$Q_{e-i} = \tilde{\alpha}(\rho, T_{\rm e})(T_{\rm e} - T_{\rm i}). \qquad (1.3)$$

При исследовании воздействия ультракоротких лазерных импульсов наибольшее значение имеют две стадии. Во-первых, это короткая по времени, но задающая ход процесса, что проявляется и на больших временах, существенно двухтемпературная стадия. На этой стадии  $T_e \gg T_i$ , и пренебрегая малой  $T_i$  по сравнению с  $T_e$  имеем  $Q_{e-i}(T_e, T_i) \approx Q_{e-i}(T_e, 0)$ . Полагая  $\alpha(T_e) = Q_{e-i}(T_e, 0)/T_e$ получаем  $Q_{e-i}(\rho, T_e, T_i) \approx \alpha(\rho, T_e)T_e \approx \alpha(\rho, T_e)(T_e - T_i)$ , что соответствует (1.3). После завершения двухтемпературной стадии динамика длительное время продолжается как практически однотемпературная с  $|T_e - T_i| \ll (T_e \approx T_i)$ , и снова можно написать  $Q_{e-i} \approx \alpha(T_e)(T_e - T_i)$ . Более аккуратно можно показать, что выражение (1.3) справедливо всегда, когда электронная и ионная температуры велики по сравнению с температурой Дебая [81]<sup>1</sup>, что всегда выполняется в рассматриваемых ниже случаях.

За время двухтемпературной стадии глубина, на которую успевают пройти тепловые возмущения (глубина прогретого слоя), как правило, не превышает сотни нанометров, и, хотя в приповерхностном слое могут уже

$$\Phi = f(\mathbf{p})(1 - f(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + N(\mathbf{q})(f(\mathbf{p})(1 - f(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - f(\mathbf{p} - \mathbf{q})(1 - f(\mathbf{p})))$$

Здесь

И

$$f(\mathbf{p}) = \frac{1}{\exp \frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu}{k_{\rm B} T_{\rm e}} + 1}$$
$$N(\mathbf{q}) = \frac{1}{\exp \frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{k_{\rm B} T_{\rm i}} - 1}$$

 соответственно электронная и фононная функции распределения. Подставляя в статистический фактор эти выражения для функций распределения, мы получаем статфактор в виде

$$\Phi = \frac{\exp\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{i}}}}{\exp\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{i}}} - 1} \left(\exp\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{i}}} - \exp\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}}\right) \frac{\exp\frac{\varepsilon(\mathbf{p})-\mu}{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}}}{\exp\frac{\varepsilon(\mathbf{p})-\mu}{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}} + 1} \frac{1}{\exp\frac{\varepsilon(\mathbf{p})-\mu-\hbar\omega(\mathbf{q})}{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}} + 1}.$$

При выполнении неравенства  $k_{\rm B}T_{\rm i} > \hbar\omega$  (для этого достаточно, чтобы ионная температура была больше или порядка дебаевской), раскладывая фононную функцию распределения в ряд, получаем  $\Phi$  в виде

$$\Phi = \frac{\exp\frac{\epsilon(\mathbf{p})-\mu}{k_{\rm B}T_{\rm e}}}{\exp\frac{\epsilon(\mathbf{p})-\mu}{k_{\rm B}T_{\rm e}}+1} \frac{1}{\exp\frac{\epsilon(\mathbf{p})-\mu-\hbar\omega(\mathbf{q})}{k_{\rm B}T_{\rm e}}+1} \frac{T_{\rm e}-T_{\rm i}}{T_{\rm e}}$$

и, следовательно, в  $Q_{e-i}$  ионная температура входит только в множителе  $(T_e - T_i)$ 

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Выражение для скорости передачи энергии при рассеянии электронов фононами содержит статистический фактор как следствие принципа Паули для электронов и спонтанного и вынужденного излучения и поглощения фононов. Только этот статистический фактор зависит от температуры ионов. Когда фонон с импульсом **q** рождается в результате  $\mathbf{p} \to \mathbf{p} - \mathbf{q}$  рассеяния электрона с импульсом **p**, статистический фактор есть

возникать заметные скорости, масштаб гидродинамических возмущений еще меньше. Характерные поперечные размеры (диаметр лазерного пятна) даже при остросфокусированном излучении значительно больше, как правило больше десятков микрометров. Это позволяет описывать 2T стадию в одномерном (1D) приближении, считая все величины зависящими только от одной пространственной координаты, перпендикулярной поверхности мишени, в этом приближении плоской.

В численном моделировании 1D рассмотрение имеет большое преимущество, так как позволяет описывать гидродинамику с помощью хорошо разработанной эффективной схемы в координатах Лагранжа (массовых) [65, глава VIII, §2], а тепловые уравнения становятся трехдиагональными линейными уравнениями, эффективно решаемыми с помощью прогонки [65, глава VIII, [§1]. При постоянных коэффициентах прогонка дает сразу точное решение, причем это сохраняется в 2T схеме, если отсутствует теплопроводность в одной из подсистем (ионная (фононная) теплопроводность, как правило, пренебрежимо мала). При учете переменности входящих в уравнение теплового баланса коэффициентов — зависимости теплоемкостей и, особенно, теплопроводности от температур, а в 2Т случае взаимного влияния подсистем через теплообмен между ними, зависимости всех параметров от плотности при учете гидродинамики — наиболее удобной [65] является итерационная схема, в которой величины входящих в уравнения коэффициентов рассчитываются по предыдущей итерации. Существенно, что при этом сохраняется консервативность схемы. Дальше всегда будет использоваться такая схема.

Если начальная плотность постоянна ( $\rho^0$ ), в качестве лагранжевого параметра можно взять начальную (невозмущенную) координату  $x^0$ . Тогда система уравнений 2T гидродинамики примет вид (см. [67;82, (O1:1: 3, O1:1: 8), (5)–(9)]):

*(* 0

$$\frac{\partial x(x^0,t)}{\partial t} = v(x^0,t), \qquad (1.4)$$

$$\rho \frac{\partial x(x^0, t)}{\partial x^0} = \rho^0, \tag{1.5}$$

$$\frac{\partial v(x^0, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\rho^0} \frac{\partial P(x^0, t)}{\partial x^0}, \qquad P = P_{\rm e} + P_{\rm i}, \tag{1.6}$$

$$\frac{\partial E_{\rm e}(x^0,t)}{\partial t} = \frac{1}{\rho^0} \frac{\partial}{\partial x^0} \left( \frac{\kappa_{\rm e}\rho}{\rho^0} \frac{\partial T_{\rm e}}{\partial x^0} \right) - \frac{P_{\rm e}}{\rho^0} \frac{\partial v}{\partial x^0} - \alpha (T_{\rm e} - T_{\rm i}) + \frac{Q(x^0,t)}{\rho}, \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial E_{\rm i}(x^0,t)}{\partial t} = \frac{1}{\rho^0} \frac{\partial}{\partial x^0} \left( \frac{\kappa_{\rm i} \rho}{\rho^0} \frac{\partial T_{\rm i}}{\partial x^0} \right) - \frac{P_{\rm i}}{\rho^0} \frac{\partial v}{\partial x^0} + \alpha (T_{\rm e} - T_{\rm i}), \qquad (1.8)$$

где  $E_{\rm e} = \tilde{E}_{\rm e}/\rho$ ,  $E_{\rm i} = \tilde{E}_{\rm i}/\rho$ ,  $\alpha = \tilde{\alpha}/\rho$  – удельные (на 1 массы) электронная и ионная энергии и коэффициент электрон—ионного теплообмена. Ниже всегда будут использоваться именно удельные величины. Здесь (1.4) — уравнение кинематики, (1.5) — уравнение сохранения массы (непрерывности), которое в координатах Лагранжа сводится к определению текущей плотности, (1.6) закон сохранения импульса (уравнение движения Эйлера — расплавленные металлы с хорошей точностью можно считать идеальными жидкостями), (1.7) и (1.8) — закон сохранения энергии (теплового баланса) отдельно для электронной и ионной подсистем. Система замыкается уравнениями состояния вещества (УРС, EOS) и формулами для коэффициентов теплопроводности и электронионного теплообмена.

## 1.1.2 Уравнения состояния

## Уравнения состояния электронной подсистемы

Как отмечалось выше, разделение уравнения состояния (УРС) на электронную и ионную составляющие определено с точностью до «холодного» вклада, зависящего только от плотности, и удобно определить электронный вклад так, чтобы от занулялся при нулевой температуре  $T_{\rm e} = 0$ .

В самом грубом приближении электронная подсистема является газом Ферми электронов в зоне проводимости. УРС для электронов, имеющее асимптотику, соответствующую Ферми—газу при низких температурах  $k_{\rm B}T_{\rm e} \ll e_{\rm F}$ , и выходящее на идеальный газ при высоких  $k_{\rm B}T_{\rm e} \gg e_{\rm F}$ , где  $k_{\rm B}$ —постоянная Больцмана,  $e_{\rm F}$ — энергия Ферми, можно записать как [37, (O1:1:1), (2.4)]

$$E_{\rm e} = 1 \left/ \sqrt{\left(\frac{\gamma T_{\rm e}^2}{2}\right)^{-2} + (c_{\rm cl} T_{\rm e})^{-2}}, \qquad P_{\rm e} = \frac{2}{3} E_{\rm e} \rho, \tag{1.9}$$

где

$$c_{\rm cl} = \frac{3}{2} k_{\rm B} Z/m_{\rm at}, \qquad \gamma = \frac{\pi^2}{2} k_{\rm B}^2 \frac{Z}{m_{\rm at}} \Big/ \epsilon_{\rm F}, \qquad \epsilon_{\rm F} = \frac{\hbar^2}{2m_{\rm e}} (3\pi^2 n_{\rm e})^{2/3}, \qquad (1.10)$$

 $n_{\rm e} = Z n_{\rm at}$ , плотность числа атомов  $n_{\rm at} = \rho/m_{\rm at}$ ,  $m_{\rm at}$  — масса атома, Z — число электронов атома в зоне проводимости,  $m_{\rm e}$  — масса электрона. Здесь внутренняя энергия электронов  $E_{\rm e}$  удельная, на единицу массы.

Формула (1.9) или ее вариант

$$c_{\rm e} = 1 / \sqrt{(\gamma T_{\rm e})^{-2} + c_{\rm cl}^{-2}}, \qquad E_{\rm e} = \frac{c_{\rm cl}}{\gamma} \left( \sqrt{(\gamma T_{\rm e})^2 + c_{\rm cl}^2} - c_{\rm cl} \right)$$
(1.9*a*)

хорошо описывает электронную подсистему алюминия как простого металла с зоной проводимости, отделенной от валентных зон широкой щелью, но теряет применимость в случае металлов других групп.

В расчете на единицу объема (1.9а) дает

$$c_{\rm e, V} = 1 \left/ \sqrt{c_{\rm deg, V}^{-2} + c_{\rm cl, V}^{-2}} \right|, \qquad c_{\rm deg, V} = \left(\frac{\pi^2}{2} n_{\rm e} k_{\rm B}^2 / \varepsilon_{\rm F}\right) T_{\rm e}, \quad c_{\rm cl} = \frac{3}{2} k_{\rm B} n_{\rm e}.$$
 (1.11)

Для золота ( [82, (O1:1:8)]), следуя [22], можно электронную энергию на атом при небольших температурах записать как энергию вырожденного Фермигаза с температурными поправками [22, (9), (10)]

$$e_{\rm low}(n_{\rm at}, T_{\rm e}) = ze_{\rm F} \left[ \frac{\pi^2}{4} \left( \frac{k_{\rm B}T_{\rm e}}{e_{\rm F}} \right)^2 - \frac{3\pi^4}{80} \left( \frac{k_{\rm B}T_{\rm e}}{e_{\rm F}} \right)^4 \right].$$

Обозначая  $n_{\rm at}/n_{\rm at,0} = \rho/\rho^0 = x$ , где  $n_{\rm at,0}, \rho^0$  — плотность числа атомов, плотность вещества при нормальных условиях, с учетом того, что согласно DFT расчетам [22]  $e_{\rm F} \propto n_{\rm at} \propto x$ , и вводя коэффициенты  $e_2, e_4$ , аппроксимируем низкотемпературную электронную внутреннюю энергию выражением

$$e_{\rm low}(n_{\rm at},t) = e_{\rm F}^0 \left( e_2 \frac{t^2}{x} + e_4 \frac{t^4}{x^3} \right), \qquad t = 2 \frac{k_{\rm B} T_{\rm e}}{e_{\rm F}^0},$$
(1.12)

где  $e_{\rm F}^0$  — энергия Ферми при нормальных условиях  $e_{\rm F}^0 = e_{\rm F}(x=1)$ .

Аналогично для электронного давления в золоте

$$\frac{p_{\rm low}}{zn_{\rm at}e_{\rm F}} = \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{k_{\rm B}T_{\rm e}}{e_{\rm F}}\right)^2 - \frac{\pi^4}{40} \left(\frac{k_{\rm B}T_{\rm e}}{e_{\rm F}}\right)^4,$$

и аппроксимационное выражение с параметрами  $p_2, p_4$  [22, (11), (12)]

$$p_{\text{low}}(x,t) = p^0 \left( p_2 t^2 + p_4 \frac{t^4}{x^2} \right),$$
 (1.13)

где  $p^0 = n_{\rm at,0} e_{\rm F}^0$ .

При высоких температурах электронный газ постепенно становится невырожденным. В этом случае аппроксимацию для энергии и давления можно записать как [22, (13), (14)]

$$\frac{e_{\text{high}}(x,t)}{e_{\text{F}}^{0}e_{1}t^{1+\delta_{e}}} = z_{0} + \frac{1-z_{0}-z_{2}}{x^{m_{1}}} + \frac{z_{2}}{x^{m_{2}}}, \qquad (1.14)$$

$$\frac{p_{\text{high}}(x,t)}{p^0 p_1 t^{1+\delta_p}} = y_0 + (1 - y_0 - y_2) x^{k_1} + y_2 x^{k_2}.$$
(1.15)

Комбинируя аппроксимации (1.12), (1.13) для низких и (1.14), (1.15) для высоких температур, и переходя к удельной (на 1 массы) энергии, окончательно

$$E_{\rm e}(\rho, T_{\rm e}) = \left(e_{\rm low}(x, t)^{-1} + e_{\rm high}(x, t)^{-1}\right)^{-1} / m_{\rm at}, \qquad (1.16)$$

$$P_{\rm e}(\rho, T_{\rm e}) = \left( p_{\rm low}(x, t)^{-1} + p_{\rm high}(x, t)^{-1} \right)^{-1}, \qquad (1.17)$$
$$x = \rho/\rho^{0}, \qquad t = 2 \frac{k_{\rm B} T_{\rm e}}{e_{\rm F}^{0}}$$

Коэффициенты в уравнениях (1.12)–(1.15) подбираются по результатам численного расчета спектра электронных состояний с использованием теории функционала плотности (DFT) с помощью пакета VASP. Согласно [22] для золота в (1.16) ((1.12), (1.14)) для энергии  $e_2 = 1,13095$ ,  $e_4 = 86,7435$ ,  $e_1 = 2,33349$ ,  $z_0 = 0,880896$ ,  $z_2 = -0,0364397$ ,  $m_1 = 4,6121$ ,  $m_2 = 9,75613$ ,  $\delta_e = 0,730093$ ,  $e_{\rm F}^0 = 9,4$  eV =  $1,506 \times 10^{-18}$  Дж,  $e_{\rm F}^0/m_{\rm at} = 46$  кДж/г и в (1.17) ((1.13), (1.15)) для давления  $p_2 = 1,3279$ ,  $p_4 = 51,3404$ ,  $p_1 = 1,4515$ ,  $y_0 = -0,76568$ ,  $y_2 = -0,0274214$ ,  $k_1 = 0,311491$ ,  $k_2 = 5,1086$ ,  $\delta_p = 0,400865$ ,  $p_0 = 88,7466$  ГПа.

Формулы (1.12)-(1.17) использовались для вычисления электронных энергии и давления золота в [82, (O1:1:8)] и последующих работах.

Аналогично с использованием данных DFT—расчетов строятся электронные уравнения состояния и для других металлов. Так для переходных металлов (железа, никеля) в наших расчетах использовались формулы, аналогичной структуры, как (1.16), (1.17), но немного упрощенные:

$$E_{\rm e,tr} = \frac{KS}{K+S} \left(\frac{\rho}{\rho^0}\right)^{0.6} / \rho^0 \; \kappa \exists \mathsf{M} / \mathsf{\Gamma}, \qquad P_{\rm e,tr} = 1.1 \frac{KS}{K+S} \left(\frac{\rho}{\rho^0}\right)^{1.1} \; \mathsf{\Gamma} \Pi \mathsf{a}, \qquad (1.18)$$
$$K = \frac{\gamma}{2} T \mathsf{e}^2, \qquad S = S_0 T_{\rm e}^{1.3},$$

где 
$$T_{\rm e}$$
 в К,  $\rho^0 = 7.87$  г/см<sup>3</sup>,  $\gamma = 1077$ ,  $S_0 = 1.7 \times 10^{-4}$  для железа(1.19)  
 $\rho^0 = 8.9$  г/см<sup>3</sup>,  $\gamma = 1077$ ,  $S_0 = 1.275 \times 10^{-4}$  для никеля(1.20)

# Полные и ионные уравнения состояния

Как указывалось выше, в разделе 1.1.1, в двухтемпературной модели уравнения теплового баланса пишутся отдельно для электронной и ионной подсистем и, соответственно, используются отдельно электронное и ионное УРС. Однако эксперименты всегда дают данные о полном однотемпературном УРС. При расчете УРС с помощью численного моделирования фактически холодная составляющая, электронный тепловой вклад и ионный тепловой вклад считаются отдельно, но для сравнения с экспериментальными результатами в итоге сообщается полное однотемпературное УРС. Ионное УРС для двухтемпературной модели при этом является разностью полного однотемпературного и электронного

$$E_{\rm i}(\rho, T_{\rm i}) = E_{\rm EOS}(\rho, T_{\rm i}) - E_{\rm e}(\rho, T_{\rm i}),$$
  $P_{\rm i}(\rho, T_{\rm i}) = P_{\rm EOS}(\rho, T_{\rm i}) - P_{\rm e}(\rho, T_{\rm i}),$  (1.21)  
где  $E_{\rm EOS} = E_{1T}, P_{\rm EOS} = P_{1T}$  – задаваемые используемым однотемпературным  
уравнением состояния энергия и давление.

Удобной аналитической аппроксимацией УРС является уравнение Ми— Грюнайзена (калорическое уравнение) [83–85].

$$p - p_{\rm c} = \frac{\Gamma}{V} (E - E_{\rm c}), \qquad (1.22)$$

где  $V = 1/\rho$  – удельный объем,  $p_{\rm c}$  и  $E_{\rm c}$  – «холодные» давление и энергия, зависящие только от объема (плотности) удовлетворяют термодинамическому тождеству

$$p_{\rm c} = -\frac{\mathrm{d}E_{\rm c}}{\mathrm{d}V}.$$

Уравнение Ми-Грюнайзена является достаточно общим.

При  $p_{\rm c} = 0, E_{\rm c} = 0, \Gamma = {\rm const} = \Gamma_0$  оно переходит в уравнение состояния идеального газа; для одноатомного газа (испаренные металлы) коэффициент Грюнайзена  $\Gamma_0 = 2/3$ . Если при уменьшении плотности  $\rho \to 0$  также  $p_{\rm c} \to 0$ ,  $E_{\rm c} \to 0$ , можно говорить, что уравнение Ми—Грюнайзена выходит на асимптотику идеального газа, однако, строго говоря, и интервале между плотностями конденсированного (твердого) вещества, для которого уравнение выводится и «газовым пределом» применение его некорректно.

Уравнение Ван-дер-Ваальса

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = \mathbf{v}RT$$

можно записать в форме уравнения Ми-Грюнайзена, положив

$$p_{\rm c} = -\frac{a}{V^2}, \qquad E_{\rm c} = -\frac{a}{V}, \qquad \Gamma = \frac{\Gamma_0 V}{V - b}.$$

Холодные энергию и давление для металлов удобно записывать в виде разности двух степеней  $x_{\rm c} = \rho/\rho_{\rm c0} = V_{\rm c0}/V$  (см., например, [84–86])

$$E_{\rm c} = A \left( x_{\rm c}^a / a - x_{\rm c}^b / b \right),$$
 (1.23)

$$p_{\rm c} = -\frac{{\rm d}E_{\rm c}}{{\rm d}V} = (A/V_{\rm c0})x_{\rm c} \left(x_{\rm c}^a - x_{\rm c}^b\right), \qquad (1.24)$$

где  $\rho_{c0} = 1/V_{c0}$  это плотность, при которой холодное давление проходит через ноль,  $p|_{(\rho=\rho_{c0},T=0)} = 0$ ,  $A = B_{c0}V_{c0}/(a-b)$ ,  $B_{c0}$  это модуль объемного сжатия B = -V dp/dV при T = 0 и p = 0 ( $x_c = 1$ ).

Если используется температура, то тепловая часть свободной энергии  $E_T = E - E_c$  зависит только от температуры, для металлов обычно достаточным является приближение с постоянной теплоемкостью  $c_V = \text{const}, E_T = c_V T$ .

Для коэффициента Грюнайзена Г, связывающего тепловые добавки энергии и давления, обычно достаточно учесть зависимость от плотности.

Подобным образом можно записать УРС кварцевого стекла (К.В. Хищенко), используемого в качестве подложки для металлических пленок

$$E(\mathbf{\rho}, T) = F_c(\mathbf{\rho}) + E_a(\mathbf{\rho}, T), \qquad (1.25)$$

где холодная кривая

$$F_c(\mathbf{\rho}) = \frac{B_{0c}V_{0c}}{m \,\check{}\,n} \left(\frac{\mathbf{\sigma}_c^m}{m} - \frac{\mathbf{\sigma}_c^n}{n}\right) + E_{sub}, \qquad \mathbf{\sigma}_c = V_{0c}\mathbf{\rho}.$$

а тепловая часть внутренней энергии

$$E_{a}(\rho,T) = \frac{3}{2}R_{a}T\left(2 - \frac{T_{a}T\sigma^{2/3}}{\Theta_{a}^{2} + T_{a}T\sigma^{2/3}}\right), \qquad \sigma = V_{0}\rho.$$

Соответственно давление

$$P(\rho, T) = P_c(\rho) + P_a(\rho, T),, \qquad (1.26)$$

$$P_c(\mathbf{\rho}) = \frac{B_{0c}V_{0c}}{m \,\check{}\,n} \left(\mathbf{\sigma}_c^m - \mathbf{\sigma}_c^n\right), \quad P_a(\mathbf{\rho}, T) = \frac{3}{2}R_a T \mathbf{\rho} \left(2\mathbf{\gamma}_a + \left(\frac{2}{3} - 2\mathbf{\gamma}_a\right)\frac{T_a T \sigma^{2/3}}{\Theta_a^2 + T_a T \sigma^{2/3}}\right).$$

Характеристическая температура

$$\Theta_a(\rho) = \Theta_{0a} \sigma^{\gamma_{ia}} \exp\left((\gamma_{0a} - \gamma_{ia}) \frac{B_{sa}^2 + D_{sa}^2}{B_{sa}} \left(\operatorname{arctg} \frac{x + D_{sa}}{B_{sa}} - \operatorname{arctg} \frac{D_{sa}}{B_{sa}}\right)\right), \ x = \ln \sigma$$

$$\gamma_a(\rho) = \gamma_{ia} + (\gamma_{0a} - \gamma_{ia}) \frac{B_{sa}^2 + D_{sa}^2}{B_{sa}^2 + (x + D_{sa})^2}$$

Здесь коэффициенты:  $V_0 = 0.4545 \text{ см}^3/\text{г}, V_{0c} = 0.4443093642396295 \text{ см}^3/\text{г},$  $E_{sub} = 7.289 \text{ кДж/г}, B_{0c} = 39.506972675107981, m = 2.35925863358606,$  $n = 1.02074136641393, R_a = 415.1417258751455, T_a = 0.1 \text{ K}, D_{sa} = 0.2231435513142097, B_{sa} = 1, \Theta_{0a} = 1, \gamma_{0a} = 1.05, \gamma_{ia} = 0.5.$ 

При не очень больших энергиях греющего лазерного излучения движение стекла под действием возникающего в металле давления является практически адиабатическим. Это позволяет использовать в качестве УРС стекла аппроксимацию  $P(\rho)$  на адиабате, не рассматривая вообще тепловой баланс в стекле. Для стекла РҮROX, используя данные [59], такую аппроксимацию можно записать как

$$P_{\text{glass}}(\boldsymbol{\rho}) = (\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}^0)(A + B(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_M)^2) \exp(p\boldsymbol{\rho}) \ \boldsymbol{\Gamma} \boldsymbol{\Pi} \boldsymbol{a}, \tag{1.27}$$

где плотности в г/см<sup>3</sup>,  $\rho^0 = 2.23$ ,  $\rho_M = 3.52$ , A = 10.3, B = 5.047, p = 0.13. Для общности можно ввести фиктивную температуру  $T = E/c_V$ ,  $c_V = 0.83 \text{ Дж/г/K}$ .

При удобстве использования аналитических аппроксимаций УРС их недостатком является то, что аппроксимация справедлива для одной (как правило твердой) фазы. Изменение термодинамических свойств многих металлов при плавлении незначительно, что позволяет написать аппроксимацию, достаточно хорошо описывающую ТД свойства и твердой и жидкой фаз. Однако при этом в любом случае теряются затраты тепла на плавление вещества (энергия плавления), см. рис. 1.1.

Указанного недостатка лишены широкодиапазонные табулированные УРС [42;43;52–57], построенные на сетках, перекрывающих всю интересующую область ТД параметров с учетом всех существующих при этом фаз. Таблицы для этих УРС [58] частично находятся на [59].

Первые такие УРС строились преимущественно на логарифмически равномерных сетках, однако затем были разработаны адаптивные сетки, узлы которых находятся на линиях, разделяющих различные фазы [87]. Это существенно улучшает точность аппроксимации вблизи фазовых границ, что особенно существенно, если на определенной стадии процесса траектория изменения ТД параметров материальной точки (лагранжевой ячейки) проходит вблизи такой границы почти параллельно ей.



Рисунок 1.1 — Изохора золта при нормальной плотности  $\rho^0 = 19.3 \ \Gamma/cm^3$  по широкозонному УРС по типу [42;43;52–57] (сплошная черная линия) и по уравнению Ми—Грюнайзена (1.22) с  $\Gamma = 3.1$  (синие штрихи). На рисунке слева  $E_{T*}$  — тепловой вклад во внутреннюю энергию, отсчитываемый от энергии в нормальном состоянии  $E_{T*}(T) = E(\rho^0, T) - E(\rho^0, T_{room})$ . Стрелками отмечены пересечения солидуса и ликвидуса с изохорой. В области плавления (S+L) давление на изохоре растет значительно быстрее по сравнению с однофазными областями твердого вещества (S) и жидкости (L).

Построение уравнений состояния и различные формы их написания, в частности различные аппроксимации холодных кривых, рассмотрены в обзоре [57].

Как указывалось выше, в 2*T* модели уравнения теплового баланса пишутся отдельно для электронной и ионной подсистем. При этом с использованием полного 1*T* УРС ионная составляющая вычисляется как разность  $F_i = F_{1T \text{ EOS}} - F_e$ . В численном счете вычитание может приводить к нежелательному росту ошибок, особенно если в какой—то области параметров электронная теплоемкость по используемому электронному УРС оказывается не малой, по сравнению с полной теплоемкостью по используемому полному 1*T* УРС. Поэтому при 2*T* расчетах предпочтительнее использовать УРС прямо для ионной составляющей,  $F_i = F_{i \text{ EOS}}$ ,  $F(\rho, T_i, T_e) = F_{i \text{ EOS}}(\rho, T_i) + F_e(\rho, T_e)$ . Для ряда металлов аналогично упомянутым выше широкодиапазонным многофазным 1*T* 

32

УРС К.В. Хищенко разработаны такие широкодиапазонные многофазные УРС прямо для ионной составляющей [88–90].

В рассматриваемых ниже расчетах, как правило, по возможности использованы именно такие УРС.

# 1.1.3 Кинетические коэффициенты

Кроме уравнений для энергии и давления (УРС), которые прямо входят в уравнения 2*T*—гидродинамики, необходимо определить также коэффициенты, задающие темп распространения тепла — теплопроводности и обмена энергией между электронной и ионной подсистемой. В отличие от УРС, в простейших оценках этими коэффициентами иногда можно пренебречь (см., например, [37, (O1:1:1)].

# Коэффициенты теплопроводности

В уравнения теплового баланса электронной и ионной подсистем входят, строго говоря, свои коэффициенты теплопроводности. Однако, в металлах электронная теплопроводность, безусловно, доминирует, и ионной как правило можно пренебречь. Это позволяет в численной схеме точно исключить ионную температуру в уравнениях теплового баланса и рассматривать только одно обобщенное уравнение, как в 1*T* задаче, с эффективным УРС, зависящим от темпа электрон—ионного теплообмена. С другой стороны, в некоторых случаях сглаживание флуктуаций ионной температуры благодаря ионной (фононной) теплопроводности может регуляризовать расчет. В задачах с металлическими пленками на диэлектрических подложках может оказаться нужен учет отвода тепла в подложку, который определяется теплопроводностью в ионной подсистеме (решеточной) — свободные электроны и электронная теплопроводность и не подложке отсутствуют. В любом случае, если ионная теплопроводность и не приравнивается нулю, для нее обычно достаточно простейшего приближения. Оценка коэффициента электронной теплопроводности  $\kappa_{\rm e}$  по модели Друде имеет вид

$$\kappa_{\rm e} = (1/3) v_{\rm F}^2 c_{\rm e, V} / \nu_{\rm e}, \qquad (1.28)$$

где  $c_{\rm e, V}$  — теплоемкость электронной подсистемы в расчете на единицу объема,  $v_{\rm F}$  — фермиевская скорость,  $\mathbf{v}_{\rm e} = 1/\tau_{\rm e}$  — частота столкновений электронов,  $\tau_{\rm e}$  время свободного пробега электрона. При частичном снятии вырождения имеем  $c_{\rm e, V} = \gamma_V T_{\rm e}$ . В приближении ферми-газа свободных электронов коэффициент  $\gamma_V$  равен  $\gamma_V = \pi^2 k_{\rm B}^2 n_{\rm e}/(2\varepsilon_{\rm F})$ , (см. (1.11)), где  $n_{\rm e} = Z \rho/m_{\rm at}$  — концентрация электронов в зоне проводимости, Z — число электронов на атом,  $m_{\rm at}$  — масса атома,  $k_{\rm B}$  — постоянная Больцмана,  $e_{\rm F}$  — энергия Ферми.

Частота  $\mathbf{v}_{\rm e} = \mathbf{v}_{\rm ei} + \mathbf{v}_{\rm ee}$  складывается из взаимодействий электрона с ионами и другими электронами. При температурах  $T_{\rm i}$  и  $T_{\rm e}$  выше дебаевской и электронной температуре  $T_{\rm e}$  до порядка температуры в несколько единиц кК, частота электрон—ионных столкновений  $\mathbf{v}_{\rm ei} \approx \mathbf{v}_{\rm rt}(T_{\rm i}/T_{\rm rt})$  превышает частоту электрон—электронных  $\mathbf{v}_{\rm ee}$  [64], здесь  $\mathbf{v}_{\rm rt}$  — частота столкновений при комнатной температуре.

Таким образом, в этом приближении коэффициент теплопроводности

$$\kappa_{\rm e} \approx (1/3) v_{\rm F}^2 (\gamma_V T_{\rm rt} / \nu_{\rm rt}) (T_{\rm e} / T_{\rm i}) \tag{1.29}$$

пропорционален электронной температуре и в существенно 2T состоянии  $T_{\rm e} \gg T_{\rm i}$  сильно возрастает по сравнению с однотемпературным случаем, а при выравнивании температур становится практически постоянным.

В [64] показано, что широко применяемая, в том числе в нашей работе [37, (O1:1:1)], формула,

$$\kappa_{\rm e} = C \frac{(\theta^2 + 0.16)^{5/4}(\theta^2 + 0.44)}{\sqrt{\theta^2 + 0.092}} \frac{\theta}{\theta^2 + b\theta_{\rm i}}, \qquad \theta = k_{\rm B}T_{\rm e}/\varepsilon_{\rm F}, \quad \theta_{\rm i} = k_{\rm B}T_{\rm i}/\varepsilon_{\rm F},$$

аналогичная используемой для плазмы, учитывающая низкотемпературный электронный предел (1.29) и плазменную асимптотику, хотя дает правильную величину теплопроводности простого металла при умеренных температурах, недостаточно хорошо описывает рост вклада электрон—электронного рассеяния с увеличением электронной температуры. Вместо этого в [64; 91, (O1:1:4)] предложено описание электронной теплопроводности с помощью формулы Друде (1.28) с широкодиапазонной аппроксимацией входящих в нее величин. Для однозонного металла, используя формулу Друде (1.28), фермигазовую аппроксимацию электронной теплоемкости (1.11), и аппроксимируя среднюю скорость электронов

$$\kappa_{\rm e} = \frac{\bar{v}_{\rm appr}^2}{3} \frac{c_{\rm e, V}}{\nu_{\rm e}}, \quad c_{\rm e, V} = \frac{1}{\sqrt{c_{\rm deg, V}^{-2} + c_{\rm cl, V}^{-2}}}, \quad \frac{\bar{v}_{\rm appr}^2}{3} = \sqrt{\left(\frac{2}{5}\varepsilon_{\rm F}\right)^2 + (k_{\rm B}T_{\rm e})^2} / m_{\rm e}, \tag{1.30}$$

где  $c_{\text{deg, }V} = \left(\frac{\pi^2}{2} n_{\text{e}} k_{\text{B}}^2 / \varepsilon_{\text{F}}\right) T_{\text{e}}, c_{\text{cl}} = \frac{3}{2} k_{\text{B}} n_{\text{e}},$  а частота столкновений складывается из частот электрон-электронных и электрон-ионных столкновений, для которых используются широкодиапазонные аппроксимации

$$\mathbf{v}_{\mathrm{e}} = \mathbf{v}_{\mathrm{ei}}^{\mathrm{WD}} + \mathbf{v}_{\mathrm{ee}}^{\mathrm{WD}},\tag{1.31}$$

$$\mathbf{v}_{ei}^{WD} = 1 / \sqrt{(\mathbf{v}_{ei}^{c})^{-2} + (\mathbf{v}_{pl})^{-2}} \qquad \mathbf{v}_{ee}^{WD} = 1 / \sqrt{(\mathbf{v}_{ee}^{c})^{-2} + (\frac{1 - k_{Z}}{k_{Z}} \mathbf{v}_{pl})^{-2}},$$
$$\mathbf{v}_{pl} = c_{e, V} \frac{\bar{v}_{appr}^{2}}{3} / \kappa_{pl}, \qquad \kappa_{pl} = \frac{16\sqrt{2}}{\pi^{3/2}} k_{B} \frac{(k_{B}T_{e})^{5/2}}{Zm_{e}^{1/2}e^{4}\Lambda},$$
$$\frac{1}{\mathbf{v}_{ee}^{c}} = \frac{1}{B_{lt}T_{e}^{2}} \left(\frac{\rho}{\rho^{0}}\right)^{2/3} + \frac{1}{B_{cp}T_{e}^{0.28}} \left(\frac{\rho}{\rho^{0}}\right)^{-0.48}, \qquad (1.32)$$

где первый член в (1.32) дает низкотемпературный предел, а второй аппроксимирует высокотемпературные поправки в конденсированном веществе [64, ур. (14), (31), (33)],

$$\mathbf{v}_{\mathrm{ei}}^{\mathrm{c}} = \mathbf{v}_{\mathrm{ei}}^{\mathrm{c},T} / \left(\frac{\rho}{\rho^0}\right)^{1/3},$$

$$\mathbf{v}_{ei}^{c,T} = \mathbf{v}_0 T_i$$
 в твердом веществе, (1.33)  
 $\mathbf{v}_{ei}^{c,T} = \frac{\mathbf{v}_1 T_i}{A + BT_i + C/T_i}$  в расплаве. (1.34)

Для алюминия из сравнения с экспериментальными данными по электропроводности алюминия (см. [64; 91, (O1:1: 4)]) в этих формулах  $\Lambda = 1$ ,  $k_{\rm Z} = 0.7$ ,  $\rho^0 = 2.712 \ г/{\rm cm}^3$ . В формуле (1.32)  $B_{\rm lt} = 0.247 \times 10^{15}$ ,  $B_{\rm cp} = 1.15 \times 10^{15}$ ,  $T_{\rm e}$  в электронвольтах, тогда  $\nu_{\rm ee}^{\rm c}$  в с<sup>-1</sup>. В формулах (1.33), (1.34)  $\nu_0 = 4.2 \times 10^{14}/993$ ,  $\nu_{\rm l} = 1.1 \times 10^{14}$ , A = 130, B = 0.0367,  $C = -6.67 \times 10^4$ ,  $T_{\rm i}$  в кельвинах, и тогда  $\nu_{\rm ee}^{\rm c}$  в с<sup>-1</sup>.



Рисунок 1.2 — [82, (O1:1:8), рис. C1] Изменение 2*T* коэффициента теплопроводности золота  $\kappa(\rho, T_{\rm e}, T_{\rm i})$  (по формулам (1.35)–(1.38)) при изменении температур  $T_{\rm e}$  и  $T_{\rm i}$  при изохорическом нагреве золота с нормальной плотностью  $\rho^0$ .

Для других металлов с более сложной структурой электронных зон становится необходимым учитывать рассеяние электронов на электронах других зон, межзонные переходы, возможность термической ионизации, приводящей к зависимости числа электронов в зоне проводимости от электронной температуры. При сохранении общей структуры формулы Друде (1.28) с частотой столкновений складывающейся из частот электрон—электронных и электрон—ионных столкновений  $\nu_e = \nu_{ee} + \nu_{ei}$  можно написать

$$\kappa_{\rm e} = \frac{\bar{v}_{\rm appr}^2}{3} \frac{c_{\rm e, V}}{\nu_{\rm e}} = \frac{\bar{v}_{\rm appr}^2}{3} \frac{c_{\rm e, V}}{(\nu_{\rm ee} + \nu_{\rm ei})} = \frac{1}{\frac{\nu_{\rm ee}}{c_{\rm e, V} \bar{v}_{\rm appr}^2/3} + \frac{\nu_{\rm ei}}{c_{\rm e, V} \bar{v}_{\rm appr}^2/3}} = \frac{1}{S_{\rm e} + 1/\kappa_{\rm ei}}$$
(1.35)

и аппроксимировать сразу  $S_{\rm e} = 1/\kappa_{\rm ee}$  и  $\kappa_{\rm ei}$ , последний отдельно для твердой фазы и расплава [72; 92].

В частности, для золота, вклад в теплопроводность за счет электрон электронных столкновений

$$S_{\rm e} = \frac{a_0 t}{1 + b_0 \sqrt{t} + b_1 t + b_2 t^2} / x^{4/3}, \qquad x = \frac{\rho}{\rho_{00}}, \quad t = \frac{6T_{\rm e}}{T_{\rm F0}} / x, \tag{1.36}$$
где  $\rho_{00}$  — равновесная плотность при нулевой температуре и нулевом давлении,  $T_{\rm F0} = e_{\rm F0}/k_{\rm B}$  — температура Ферми электронного газа при нормальных условиях,

вклад от электрон-ионных столкновений

где коэффициенты для золота равны (см. [93]):

 $\rho_{00} = 19,5 \, \Gamma/cM^3$ , температуры в К $T_{\rm rt} = 293$ ,  $T_{\rm m} = 1337$ ,  $T_{\rm s} = 14000$ ,  $T_{\rm F0} = 9,2 \times 11605$ ,  $\rho_{\rm brt} = 19,3 \, \Gamma/cM^3$ ,  $\kappa_{0\rm s} = 318 \, {\rm BT}/({\rm M}\,{\rm K})$ ,  $a_0 = 9,294 \times 10^{-4} \, ({\rm M}\,{\rm K})/{\rm BT}$ ,  $b_0 = -0,2688$ ,  $b_1 = 0,03$ ,  $b_2 = 0,9722$ , a = 3,92004, b = 1,9471,  $k_1 = 131,597 \, {\rm BT}/({\rm M}\,{\rm K})$ ,  $k_2 = 3,06667$ ,  $k_3 = 1.07927$ , p = 2,07,  $r_0 = 148,5$ ,  $r_1 = 0,1193$ ,  $x_0 = 0,887179$ ,  $x_1 = 3,28321 \times 10^{-5} \, {\rm K}^{-1}$ ,  $x_2 = 3,0982 \times 10^{-9} \, {\rm K}^{-2}$ ,  $x_3 = 1,64884 \times 10^{-13} \, {\rm K}^{-3}$ . Они получены из расчета коэффициента электронной теплопроводности при электрон—электронном рассеянии и с учетом имеющихся экспериментальных данных по теплопроводности жидкого золота.

Зависимость теплопроводности золота от электронной  $T_{\rm e}$  и ионной  $T_{\rm i}$  температур при постоянной равновесной плотности  $\rho^0$  (по формулам (1.35)—(1.38) [72;94]) показана на рисунке 1.2. При небольших ионных температурах зависимость теплопроводности от электронной температуры оказывается немонотонной.

Аналогично составляются аппроксимации коэффициента теплопроводности для других металлов. Для переходных металлов, используя (1.35),

вклад от электрон-электронных столкновений

$$S_{\rm e} = \frac{a_0 t}{1 + b_0 \sqrt{t} + b_1 t + b_2 t^2} / x, \qquad x = \frac{\rho}{\rho^0}, \quad t = \frac{6T_{\rm e}}{T_{\rm F}(\rho)}, \tag{1.39}$$

#### вклад от электрон-ионных столкновений

и в жидкой фазе  $m = k \cdot (t) \cdot k_{m}(T)$ 

$$\kappa_{\rm ei}^{\rm liq} = \kappa_{0l} \frac{x}{x_{\rm lm}} \frac{k_{cvl}(t)}{k_{cvl}(t_{\rm lm})} \frac{k_{Ti}(T_{\rm i})}{k_{Ti}(T_{\rm m})}, \qquad x_{\rm lm} = \frac{\rho_{\rm ml}}{\rho^0}, \quad t_{\rm lm} = \frac{6T_{\rm m}}{T_{\rm F}(\rho_{\rm lm})}, \qquad (1.41)$$
$$k_{cvl}(t) = t(1 + a_{\rm l1}t + a_{\rm l2}t^2)/(1 + b_{\rm l}t^{p_{\rm l}}), \qquad K_{Ti}(T) = (1 + a_{\rm i1}/T)/(1 + a_{\rm i2}/T),$$

где в (1.39)–(1.41)  $T_{\rm r} = 293$  К — комнатная температура, в случае железа плотности в г/см<sup>3</sup> равны равновесная  $\rho^0 = 7.923$ , на бинодали при комнатной температуре  $\rho_{\rm brt} = 7.874$ , жидкости при температуре плавления  $T_{\rm m} = 1812$  К  $\rho_{\rm lm} = 7.04$ , коэффициенты  $a_0 = 0.0135892$  (м K)/Вт,  $b_0 = 0$ ,  $b_1 = 0.817065$ ,  $b_2 = 3.259920$ ,  $\kappa_{0\rm s} = 82.0$  Вт/(м K), a = 2.234922, b = 0.624002,  $a_{\rm s1} = 0$ ,  $a_{\rm s2} = 1.221772$ ,  $b_{\rm s} = 0.979219$ ,  $p_{\rm s} = 2.058057$ ,  $\kappa_{0\rm l} = 41.5$  Вт/(м K),  $a_{\rm l1} = 0$ ,  $a_{\rm l2} = 1.221772$ ,  $b{\rm l} = 0.979219$ ,  $p_{\rm l} = 2.058057$ ,  $a_{\rm i1} = 7500.0$  K,  $a_{\rm i2} = 2500.0$  K, a у никеля  $\rho^0 = 9.0191$ ,  $\rho_{\rm brt} = 8.9092$ ,  $\rho_{\rm lm} = 7.81$ ,  $a_0 = 0.0421403$ ,  $b_0 = 0$ ,  $b_1 = 17.321557$ ,  $b_2 = 11.550811$ ,  $\kappa_{0\rm s} = 96.0$ , a = 2.019690, b = 0.680616,  $a_{\rm s1} = 0$ ,  $a_{\rm s2} = 5.269902$ ,  $b_{\rm s} = 3.059328$ ,  $p_{\rm s} = 2.094269$ ,  $T_{\rm m} = 1726$ ,  $\kappa_{0\rm l} = 61.0$ ,  $a_{\rm l1} = 0$ ,  $a_{\rm l2} = 5.269902$ ,  $b_{\rm l} = 3.059328$ ,  $p_{\rm l} = 2.094269$ ,  $a_{\rm i1} = 7656.0$ ,  $a_{\rm i2} = 2583.0$ .

#### Коэффициент электрон-ионного теплообмена

Простейшим приближением для электрон—ионного теплообмена является считать коэффициент электрон—ионного теплообмена на один атом — и, соответственно, на единицу массы — постоянным:

$$\boldsymbol{\alpha} = \text{const} = \boldsymbol{\alpha}_0 / \boldsymbol{\rho}^0, \qquad (1.42)$$

где  $\alpha_0$  — коэффициент электрон-ионного теплообмена в нормальных условиях. Так для алюминия на основании расчетов электронной структуры и сравнения



Рисунок 1.3 — [82, (O1:1:8), рис. В1] Зависимость коэффициента электрон ионного теплообмена **α** от электронной температуры по формуле (1.44), используемой в наших 2T расчетах, при различных значениях  $K_{\alpha}$ 

с экспериментальными данными [95]  $\alpha = 3.5 \times 10^{17} \text{ Br}/(\text{м}^3 \text{ K})/2.7 \times 10^3 \text{ кг/m}^3 = 1.3 \times 10^{14} \text{ Br}/(\text{кг K})$ . При этом не учитывается зависимость электрон-ионного теплообмена от плотности  $\alpha \propto (\rho/\rho^0)^{2/3}$ , которую можно считать слабой, особенно учитывая, что за время существенно 2T стадии плотность не успевает сильно измениться, и зависимость коэффициента электрон-ионного теплообмена от температуры, которая в данном случае, согласно DFT-расчетам, является достаточно слабой [96].

В случае переходных металлов в наших расчетах учитывался рост электрон—ионного теплообмена с электронной температурой

$$\alpha = \alpha_0 (T_{\rm e}/T_{\rm r})^{0.25} / \rho^0, \qquad (1.43)$$

где у железа  $lpha_0 = 3.9 imes 10^{18}$  Вт/(м $^3$ K).

У металлов с более сложной структурой электронных зон влияние других зон, кроме s—зоны проводимости, приводит к появлению сильной зависимости коэффициента электрон—ионного теплообмена от электронной температуры. Кроме того, у всех металлов проявляется зависимость от плотности. Для золота формулу для коэффициента электрон—ионного теплообмена можно записать в виде [72; 82, (O1:1:8), (B.1)]:

$$\begin{split} \mathbf{\alpha}(\mathbf{\rho}, T_{\rm e}) &= \mathbf{\alpha}_T(T_{\rm e}) \left(\frac{\mathbf{\rho}}{\mathbf{\rho}^0}\right)^{5/3} \times 10^{17} \text{ BT}/(\text{K m}^3), \\ \mathbf{\alpha}_T(T_{\rm e}) &= 0.2 + \frac{4.3}{K_{\alpha}} \frac{T_{\rm e, \ eV}^{3.6}}{1 + T_{\rm e, \ eV}^{3.5} + 0.9 T_{\rm e, \ eV}^{4.1}}, \end{split} \tag{1.44}$$

где  $T_{\rm e, \ eV}$  — электронная температура в электронвольтах, и на единицу массы

$$\alpha(\rho, T_{\rm e}) = (\alpha_T(T_{\rm e})/\rho^0) \left(\frac{\rho}{\rho^0}\right)^{2/3} \times 10^{11} \text{ Br}/(\text{K r}),$$
(1.45)

где  $\rho^0~=~19{,}5$  г/см $^3{.}$ 

Существуют два похода к теоретическому расчету темпа электрон—ионного теплообмена в золоте. В одном из них пренебрегают различием s, p и d электронных, в то время как в другом эти зоны рассматриваются отдельно [72; 94; 95]. При втором подходе [72; 94] коэффициент электрон—ионного теплообмена  $\alpha(T_e)$  при росте температуры  $T_e > 4$  кК получается меньше. В связи с этим в формулу (1.44) введен параметр  $K_{\alpha}$ , на который делится «высота» высокотемпературного вклада в функции (1.44). На рисунке 1.3 показана зависимость коэффициента электрон—ионного теплообмена  $K_{\alpha}$  от электронной температуре по формуле (1.44) при четырех значениях  $K_{\alpha}$  от 1,15 (верхняя кривая) до 6 (нижняя кривая). Существенно, что при низких температурах, с которых стартуют расчеты, зависимость (1.44) начинается с экспериментально подтвержденного значения  $0.2 \times 10^{17}$  Вт K<sup>-1</sup> м<sup>-3</sup>.

При воздействии ультракоротких лазерных импульсов на тонкие пленки (см. ниже Гл. 4) температура быстро выравнивается по толщине образца, и остается только теплообмен между электронной и ионной подсистемами. Это позволяет пересчитав из экспериментальных данных по изменению оптических свойств мишени динамику электронной и ионной температур  $T_{\rm e}(t)$  и  $T_{\rm i}(t)$ , прямо рассчитать динамику коэффициента электрон—ионного теплообмена  $\alpha(t)$ , и из параметрической зависимости  $\alpha(t)$ ,  $T_{\rm e}(t)$  восстановить зависимость  $\alpha(T_{\rm e})$  [97]. Результаты [97] указывают, что, после некоторого роста  $\alpha$  при небольших  $T_{\rm e}$ , соответствующего данным других работ, при дальнейшем росте  $T_{\rm e}$  наблюдается заметное уменьшение  $\alpha$ .

Аналогично пишутся выражения для электрон—ионного теплообмена и для других металлов.

## 1.2 Нагрев металлической мишени ультракоротким лазерным импульсом

Рассмотрим воздействие ультракороткого лазерного импульса на металл, конкретно алюминий, лежащий при  $x^0 \ge 0$ . Лазерное излучение, падающее со стороны свободной поверхности, поглощается, экспоненциально спадая с глубиной ~  $\exp(-x^0/d_{\rm skin})$ , где  $d_{\rm skin}$  — толщина скин-слоя, и имеет гауссов профиль по времени ~  $\exp(-(t/\tau_{\rm L})^2)$  (время t отсчитывается от максимума импульса). Таким образом, тепловыделение, связанное с поглощением лазерного излучения

$$Q(x^{0},T) = \frac{F_{abs}}{\sqrt{\pi}d_{\rm skin}\tau} \exp\left(-\frac{x^{0}}{d_{\rm skin}}\right) \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau_{\rm L}}\right)^{2}\right), \qquad (1.46)$$

где  $F_{\rm abs}$  — флюенс (поверхностная плотность энергии) поглощенного излучения,  $F_{\rm abs} = AF_{\rm in}, F_{\rm in}$  - падающий флюенс,  $A = 1 - R (R - \kappa oэффициент отражения).$ Ниже всегда, если не будет указано другое,  $d_{\rm skin} = 15$  нм (что соответствует воздействию на алюминий импульсов Ti:sapphire лазера с длиной волны  $\lambda = 800$  нм),  $\tau_{\rm L} = 100$  фс.

Численно интегрируется система уравнений двухтемпературной гидродинамики (1.4)—(1.8) с использованием УРС и транспортных коэффициентов материала мишени.

Счет начинается с момента  $t = -3\tau = -0,3$  пс от начального состояния с комнатной температурой  $T_{\rm i} = T_{\rm e} = 293$  К и нулевым давлением.

Граничными условиями на свободной поверхности берутся  $p(x^0 = 0, t) = P_{\text{out}} = 0$  (атмосферное давление мало по сравнению с давлениями, возникающими в нагретом металле, и им пренебрегаем) и отсутствие теплового потока через поверхность вещества, что соответствует требованию нулевого градиента электронной и ионной температур  $\partial T_{\rm e}(x^0, t)/\partial x^0 = 0$ ,  $\partial T_{\rm i}(x^0, t)/\partial x^0 = 0$  при  $x^0 = 0$ . Толщина металла берется достаточно большой, чтобы тепловые и гидродинамические возмущения не успевали дойти до второй границы расчетной области за рассматриваемое время, и граничные условия на ней не влияли на решение.

В значительной части экспериментов по воздействию ультракоротких лазерных импульсов на металлические мишени используется мишень из алюминия. Для моделирования алюминий удобен тем, что это простой однозонный металл, что позволяет использовать для описания его термодинамических и кинетических свойств простые аппроксимации. Для электронной подсистемы берется квазифермиевская аппроксимация (1.9a).

Используется табулированное широкодиапазонное УРС (см. 1.1.2) специально для ионной подсистемы (без электронного вклада) алюминия, предоставленное К.В. Хищенко.

Электронная теплопроводность алюминия как однозонного металла описывается формулами (1.30)—(1.34). Ионной теплопроводностью пренебрегаем,  $\kappa_i = 0.$ 

Удельный (на единицу массы) коэффициент электрон—ионного теплообмена берется постоянным (1.42).

#### 1.2.1 Нагрев и двухтемпературная стадия

На рисунке 1.4 показаны профили электронной температуры  $T_{\rm e}(x)$  в различные моменты времени во время действия греющего лазерного импульса и при различной поглащенной энергии. Как видно из рисунка 1.4, характерная длина спадания электронной температуры  $d_{T\rm exp}$  практически сохраняется во время импульса и не зависит от поглащенной энергии, причем эта длина значительно больше  $d_{\rm skin}$ , на котором спадает поглощаемая энергия (показан на рисунке красной штриховой линией) и определяется большой электронной температуропроводностью  $\chi_{\rm e} = \kappa_{\rm e}/(c_{\rm e}\rho)$ . В результате картина процесса не зависит от толщины скин—слоя  $d_{\rm skin}$  и, следовательно, от длины волны греющего лазерного импульса, если только не используется лазер с жестким излучением, проникающем глубже  $d_{T\rm exp}$ . На этапе нагрева  $d_{T\rm exp} \sim \sqrt{\chi_{\rm e}\tau}$ . У алюминия на существенно—2T стадии при высокой электронной температуре  $\chi_{\rm e} \sim 200$  см<sup>2</sup>/с и при  $\tau = 0,1$  пс характерная длина  $d_{T\rm exp} \sim 50$  нм. Затем  $d_{T\rm exp}$  становится больше,  $\sim \sqrt{\chi_{\rm e}t}$ . На рисунке 1.4 (слева) видно, что наклон линии  $t = 3\tau = 0,3$  пс меньше.

Быстрое увеличение толщины прогретого слоя благодаря большой электронной температуропроводности продолжается в течение 2*T* стадии до  $t \sim t_{eq} \sim c_e/\alpha$ , когда электронная и ионная температура становятся близки. При этом электронный коэффициент теплопроводности уменьшается и становится практически постоянным, вместо электронной теплоемкости в коэффициен-



Рисунок 1.4 — Профили электронной температуры  $T_{\rm e}(x)$  в алюминии, слева в различные моменты времени (при  $F_{\rm abs} = 60~{\rm M}{\rm J}{
m k}/{
m cm}^2$ ), справа при разной поглощенной энергии греющего лазерного импульса в момент t = 0 — половина импульса, максимум мощности.



Рисунок 1.5 — Формирование прогретого слоя. Электронная ( $T_{\rm e}$ , справа) и ионная ( $T_{\rm i}$ , слева) температуры в зависимости от координаты x, отсчитываемой от начального положения поверхности вещества, и времени t, отсчитываемого от момента максимума лазерного импульса (Al,  $F_{\rm abs} = 60 \text{ мДж/см}^2$ )



Рисунок 1.6 — Профили электронной  $T_{\rm e}$  (сплошные линии) и ионной  $T_{\rm i}$  (штриховые линии) температур (слева) и электронного  $P_{\rm e}$  (жирные штриховые линии), ионного  $P_{\rm i}$  (мелкие штрихи) и полного  $p = P_{\rm e} + P_{\rm i}$  (сплошные линии) давлений (справа) на 2T стадии (при  $F_{\rm abs} = 60 \text{ мДж/см}^2$ )

те температуропроводности начинает играть роль полная теплоемкость  $c = c_{\rm e} + c_{\rm i} \gg c_{\rm e}$ , и рост толщины прогретого слоя практически останавливается на  $d_{\rm T} \sim \sqrt{\chi_{\rm e} t_{\rm eq}}$ , как видно на рисунке 1.6. В алюминии  $t_{\rm eq} < 5$  пс,  $d_{\rm T} < 300$  нм.

Динамика давления в приповерхностном нагреваемом слое на 2*T* стадии показана на рисунках 1.6 и 1.7.

Сказанное выше относится, конечно, к рассматриваемому случаю ультракоротких импульсов длительностью  $\tau < t_{\rm eq}$ . При бо́льшей длительности импульса глубина прогрева  $d_{\rm T}$  определяется этой длительностью, соответственно пороговая энергия, необходимая для абляции (см. дальше 1.4, 1.4.2) не зависит от длительности импульса при  $\tau < t_{\rm eq}$  и растет при бо́льших длительностях. Это обстоятельство было использовано в работах [98; 99] для оценки времени электрон-ионной релаксации  $t_{\rm eq}$  по экспериментальным зависимостям порогов абляции различных металлов от длительности импульсов.

Распространение тепла на 2*T*—стадии является сверхзвуковым, в том смысле, что усредненная скорость тепловой волны  $\bar{v}_{\rm T} = d_{\rm T}/t_{\rm eq} \sim \sqrt{\chi_{\rm e}/t_{\rm eq}}$  оказывается большой по сравнению со скоростью звука  $c_{\rm s}$  в веществе. Так в алюминии  $\bar{v}_{\rm T} \sim 100$  км/с  $\gg c_{\rm s} \approx 5$  км/с. Надо подчеркнуть, при этом, что скорость  $\bar{v}_{\rm T}$  распространения тепла в электронной подсистеме является большой



Рисунок 1.7 — Полное ( $p = P_{\rm e} + P_{\rm i}$ , слева), электронное ( $P_{\rm e}$ , в центре) и ионное ( $P_{\rm i}$ , справа) давление в зависимости от координаты x, отсчитываемой от начального положения поверхности вещества, и времени t, отсчитываемого от момента максимума лазерного импульса

по сравнению со скоростью звука  $c_{\rm s}$  в веществе в целом, внутри электронной подсистемы имеется нормальная диффузия тепла. Гидродинамические (акустические) возмущения за время 2T—стадии успевают пройти только  $d_{\rm s,\ 2T} = c_{\rm s} t_{\rm eq}$ , в алюминии это  $<\sim 25$  нм.

#### 1.2.2 «Холодное» поверхностное испарение

Большая электронная температура при практически невозмущенной плотности приводит к возникновению большого электронного давления  $P_{\rm e}$ . На поверхности мишени давление  $p_{\rm out} = 0$  (атмосферным давлением по сравнению с возникающими в мишени давлениями можно пренебречь). В результате, хотя в глубине мишени вещество остается практически неподвижным, в узком приповерхностном слое уже на 2T стадии возникает заметное движение, приводящее к растяжению вещества. Расширение приводит к возникновению отрицательного ионного давления  $P_{\rm i}$ , в соответствии с граничным условием на поверхности вещества  $p = P_{\rm e} + P_{\rm i} \rightarrow 0$  при  $x^0 \rightarrow 0$ , практически компенсиру-



Рисунок 1.8 — Траектория физического состояния лагранжевой ячейки на плоскости ( $\rho$ ,  $T_i$ ) при «холодном» испарении (черная линия с маркерами) и границы фаз по используемому УРС ионной подсистемы: бинодаль (оранжевая), солидус (коричневая), ликвидус (синяя) и спинодаль (красная)

ющего электронное давление, которое при расширении несколько снижается. Движение (изменение скорости) поверхности вещества определяется градиентом давления, в численном счете давлением  $p = P_{\rm e} + P_{\rm i}$  в крайней, прилегающей к поверхности ячейке схемы.

Расширение конденсированного вещества и рост по абсолютной величине отрицательного ионного давление ограничено прочностью вещества. При достаточно большой интенсивности излучения электронное давление вблизи поверхности оказывается большим, и расширение не останавливается. Когда при растяжении плотность вещества достигает спинодали, конденсированное вещество разрушается, и ионное давление становится положительным давлением парожидкостной смеси при данной ионной температуре — происходит «холодное» испарение — «холодное» в том смысле, что оно происходит при небольшой ионной температуре.

Уносимый испаренным веществом импульс создает в остающемся конденсированном веществе давление отдачи, делающее движение поверхности мишени немонотонным.

Расширение происходит под действием электронного давления против отрицательного ионного давления, совершенная работа уменьшает электронную энергию и температуру вблизи поверхности вещества (см. рис. 1.6) и увеличивает ионную энергию. Этот механизм передачи энергии от электронной подсистемы в ионную на определенных этапах может быть значительно эффективнее чем теплообмен. Строго говоря, если разделять тепловую ионную составляющую и холодную составляющую, то работа совершается против отрицательного холодного давления и увеличивает холодную энергию, ионная температура при этом может снижаться. Однако, если расширение продолжается за спинодаль, и вещество перестает быть конденсированным, то накопленная холодная энергия растяжения превращается в тепловую ионную энергию и ионная температура возрастает (см. рис. 1.8).

Такое «холодное» испарение затрагивает обычно не больше нескольких атомных слоев вблизи поверхности мишени. Используемое здесь гидродинамическое описание — приближение сплошной среды — на таких масштабах теряет применимость. Так что можно только указать на существование эффекта, но его детальное изучение требует использования микроскопического рассмотрения.

## 1.3 Распространение тепловой и акустической волн вглубь вещества

Как отмечалось выше, тепло на двухтемпературной стадии быстро распространяется по электронной подсистеме вглубь вещества, существенно обгоняя акустические возмущения.

Ионная температура постепенно повышается, подтягиваясь к электронной. Частично ионную температуру повышает также сжатие вещества в приходящей акустической волне.

#### 1.3.1 Движение области плавления. О задаче Стефана.

Поднимаясь, ионная температура достигает и превышает температуру плавления. В результате происходит гомогенное плавление в широкой области,



Рисунок 1.9 — Температуры в области плавления вещества на 27 стадии

доля жидкой фазы монотонно растет от 0 на границе двухфазной области и твердого вещества в глубине до 1. Поскольку на плавление вещества расходуется энергия, градиент ионной температуры в двухфазной области оказывается заметно меньше, чем вне ее, хотя внутренняя энергия растет. Ход температуры в области плавления показан на рисунке 1.9. Поскольку движение области плавления определяется при этом не теплопроводностью вглубь вещества, а однородным подтягиванием ионной температуры к электронной, это движение может быть сверхзвуковым.

Такая картина плавления коренным образом отличается от обычно используемой для описания плавления «задачи Стефана» (см, например, [100; 101]), которая в 2T случае оказывается неприменимой.

По мере сближения электронной и ионной температур в результате электрон-ионного теплообмена коэффициент электронной теплопроводности резко падает, и акустическая волна догоняет, а затем обгоняет тепловую. Это происходит уже на практически однотемпературной стадии, однако при аккуратном рассмотрении ситуации вблизи области плавления проявляются отличия.

В это время тепловой поток продолжает течь из прогретого приповерхностного слоя вглубь вещества. За областью максимального сжатия в уходящей вглубь акустической волне происходит расширение назад, в сторону свободной



Рисунок 1.10 — Температуры (слева), давление и плотность (справа) в области плавления вещества на временах, когда волна сжатия обгоняет тепловую

поверхности, давление падает, главным образом в результате падения плотности.

Но в двухфазной области плавления теряется зависимость давления от плотности, оно становится монотонно растущей функцией только температуры.

Возникает противоречивая ситуация. С одной стороны, температура должна уменьшаться вглубь вещества, с другой — давление, монотонно растущее с температурой, должно увеличивается. В результате в область плавления не может попасть более одной лагранжевой ячейки, что соответствует задаче Стефана, между последней расплавленной ячейкой и первой твердой возникает скачок термодинамических параметров, что приводит к появлению паразитных осцилляций в численном счете. При малой скорости движения фронта испарения эти осцилляции не велики.

При двухтемпературном рассмотрении такого противоречия не возникает (см. рисунок 1.10). Тепловой поток идет вглубь вещества по электронной подсистеме в соответствии с убыванием электронной температуры вглубь. Внутренняя энергия в ионной подсистеме также убывает вглубь, но в двухфазной области появляется сильная зависимость внутренней энергии от фазового состава, связанная с затратой энергии на плавление. При той же температуре внутренняя энергия в жидкости выше, по мере плавления даже при увеличении внутренней энергии температура может понижаться, что и происходит в этой области, см. рисунок 1.10 слева. Соответственно давление уменьшается в сторону увеличения доли жидкой фазы, в направлении свободной поверхно-

сти (рисунок 1.10 справа). Таким образом сохраняется картина с двухфазной областью плавления, в которой доля жидкой фазы монотонно меняется.

С течением времени двухфазная область плавления сужается, и картина плавления приближается к однотемпературной.

#### 1.3.2 Волна сжатия и растяжения.

Быстрый нагрев вещества ультракоротким лазерным импульсом при практически постоянной плотности приводит к возникновению большого давления в нагретом приповерхностном слое (см. рисунки 1.6 и 1.7 — малые времена и 1.11 — большие). Разгрузка этого слоя приводит к возникновению волны сжатия, идущей в глубь вещества. На свободной поверхности происходит отражение, и возникает волна растяжения, идущая вглубь вещества вслед за волной сжатия.

Можно отметить три особенности волны сжатия—растяжения, существенные для дальнейшего.

- Волна является короткой происходит быстрое нарастание давления, которое сменяется спадом до отрицательных давлений и затем релаксацией к 0. Характерный масштаб по времени при этом порядка времени электрон—ионной релаксации τ<sub>e-i</sub> ~ c<sub>e</sub>/α ≤ 3 пс у алюминия и до ~ 10 пс у золота, по длине порядка толщины слоя, прогретого за время двухтемпературной стадии d<sub>T</sub> ~ √χ<sub>e</sub>τ<sub>e-i</sub> = √κ<sub>e</sub>/α ≤ 100 нм в алюминии и до ≤ 200 нм в золоте.
- Заметное натяжение (отрицательное давление) возникает на глубине порядка толщины прогретого слоя d<sub>T</sub> на временах порядка звукового времени τ<sub>S</sub> ~ d<sub>T</sub>/c<sub>S</sub>, за которое звук со скоростью c<sub>S</sub> проходит через прогретый слой, и затем движется вглубь, постепенно ослабевая, см. рисунок 1.12. Благодаря сверхзвуковому увеличению толщины прогретого слоя на 2T стадии вследствие большой температуропроводности в горячей электронной подсистеме время τ<sub>S</sub> ≫ τ<sub>e-i</sub>.
- Отрицательное давление возникает уже в практически однотемпературном веществе (см. рисунки 1.7 и 1.11), даже в золоте, в котором имеется относительно большое перекрытие двухтемпературной и гид-



Рисунок 1.11 — Давление *р* в волне сжатия—растяжения. Координата *x* отсчитывается от положения невозмущенной поверхности, время *t* от максимума лазерного импульса



Рисунок 1.12 — Формирование волны растяжения (Al,  $F_{\rm abs} = 60 \ {\rm mJ/cm^2}$ ). Профили давления в области растяжения на временах 10–50 пс (цифры на концах линий, пс) и профиль натяжения — максимального отрицательного давления (толстая красная линия).



Рисунок 1.13 — Полное и электронное давление в золоте

родинамической стадий (см. рисунок 1.13). Здесь надо отметить, что для применимости однотемпературного рассмотрения нет необходимости малого различия электронной и ионной температур  $|T_{\rm e} - T_{\rm i}| \ll T_{\rm i}$ , достаточно относительной малости разности электронного вклада при электронной и ионной температурах  $|P_{\rm e}(T_{\rm e}) - P_{\rm e}(T_{\rm i})| \ll \max(|P|, |P_{\rm i}|)$ , что наступает значительно раньше, в связи с быстрым уменьшением электронного вклада при уменьшении температуры.

Последнее позволяет рассматривать начальную 2T стадию воздействия ультракоротких лазерных импульсов на металлическую мишень с помощью двухтемпературной гидродинамики, одномерной, поскольку глубина проникновения возмущений за время 2T стадии  $d_{\rm T}$  мало по сравнению с поперечными размерами, даже при острой фокусировке. В дальнейшем вещество можно рассматривать как однотемпературное.

Поскольку со временем проявляются эффекты, связанные с неодномерностью, как имеющуюся в постановке задачи, так и возникающие вследствие флуктуаций, и неравновесные флуктуационные процессы, не описываемые равновесной гидродинамикой, имеет смысл на этой стадии использовать молекулярную динамику (МД), позволяющую такие эффекты рассмотреть аккуратно,



Рисунок 1.14 — [37, (O1:1:1), рис. 2] Полученный в результате МД—моделирования (В.В. Жаховский) профиль плотности *n*, усредненный по поперечным координатам *y* и *z* при отрыве приповерхностного слоя (абляции). Относительные МД единицы

3D, но классическую однотемпературную, что существенно упрощает моделирование.

Такая комбинированная схема — сначала 2*T*ГД расчет начальной стадии и затем МД, использующее результаты 2*T*ГД как начальное (или граничное) условие — была использована впервые в наших работах по лазерной абляции [O1:1, O2:1] и успешно используется до сих пор.

#### 1.4 Лазерная абляция

При увеличении энергии падающего излучения натяжение (отрицательное давление) в волне растяжения растет и при превышении определенного порога  $F_{\rm abs} > F_{\rm abl}$  превышает предел прочности вещества мишени, что приводит к его разрыву. Поскольку, как отмечалось выше, наибольшее натяжение возникает на некотором расстоянии от поверхности, происходит отрыв приповерхностного слоя вещества конечной толщины.

В наших работах [37;40;41;66;67, (О1:1:1–3, О2:1:1)] и последующих такая абляция была исследована с помощью указанной выше комбинированной схемы — 2*T*ГД расчет начальной стадии и МД моделирование (В.В. Жаховским), использующее результаты 2*T*ГД при задании начальных условий.

Молекулярная динамика дает полное описание процесса, позволяет получить морфологию возникающих структур. Если этого не требуется, а интересуют только достаточно грубые обобщающие характеристики, такие как порог абляции и глубина образующегося кратера, момент разрыва, можно получить их с помощью гидродинамики, добавив дополнительные соображения, выходящие за рамки равновесной гидродинамики — критерия разрыва.

#### 1.4.1 Критерий разрыва

Образование и рост зародышей пустот в растянутом веществе является существенно неравновесным флуктуационным процессом, адекватно описываемым молекулярной динамикой. В качестве простейшего критерия разрыва можно из МД моделирования получить зависимость натяжения, при котором происходит разрыв, от плотности  $p_{\rm cr}(\rho)$  или температуры вещества  $p_{\rm cr}(T)$  (до разрыва давление, плотность и температура связаны уравнением состояния), и считать, что, когда давление падает до  $p \leq p_{cr}$ , происходит разрыв. Для золота получается (1.47), см. рис. 1.15.

$$p_{\rm cr} = -5.04 + 0.0017T - 1.49 \times 10^{-7}T^2 \tag{1.47}$$

При этом, однако, надо учитывать, что при разрыве существенное влияние имеет темп растяжения, и использовать для аппроксимации МД расчеты при сопоставимых условиях.

#### Критерий термофлуктуационной нуклеации

Возникновение кавитационного пузырька в растянутой жидкости в результате тепловой флуктуации рассмотрено в классической работе Б. В. Дерягина [38]. С точностью до главных членов вероятность возникновения критического зародыша в единицу времени [38, ур. (41)] можно записать как

$$\mathbf{v}_{nucl} = \frac{Vc^2\sigma}{\eta(-P)}\sqrt{\Theta\sigma}\exp\left[-\frac{16\pi\sigma^3}{3\Theta P^2}\right],\tag{1.48}$$

где V — рассматриваемый объем, плотность числа частиц  $c = \rho/m_{at}$  ( $\rho$  — плотность,  $m_{at}$  — масса атома),  $\Theta = k_B T$  — температура в энергетических единицах ( $k_B$  — постоянная Больцмана),  $\sigma$  — коэффициент поверхностного натяжения,  $\eta$  — динамическая вязкость. Если

$$t_{ext} \mathbf{v}_{nucl} \ge 1, \tag{1.49}$$

где  $t_{ext}$  — характерное время растяжения, то вещество считается разорвавшимся.

Строго говоря, в работе Б. В. Дерягина [38] рассмотрено возникновение зародыша в жидкости, находящейся при постоянном растягивающем напряжении -*P*. Нет, однако, оснований считать, что перевальная конфигурация, определяющая экспоненту в ((1.48)) может существенно измениться при учете динамики расширения.

Более серьезной причиной, препятствующей использованию критерия (1.48)–(1.49) в одномерной гидродинамике, является то, что поперечным сечением в этом случае является плоскость, имеющая, формально, бесконечную площадь, и, соответственно, объем V является бесконечным. Попытка оценить  $V \sim S_{foc}d$ , где  $S_{foc}$  - площадь фокального (облучаемого) пятна, d - толщина растянутого слоя, приводит к настолько завышенному результату, что, даже несмотря на то, что объем стоит в предэкспоненте, получить результаты, по порядку величины близкие к экспериментам при рассмотрении короткоимпульсного воздействия, оказывается невозможным (для длинных импульсов такая оценка работает достаточно хорошо).

## Критерий «Грэди» [39]

Совершено другой подход к определению условий появления критического зародыша разрыва приведен в работе Д.Е. Грэди [39].

Рассматривается вещество, однородно растягивающееся с постоянным темпом  $\dot{\varepsilon} = -\dot{\rho}/\rho$ , соответственно напряжение растет как  $-P = B_0 \dot{\varepsilon}t = \rho c_0^2 \dot{\varepsilon}t$ [39, ур. (6)], где модуль упругости вещества  $B_0 = \rho c_0^2$ ,  $c_0$  - скорость звука. Одновременно растет «горизонт событий»  $s = 2c_0t$ , в пределах которого растет зародыш разрыва.

В результате для жидкости в случае, когда вязкостью можно пренебречь, что выполнено для расплавов металлов, получается, что растягивающее напряжение -P должно быть больше  $-P_s$ ,

$$-P_s = (6\rho^2 c_0^3 \sigma \dot{\epsilon})^{1/3} \tag{1.50}$$

([39], 34), а время растяжения больше  $t_s$ 

$$t_s = \frac{1}{c_0} \left(\frac{6\sigma}{\rho\dot{\epsilon}}\right)^{1/3} \tag{1.51}$$

([39], 35). Термоактивационная экспонента в критерии (1.50), (1.51) отсутствует. Фактически в работе [39] предполагается, что разрыв происходит сразу, как только создаются условия для возникновения зародыша, пренебрегая термофлуктуационным механизмом его возникновения.

Для не слишком коротких импульсов — микро-наносекундного диапазона — вследствие резкого экспоненциального роста вероятности термонуклеационного рождения зародыша (1.48) за пренебрежимо малое время (порядка пикосекунд) после выполнения условий (1.50), (1.51) натяжение становится таким, что зародыш возникает за пренебрежимо малое время порядка пикосекунд и меньше. Это оправдывает применение критерия (1.50), (1.51) при воздействии таких импульсов.

Ситуация кардинально меняется в случае ультракоротких — пикосекундных и короче — импульсов. При этом характерное время растяжения само оказывается в пикосекундном диапазоне (если длительность импульса меньше времени электрон—ионной релаксации, определяющей длительность 2T стадии, характерные времена определяются последним и оказывается в пикосекундном диапазоне), пренебрегать термофлуктуационной стадией становится невозможным. В результате при воздействии таких импульсов отсутствие в критерии (1.50), (1.51)) термофлуктуационной экспоненты не только не позволяет получить правильных хотя—бы по порядку величины результатов, но и не дает правильных качественных зависимостей.



Рисунок 1.15 — [73, (O1:4:21), рис. 1] Критическое давление разрыва в золоте по результатам МД моделирования (черные круги), аппроксимации (1.47) и ГД расчетам с использованием критерия (1.52) (зеленые кружки)

В рассмотрении [39] есть рациональное соображение, что необходимо рассматривать «причинно—связанную» область — шар, заметаемый звуком за время t<sub>s</sub>. Действительно, рассмотрение зарождения зародыша в объеме, превышающем причинно-связанный нефизично. В работе [38] образование зародыше рассмотрено на фоне в целом неподвижного вещества, при этом причинносвязанный объем бесконечен и рассматриваемый объем определяется геометрией задачи. Для достаточно длинных (миллисекундных) импульсов такое приближение остается применимым. Но при переходе к пикосекундному диапазону, когда время роста до критического объема становится сопоставимым с характерным временем термофлуктуационногоо образования критического зародыша, ограничение рассматриваемого объема причинно-связанным масштабом становится принципиально необходимым, Объем такой области(в обозначениях [39])  $V = (4\pi/3)(c_0t_s)^3$ . Если использовать этот объем как рассматриваемый объем V в (1.48), то, для общности немного изменяя обозначения на используемые в других разделах, можно критерий разрыва записать в виде (см. [73, (О1:4:21), (12)])

$$\frac{(\frac{4}{3}\pi)c_{\rm S}^3 t_{\rm ext}^4}{\eta(-p)} \left(\frac{\rho}{m_{\rm at}}\right)^2 \sigma \sqrt{\sigma k_{\rm B}T} \exp\left(-\frac{16\pi\sigma^3}{3k_{\rm B}Tp^2}\right) \ge 1, \qquad (1.52)$$

где время  $t_{\rm ext} = \min(t_{\rm neg}, \tau_{\rm ext}), t_{\rm neg}$  – время, в течение которого имеется натяжение (отрицательное давление), а  $\tau_{\rm ext}$  вычисляется по темпу растяжения

 $\tau_{\rm ext} = V/\dot{V} = |\rho/\dot{\rho}| = 1/({\rm d}v/{\rm d}x^0), c_{\rm s}$  – скорость звука. Поверхностное натяжение **σ** при высоких температурах известно плохо, ясно, что при стремлении температуры к критической оно должно исчезать. В наших расчетах используется аппроксимация ( [73, (O1:4:21), (13)])

$$\sigma(T) = \sigma(T_{\rm m}) \left(\frac{T_{\rm c} - T}{T_{\rm c} - T_{\rm m}}\right)^{1.25},\qquad(1.53)$$

где  $T_{\rm m}$  и  $T_{\rm c}$  это температура плавления и критическая температура.

В двухтемпературных расчетах температура берется ионная  $T = T_i$  и однотемпературное давление при ионной температуре  $p = p_{1T}(\rho, T_i) = P_i(\rho, T_i) + P_e(\rho, T_i)$ , различие ионной и электронной температур к моменту разрыва мало.

При выполнении условия критерия разрыва в лагранжевой гидродинамике достаточно положить давление в соответствующей ячейке равным нулю, давление пара в возникающей полости пренебрежимо мало.

## 1.4.2 Возникновение кратера и откольной оболочки. Кольца Ньютона

На рисунках 1.16 и 1.17 показан отрыв горячего приповерхностного слоя при небольшом превышении энергии лазерного излучения над критическим  $F_{abs} \ge F_{abl}$  в гидродинамическом расчете с использованием критерия разрыва (1.52). Вероятность разрыва растет с температурой, поэтому, как видно на рис. 1.16, отрыв происходит не при наибольшем напряжении, а несколько ближе к поверхности, где температура выше. Как видно из рисунка 1.17, после разрыва некоторое время продолжается рост максимального натяжения, но, поскольку температура в этой области уменьшается, повторных разрывов при малом превышении энергии над критической не происходит.

При бо́льшей энергии излучения после разрыва максимальное натяжение (отрицательное давление) нарастает быстрее, Динамика давления и плотности в этом случае показана на рисунке 1.18.

Возникающий при отрыве откольный импульс — давление с критического растягивающего скачком сбрасывается до нуля — в оторвавшемся слое быстро релаксирует в движение слоя целиком с малыми колебаниями. В глубь вещества уходит волна сжатия.





Рисунок 1.16 — Профили давления p, температуры T и плотности  $\rho$  перед (t = 18.4 пс) и после разрыва (t = 18.5 и 19 пс) при воздействии излучения с надкритической энергией  $F_{\rm abs} = 70$  мДж/см<sup>2</sup> >  $F_{\rm abl}$  на алюминий

Рисунок 1.17 — Формирование волны растяжения и разрыв при воздействии излучения  $F_{\rm abs} = 70 \ {\rm M} \mbox{Д} \mbox{ж/cm}^2 > F_{\rm abl}$  на алюминий. Обозначения, как на рис. 1.12, штриховая оранжевая линия — профиль натяжения при  $F_{\rm abs} = 60 \ {\rm M} \mbox{Д} \mbox{ж/cm}^2$  — толстая оранжевая линия на рис. 1.12



Рисунок 1.18 — Динамика давления p (слева) и плотности  $\rho$  (справа) при воздействии надкритического излучения  $F_{\rm abs} = 70 \text{ мДж/см}^2 > F_{\rm abl}$  на алюминий





Рисунок 1.19 — Профили плотности  $\rho$  (синяя линия) и давления p(красная линия) после формирования оторвавшегося слоя (t = 20 пс) при поглощенной энергии  $F_{\rm abs} = 80$  мДж/см<sup>2</sup>

Рисунок 1.20 — Формирование волны растяжения и разрывы при воздействии излучения  $F_{\rm abs} = 80 \ {\rm M} \mbox{Д} \mbox{ж/cm}^2$  на алюминий. Обозначения, как на рис. 1.12 и рис. 1.17, штрихпунктирная оранжевая линия — профиль натяжения при  $F_{\rm abs} = 70 \ {\rm M} \mbox{Д} \mbox{ж/cm}^2$  — толстая оранжевая линия на рис. 1.17



Рисунок 1.21 — ([102], рис. 4) Карта плотности в МД моделировании

Принятый термин «откольный» не совсем хорош поскольку отрывается жидкий слой.

При бо́льшей интенсивности излучения становится заметным начальное испарение, создающее пар перед отлетающим слоем, толщина отлетающего слоя уменьшается, между ним и поверхностью остающегося вещества (дном кратера) возникает область, заполненная смесью расплава и пара, в гидродинамическом расчете это слои разной плотности и фазового состояния, разделенные разрывами, возникающими при некотором продолжении роста максимального натяжения после первого разрыва до прихода откольного импульса (см. рисунки 1.19, 1.17, 1.23 и 1.24).



Рисунок 1.22 — Траектории физического состояния  $(T, \rho)$  в лагранжевых ячейках на фоне фазовой диаграммы на плоскости  $\rho - T$ . Цифрами обозначено начальное расстояние ячеек от невозмущенной поверхности  $x^0$ .



Рисунок 1.25 — Динамика давления p (слева) и плотности  $\rho$  (справа) при воздействии излучения с энергией, превышающей критическую ( $F_{\rm abs} = 80 \ {\rm M} {\rm J} {\rm m} {\rm /cm}^2$ , алюминий)



Рисунок 1.24 — Динамика давления p (слева) и плотности  $\rho$  (справа) при воздействии излучения с энергией, заметно превышающей критическую ( $F_{\rm abs} = 100 \text{ мДж/см}^2$ , алюминий)

Аккуратное молекулярно-динамическое моделирование (проведенное В.В. Жаховским) показывает, что эта область заполнена пеной (рис. 1.21).

На рисунке 1.22 показаны траектории физического состояния  $(T, \rho)$  в лагранжевых ячейках, в которых происходит разрыв.

- При  $F_{abs} = 80 \text{ мДж/см}^2$  до глубины  $x_0$  происходит «холодное» поверхностное испарение на существенно 2T стадии. За счет большого электронного давления происходит расширение за спинодаль. При этом при расширении конденсированного вещества накапливается упругая энергия, которая при испарении — пересечении спинодали — переходит в тепловую энергию ионной подсистемы, в результате ионная температура значительно возрастает.
- При x<sub>0</sub> = 21.6 нм происходит первый, и при x<sub>0</sub> = 31.9 нм последний (самый глубокий) разрыв при F<sub>abs</sub> = 80 мДж/см<sup>2</sup>, а при x<sub>0</sub> = 31.5 нм разрыв при F<sub>abs</sub> = 70 мДж/см<sup>2</sup>. При использовании критерия разрыва (1.52) они происходят, не доходя до спинодали. В нашей работе [37, (O1:1:1)] отмечалось, что в МД—моделировании разрыв происходит раньше, чем в ГД—расчете (без использования критерия разрыва). При использовании в ГД—расчете критерия разрыва (1.52) это различие устраняется.
- x<sub>0</sub> = 31.9 нм дно кратера лагранжева ячейка, лежащая сразу после последнего разрыва.



Рисунок 1.25 — Динамика давления p (слева) и плотности  $\rho$  (справа) при превышении порога существования откольной пластины  $F_{\rm ev}$  ( $F_{\rm abs} = 200~{\rm M}{\rm J}{\rm m}/{\rm cm}^2 > F_{\rm ev}$ , алюминий)

С ростом поглощенной энергии толщина оторвавшегося сплошного конденсированного слоя («откольной пластины») уменьшается вплоть до его исчезновения при  $F_{\rm abs} > F_{\rm ev}$ , как видно на рисунке 1.25, скорость, с которой он отлетает растет.

Глубина кратера при этом остается практически постоянной, порядка толщины слоя, прогретого за время двухтемпературной стадии  $d_{\rm T} \sim \sqrt{\kappa_{\rm e}/\alpha}$ , где  $\kappa_{\rm e}$ это коэффициент теплопроводности, большой на 2T стадии,  $\alpha$  — удельный коэффициент электрон—ионного теплообмена. Количество оторвавшегося вещества остается почти постоянным, с увеличением поглощенной энергии уменьшается доля сплошного конденсированного (жидкого) вещества. При переходе к режиму абляции без откольной пластины глубина кратера растет с ростом поглощенной энергии.

Зависимость положения поверхностей откольной пластины и оставшегося вещества в декартовых и лагранжевых переменных от поглощенной энергии в 3 момента времени по результатам гидродинамических расчетов с использованием критерия разрыва (1.52) показана на рисунке 1.26.

Обычно, если не применяется специальных мер, облучаемое пятно имеет форму круга (при наклонном падении эллипса) с интенсивностью излучения в нем, падающей от центра к периферии по Гауссу. Если перерисовать графики рисунка 1.26 с учетом такой зависимости интенсивности, то получится картина, изображенная на рисунке 1.27 — расширяющийся со временем купол,



Рисунок 1.26 — Зависимость положения передней (front) и задней (layer 1 back) поверхностей внешнего отлетающего слоя (откольной пластины) и оставшегося вещества (crater bottom) в декартовых и лагранжевых переменных от поглощенной энергии

утончающийся к вершине, лежащий на практически плоском основании. Это соответствует схеме опытов НЬютона (с перевернутой линзой), что объясняет появление «колец Ньютона» в микрофотографиях отраженного зондирующего импульса (см. рис. 2). Увемичение высоты купола по мере отлета оторвавшегося слоя приводит к увеличению числа колец, что наблюдается в экспериментах.

Толщина жидкого слоя, образующего купол, порядка толщины слоя, прогретого за время двухтемпературной стадии  $d_{\rm T} \sim \sqrt{\kappa_{\rm e}/\alpha}$ . В золоте, в котором электронная теплопроводность  $\kappa_{\rm e}$  и время электрон—ионной релаксации  $\tau_{\rm e-i} \sim c_{\rm e}/\alpha$  велики, купол получается толстым и непрозрачным, поэтому при абляции золота «колец Ньютона» не наблюдалось.

Такая форма откольного купола была получена в наших работах [37;41; 66; 67; 102; 103, (O1:1:1-2)] (В.В. Жаховским) на основе МД—моделирования. (см. рис. 1.28). Купол состоит из конденсированного (жидкого) вещества, расположенного между линиями I<sub>u</sub> и I<sub>d</sub> — «откольной пластины». Пространство под куполом до дна кратера d<sub>cr</sub> (стрелки f) заволнено двухфазной смесью пены



Рисунок 1.27 — Откольный купол при t = 30, 50 и 100 пс в предположении гауссовой зависимости интенсивности излучения от радиуса



Рисунок 1.28 — ([67, (О1:1:3), рис. 4]) Рисунок 1.29 — ([67, (О1:1:3), рис. 5]) Карты плотности, полученные в серии Форма купола на основе МД расчетов, МД расчетов с различными начальными температурами, иллюстрирующие изменения в материале мишени вдоль

радиуса лазерного пятна.



Рисунок 1.30 — ( [67, (O1:1:3), рис. 7]) Сравнение экспериментальной и расчетных интенферограмм. Левый и правый снимки показывают теоретически рассчитанную интенсивность света, полученную в результате интерференции отраженного от поверхности мишени зондирующего луча и опорного луча. Контрольный луч распространяется под небольшим углом к отраженному. Геометрия купола взята из рис. 1.29. На правом снимке комплексный показатель преломления в двухфазной смеси между куполом и кратером был выбран просто как  $n_{\rm mix} = 1$ , тогда как на левом снимке было учтено небольшое поглощение света в этой области ( $n_{\rm mix} = 1 + 0.2i$ ), что делает картину более похожей на эксперимент.

из жидкого вещества и пара. Если нитенсивность излучения в центре пятна  $F_{\rm abl}(0) > F_{\rm ev}$ , то до радиуса, обозначенного стрелкой "ev" в куполе появляется отверстие (толщина слоя равна нулю).

Как видно, ГД расчет с использованием критерия разрыва (1.52), рис. 1.27 дает практически ту же форму купола, как МД—моделирование, рис. 1.29.

Как показано на рис. 1.30, расчет интерференции луча, отраженного от такого купола при наклонном падении зондирующего импульса, и опорного луча, что соответствует эксперименту [27], дает интерферограмму, хорошо соответствующую экспериментальной.

Суммируя полученные в главе результаты:

– При воздействии ультракороткого (фс– пс диапазона) лазерного импульса на металлическую мишень возникает двухтемпературное состояние, с электронной температурой, значительно превосходящей ионную *T*<sub>e</sub> ≫ *T*<sub>i</sub>. Несмотря на краткость 2*T*—фазы, она существенно влияет на дальнейшие процессы.

Разработанная схема 2T—гидродинамики ( $2T\Gamma Д$ ) позволила впервые корректно описать 2T эффекты в конденсированном веществе мишеней.

В частности проанализировано принципиальное отличие гомогенного плавления в широкой области по мере постепенного подтягивания ионной температуры к электронной от движения фронта плавления (задачи Стефана) в однотемпературном случае.

- Молекулярно—динамическое (МД) моделирование, стартующее с состояния, полученного в 2ТГД расчете, или 2ТГД расчет с использованием впервые предложенного варианта критерия разрыва (1.52) дает правильное описание процесса откольной абляции. Получаемые порог абляции, момент отрыва, толщина отрывающегося слоя и его скорость точно соответствуют экспериментальным результатам.
- При учете радиального распределения интенсивности лазерного излучения — падения интенсивности излучения от центра к периферии лазерного пятна — отлетающий слой имеет вид полупрозрачного купола, опирающегося на практически плоское основание, что соответствует схеме в опытах Ньютона (с перевернутой линзой). Это позволило впервые объяснить наблюдающиеся при лазерной абляции «кольца Ньютона» в микрофотографиях отраженного зондирующего импульса.

## Глава 2. Откольная абляция диэлектриков (О1:2, О2:2)

Эксперименты (см., например, [104; 105, (O1:2:9)] показывают (см. рис. 2.1), что при воздействии ультракоротких (пикосекундных) импульсов рентгеновского—жесткого ультрафиолетового диапазона порог абляции оказывается значительно меньше, чем при воздействии более длинных импульсов, меньше, чем необходимо для испарения или разложения удаляемого вещества. При этом зависимости оказываются аналогичными рассмотренным выше в главе 1 при воздействии ультракоротких лазерных импульсов на металлы.

Существенно, что при этом акустическое время  $\tau_{\rm s} \approx d_{\rm T}/c_{\rm s} \gg \tau$ , где  $d_{\rm T}$  — толщина прогретого слоя,  $c_{\rm s}$  — скорость звука,  $\tau$  — длительность импульса. В металлах толщина слоя, прогретого на 2T—стадии, (см. 1.2.1, 1.3.2),  $d_{\rm T} \sim \sqrt{\chi_{\rm e} \tau_{\rm e-i}} = \sqrt{\kappa_{\rm e}/\alpha} \gg d_{\rm skin}$ ,  $\tau_{\rm e-i}$ — время электрон—ионной релаксации. При воздействии рентгеновского излучения  $d_{\rm T}$  определяется глубиной его проникновения  $D_{\rm att}$ , которая сразу большая,  $D_{\rm att} \gg d_{\rm skin}$  при воздействии оптических лазеров на металлы.

В отличие от металлов, рассмотренных в главе 1, у которых всегда есть электроны в зоне проводимости, и именно они поглощают лазерное излучение, в диэлектриках в невозбужденном состоянии при комнатной температуре зона проводимости практически пустая. При возбуждении электроны должны преодолеть большую щель между валентной зоной и зоной проводимости.

При воздействии оптического лазерного излучения достаточно эффективное поглощение возможно только при большой интенсивности излучения, когда начальное возбуждение электронов в зону проводимости на оптических неоднородностях или в многофотонных процессах затем переходит в лавинообразное нарастание числа электронов в зоне проводимости (см., например, [106; 107]). При более жестком излучении — жесткий ультрафиолет, рентгеновские лазеры на свободных электронах — поглощение излучения с возбуждением электронов в зону проводимости становится эффективным, что приводит к уменьшению порога абляции и делает возможным использование коротких импульсов — нет необходимости ждать развития лавинного роста числа проводящих электронов.



Рисунок 2.1 – [104, рис. 2] (а) Увеличенное в 40 раз изображение пятна фокусировки пучка XRL, полученное на поверхности кристалла LiF. (b) Увеличенная часть изображения с отмеченным пятном абляции. (с) Изображение того же пятна, полученное с помощью видимого микроскопа. (d) Трассировка и изобра-

жение того же пятна, измеренные с помощью ACM.  $F\sim 10~{\rm M}{\rm J}{\rm ж}/{\rm cm}2$ 

# 2.1 Уравнения двухтемпературной гидродинамики для диэлектриков

В отличие от рассмотренных в главе 1 металлов, плотность числа электронов в зоне проводимости  $n_{\rm e}$  возрастает в результате ионизации электронов из валентной зоны в зону проводимости рентгеновскими фотонами и затем медленно релаксирует к величине, соответствующей электронной температуре  $T_{\rm e}$ и уменьшается вместе с ней.  $n_{\rm e}$ , или степень ионизации  $Z = n_{\rm e}/n$ , см. [108–111, (O1:2:12,13, O2:2:3)], где n — плотность числа атомов или молекул, в рассматриваемом ниже случае LiF пар Li и F, становится новой динамической переменной, для которой надо писать свое уравнение

$$\frac{\partial n_{\rm e}}{\partial t} = \frac{Q}{\varepsilon_{\gamma}} + \nu_{\rm imp} n_{\rm e} - \kappa_{\rm ree} n_{\rm e}^3, \qquad (2.1)$$

где  $\varepsilon_{\gamma} = \hbar \omega_{\rm L}$  – энергия фотона.

Первичные ионы образуются при фотоионизации. За фотоионизацией следуют (i) ударная ионизация, (ii) Оже—процессы с участием одного внутреннего и одного свободного электронов, и (iii) трехчастичная рекомбинация с участием двух свободных электронов и одного иона. В рассматриваемом ниже LiF Оже рекомбинация с двумя внутренними электронами невозможна.

Уравнение (2.1) дополняет при рассмотрении диэлектриков систему уравнений двухтемпературной гидродинамики (1.4)–(1.8), рассматривавшуюся выше в главе 1 для металлов. При этом в уравнении для электронной подсистемы (см. (1.7)) появляется дополнительный член, учитывающий затрату энергии на ионизацию электронов в зону проводимости  $\Delta \frac{\partial n_e}{\partial t}$ , где  $\Delta$  — ширина запрещенной зоны:

$$\frac{\partial E_{\rm e}}{\partial t} = \frac{1}{\rho^0} \frac{\partial}{\partial x^0} \left( \frac{\kappa_{\rm e} \rho}{\rho^0} \frac{\partial T_{\rm e}}{\partial x^0} \right) - \alpha_{\rho} (T_{\rm e} - T_{\rm i}) + \frac{Q}{\rho} - \frac{P_{\rm e}}{\rho^0} \frac{\partial v}{\partial x^0} - \Delta \frac{\partial n_{\rm e}}{\partial t}.$$
 (2.2)

Энергия электронов в зоне проводимости  $E_{\rm e} = \tilde{E}_{\rm e}/\rho$  отсчитывается от дна зоны и включает как тепловой вклад, так и нулевую фермиевскую энергию электронов с концентрацией  $n_{\rm e}$ . Ее интерполяционная аппроксимация может быть записана в виде

$$\tilde{E}(n_{\rm e}, T_{\rm e}) = \frac{1}{2} n_{\rm e} \sqrt{\left(\frac{6}{5}\tilde{E}_{\rm F}\right)^2 + (3k_{\rm B}T_{\rm e})^2}, \qquad \tilde{E}_{\rm F} = (3\pi^2)^{2/3}\hbar^2 n_{\rm e}^{2/3}/2m_{\rm e}.$$
(2.3)

Электронное давление  $P_{\rm e} = (2/3)\tilde{E}_{\rm e}$ .

Уравнение теплового баланса ионной подсистемы

$$\frac{\partial E_{\rm i}}{\partial t} = \frac{1}{\rho^0} \frac{\partial}{\partial x^0} \left( \frac{\kappa_{\rm i} \rho}{\rho^0} \frac{\partial T_{\rm i}}{\partial x^0} \right) + \alpha_{\rho} (T_{\rm e} - T_{\rm i}) - \frac{P_{\rm i}}{\rho^0} \frac{\partial v}{\partial x^0}, \tag{2.4}$$

и уравнения гидродинамики при одномерном движении вдоль оси x

$$\frac{\partial x}{\partial t} = v, \tag{2.5}$$

$$\rho \, \frac{\partial x}{\partial x^0} = \rho^0, \tag{2.6}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{1}{\rho^0} \frac{\partial P}{\partial x^0}, \qquad P = P_{\rm e} + P_{\rm i}. \tag{2.7}$$

в лагранжевых координатах с начальной координатой  $x^0$  в качестве лагранжевой переменной сохраняются; плотность  $\rho$  предполагается в начальный момент постоянной равной  $\rho^0$ .

Поток лазерной энергии в уравнениях (2.1) и (2.4) считаем экспоненциально спадающим с глубиной с гауссовым профилем по времени, отсчитываемого от максимума импульса

$$Q = \frac{F}{\sqrt{\pi}D_{\rm att}\tau} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \exp\left(-\frac{x^0}{D_{\rm att}}\right)$$
(2.8)

## 2.1.1 Уравнения состояния и кинетические коэффициенты в двухтемпературном LiF

Для интегрирования системы дифференциальных уравнений (2.1)-(2.7) необходимо знать уравнения состояния для электронной и ионной подсистем вещества мишени, а также кинетические коэффициенты: частоту ударной ионизации  $\nu_{\rm imp}$ , коэффициент трехчастичной рекомбинации  $\kappa_{\rm ree}$ , коэффициенты теплопроводности и коэффициент электрон—ионного теплообмена  $\alpha$ .

Частота ударной ионизации электронов  $\nu_{imp}$ , бралась, следуя [112], как половина суммы частот для ионизации атомов Li и F: e+Li  $\rightarrow$  Li+e+e, e+F  $\rightarrow$  F+e+e, при этом потенциал ионизации заменялся на ширину щели  $\Delta$ 

(см. [105, (О1:2:9)]):

$$\begin{split} \mathbf{v}_{\rm imp}^{\rm Li} = & < v_{\rm e} \sigma_{\rm imp}^{\rm Li} > n \ [{\rm c}^{-1}], \\ & < v_{\rm e} \sigma_{\rm imp}^{\rm Li} > = 11 \times 10^{-8} \sqrt{\beta/\beta + 1} / (\beta + 1.5) {\rm e}^{-\beta} \ [{\rm cm}^3/{\rm c}], \quad \beta = \Delta/T_{\rm e} \\ & \mathbf{v}_{\rm imp}^{\rm F} = & < v_{\rm e} \sigma_{\rm imp}^{\rm F} > n, \quad < v_{\rm e} \sigma_{\rm imp}^{\rm F} > = 0.7 \times 10^{-8} \sqrt{\beta/\beta + 1} / (\beta + 0.18) {\rm e}^{-\beta} \end{split}$$

Коэффициент трехчастичной рекомбинации находится из принципа детального равновесия (см. [112]) и, аналогично, складывается из рекомбинации с участием атомов Li и F:

$$\begin{aligned} \kappa_{\rm ree} &= (5.1 \times 10^{-6} a_0^3 \sqrt{\beta/(\beta+1)} \beta^{3/2}/(\beta+1.5) \\ &+ 0.87 \times 10^{-6} a_0^3 \sqrt{\beta/(\beta+1)} \beta^{3/2}/(\beta+1.8))/2, \ a_0 = 5.29 \text{ cm} \end{aligned}$$

Коэффициенты теплопроводности не только ионный, но и электронный, в диэлектрике малы. К тому же, в отличие отслучая воздействия оптических лазеров на металлы, когда лазерное излучение поглощается в тонком скин—слое у поверхности и затем переносится в глубину благодаря теплопроводности, при воздействии рентгеновского излучения на диэлектрики глубина проникновения  $D_{\rm att}$  велика, градиенты температуры малы, и теплопроводностью можно пренебречь.

### Уравнение состояния

Из сравнения термодинамических свойств однотемпературных ( $T_{\rm e} = T_{\rm i}$ ) LiF и алюминия [54; 57; 59; 113], показанного на рисунке 2.2, видно, что при умеренных температурах они практически совпадают. Это позволяет для ионного вклада  $E_{\rm i}(\rho, T_{\rm i}), p_{\rm i}(\rho, T_{\rm i})$  использовать хорошо разработанное широкодиапазонное уравнение состояния алюминия [54; 57; 59; 113].

### 2.1.2 Электрон-ионный теплообмен

В алюминии как простом металле удельный коэффициент электронионного теплообмена в грубом приближении может считаться практически по-


Рисунок 2.2 — [109;110, (О1:2:11,13), рис. 4] (а) «Холодные кривые» («нулевые» изотермы  $p(\rho, T) = 0$  совпадают с «нулевыми» адиабатами  $p(\rho, S = 0)$  и (b) ударные адиабаты для LiFu Al по [54; 57; 59; 113].

стоянным. Для металлов с более сложной электронной структурой он может немонотонно зависеть от температуры, см. 1.1.3, рис. 1.3.

В диэлектриках возникает существенная зависимость коэффициента электрон—ионного теплообмена от меняющейся в широких пределах степени ионизации. Результаты теоретического изучения электрон—ионного взаимодействия в кристаллическом LiF показаны на рисунке 2.3. Расчеты проводились с учетом того, что этот ионный кристалл стремится стать кристаллом ковалентного типа с увеличением концентрации свободных носителей  $n_{\rm e}$ . Сильное поляронное взаимодействие в основном с легким ионом Li<sup>+</sup> быстро увеличивает  $\alpha$  с увеличением  $n_{\rm e}$ , как это видно на рисунке 2.3, кривая "i". Но при больших концентрациях  $n_{\rm e}$  ионный кристалл переходит в конфигурацию, подобную ковалентному кристаллу, так как положительный избыток электронного заряда иона F<sup>-</sup> постепенно исчезает по мере увеличения числа электронов, поднятых из валентной зоны. Этот процесс ограничивает рост  $\alpha$ , см. кривую "c" на рис. 2.3. Широкодиапазонную аппроксимацию, использовавшуюся в расчетах, мож-



Рисунок 2.3 — [109, (O1:2:11), рис. 6] Зависимость коэффициента электрон—ионного теплообмена  $\alpha$  от электронной температуры  $T_{\rm e}$  при равновесной степени ионизации  $Z(T_{\rm e})$ : і — ионный кристалл и оптические фононы, с — ковалентный кристалл с возбуждением оптических и акустических мод, а — широкодиапазонная аппроксимация (2.9).

но записать как

$$\begin{aligned} \alpha(T_{\rm e}, Z) &= \alpha(Te) * Z, \qquad Z = n_{\rm e}/n, \qquad n = \rho/m_{\rm LiF} \\ \alpha(T_{\rm e}) &= \alpha_0 \frac{\exp\left(-\left(\frac{t}{1.5}\right)^{0.8}\right)}{(1+4t)^{0.6}} \left(1 + \frac{2}{1+0.1t^4}\right), \qquad t = T_{\rm e}/10^4 \text{ K (2.9)} \\ \alpha_\rho &= \alpha(T_{\rm e}, Z)/\rho, \qquad \alpha_0 = 1.7 \times 10^{20} \text{ Br/m/K} \end{aligned}$$

ИЛИ

$$\alpha(T_{\rm e}, Z) = \alpha_0 (17Z^{0.27} - 13.5Z + 1.98Z^2) \Big( 1 - (0.6 - 0.3Z + 0.1Z^{1.4}) (10^{-5}T_{\rm e} - 0.1) \Big),$$

 $\alpha_0 = 10^{17} \text{ Br/m/K}$ , что при равновесном  $Z(T_{\rm e})$  дает практически совпадающий результат. Аппроксимация (2.9) при равновесном  $Z(T_{\rm e})$  показана на рис 2.3 кривой "а".

#### 2.2 Динамика нагрева кристалла LiF

Система уравнений (2.1)–(2.7) с параметрами, определенными в разделах 2.1.1–2.1.2, была использована для численного моделирования воздействия жесткого ультрафиолетового излучения лазера на свободных электронах на диэлектрический кристалл LiF в соответствии с экспериментальными условиями [104; 105; 108–110, (O1:2:9–13)].

Под действием лазерного излучения происходит возбуждение электронов в зону проводимости и их нагрев, а затем энергия передается ионам (атомам) благодаря электрон-ионному теплообмену (см. рис. 2.4) К моменту времени t = 0 выделяется половина энергии лазерного импульса. Концентрация Z быстро нарастает во время импульса, ее рост немного продолжается, пока интенсивность велика, а затем она медленно спадает вследствие релаксации (см. рис. 2.4, (Z)). Энергия, выделившаяся при релаксации, увеличивает электронную температуру  $T_{\rm e}$ , поэтому ее рост продолжается немного дольше. Ионная температура  $T_{\rm i}$  подтягивается к электронной в результате электрон—ионного теплообмена и продолжает расти, когда  $T_{\rm e}$  уже убывает (см. рис. 2.4, (T)).

Около порога абляции  $F_{abl} \approx 10 \text{ мДж/см}^2$  максимальная электронная температура составляет  $T_{\rm e} \approx 20 \text{ кK}$ , максимальная степень ионизации Z около 3%, электрон—ионная релаксация длится время  $\tau_{\rm eq} \sim 1$  пс, максимум ионной температуры  $T_{\rm i}$  равен 1.5 кК. При флюенсе  $F = 180 \text{ мДж/см}^2$  (наибольшем в экспериментах [109; 110, (O1:2:11, 13)]) соответствующие параметры составляют:  $T_{\rm e}|_{\rm max} \approx 100 \text{ kK}, Z|_{\rm max} \approx 0.4$ –0.5 (в сжатой области LiF с плотностью  $\rho \approx 2.6 \text{ г/см3}$  в момент времени, близкий к моменту установления электрон ионного равновесия),  $T_{\rm i}|_{\rm max} \approx 10 \text{ kK}, t_{\rm eq} \approx 1$ –2 пс.

#### 2.3 Распространение волны сжатия/расширения

На рис. 2.5, 2.6 показано образование и распространение ударной волны в кристалле после действия лазерного импульса с параметрами, характерными для эксперимента: длительность импульса  $\tau_{\rm L} = 300$  фс, энергия фотона 20,2 эВ, глубина проникновения  $D_{\rm att} = 9$  нм. Толщина прогретого слоя в ди-



Рисунок 2.4 — Нагрев LiF при воздействии импульса EUV-FEL-лазера (без учета движения вещества). Рост концентрации электронов в зоне проводимости  $Z = n_{\rm e}/n$  вследствие фотоионизации и ее уменьшение в результате релаксации (Z). Рост и уменьшение электронной  $T_{\rm e}$  и ионной  $T_{\rm i}$  температур. Штриховой линией Q(t) показан временной профиль интенсивности.



Рисунок 2.5 — Электронное  $P_{\rm e}$ , ионное  $P_{\rm i}$  и полное  $P = P_{\rm e} + P_{\rm i}$  давление в LiF после действия импульса EUV—FEL—лазера с интенсивностью вблизи порога абляции ( $\tau_{\rm L} = 800$  фс, F = 10 мДж/см<sup>2</sup>).



Рисунок 2.6 — [110, (O1:2:13), рис. 5] Формирование волны сжатия (слева) и возникновение ударной волны в результате обрушения волны сжатия (справа) после действия импульса EUV—FEL—лазера с интенсивностью вблизи порога абляции ( $\tau_{\rm L} = 800$  фс, F = 10 мДж/см<sup>2</sup>). Числами над кривыми обозначено время в пикосекундах, отсчитанное от момента максимума импульса.



Рисунок 2.7 — [110, (O1:2:13), рис. 6] Формирование акустического возмущения и ударной волны после действия сильного импульса EUV—FEL—лазера ( $\tau_{\rm L} = 800 \ {\rm dc}, \ F = 180 \ {\rm m} {\rm Jm}/{\rm cm}^2$ ). Числами над кривыми обозначено время в пикосекундах, отсчитанное от момента максимума импульса.

электрике, определяемая глубиной проникновения излучения  $D_{\text{att}}$ , оказывается меньше, чем в случае металлов [64; 91; 114; 115], в которых толщина скин—слоя на оптических кристаллах меньше  $D_{\text{att}}$ , но происходит быстрое сверхзвуковое распространение тепловой волны на 2T—стадии, отсутствующее в диэлектриках. Поэтому ударная волна в LiF возникает раньше, чем в металлах.

Поскольку время передачи энергии от электронов ионам больше, чем  $\tau_{\rm L} = 300$  фс, а по мере передачи энергии от электронов к ионам давление растет, так как коэффициент Грюнайзена ионов больше, чем электронов (при равной внутренней энергии электронов и ионов давление  $P_{\rm e}$  меньше, чем  $P_{\rm i}$ ), максимум полного давления  $P = P_{\rm e} + P_{\rm i}$  достигается немного позже окончания действия импульса. Пройдя некоторое расстояние вглубь образца, образовавшаяся волна сжатия обрушается вследствие своей нелинейности и образует скачок давления (ударную волну). Чем большей нелинейностью характеризуется волна сжатия (чем больше флюенс F и соответственно давление P), тем быстрее она обрушается. Сформированная ударная волна ослабевает по мере своего распространения по образцу (см. рис. 2.6, 2.7). Ослабление ударной волны происходит быстрее для сильно нелинейных волн.

#### 2.4 Предельное растягивающее напряжение и разрыв

Зависимости  $|p_{neg}|_{max}(x^0)$  на рис. 2.8 показывают, как максимальные значения растягивающих напряжений  $|p_{neg}|_{max}$  изменяются в пространстве и времени, когда волны сжатия и расширения распространяются вглубь кристалла LiF. Как было сказано в разделе 2.1.1, при численном моделировании динамики абляции LiF использовалось уравнение состояния алюминия [54; 59], причем дополнительного критерия разрыва не включалась. Такой подход не позволяет получить отрыв откольной пластины прямо в гидродинамическом расчете — разрыв был бы только на спинодали алюминия, лежащей при значительно больших напряжениях.

Толщину откольной пластины можно оценить следующим образом.

Зависимость прочности вещества мишени от температуры  $p_{\text{lim}}(T)$  оценивается на уровне 50—80% от прочности алюминия при соответствующих высоких



Рисунок 2.8 — [110, (О1:2:13), рис. 7] Зависимости максимального растягивающего напряжения |p<sub>neg</sub>|<sub>max</sub> от лагранжевой координаты  $x^0$  (сплошные линии). Цифрами у линий указан флюенс F, мДж/см<sup>2</sup>. Штриховая линия — прочность материала  $p_{\text{lim}}$  для случая F = 10 мДж/см<sup>2</sup>.

скоростях деформации, известным по данным работы [115, (O1:3:14)], и может быть аппроксимирована выражением  $p_{\text{lim}}$  [ГПа] =  $-4.1 + 1.3T_{\text{i}}$  [кK]. Полученная при моделировании зависимость  $T_{\text{i}}(x)$  позволяет получить зависимость  $p_{\text{lim}}(x^0) = p_{\text{lim}}(T_{\text{i}}(x^0))$ . На рисунке 2.8 эта зависимость — профиль прочности вещества мишени  $p_{\text{lim}}(x^0)$  при нагреве ее импульсом ультрафиолетового лазера с  $F = 10 \text{ мДж/см}^2$  в зависимости от лагранжевой координаты материальной точки мишени — показана штриховой линией. Пересечение кривых  $p_{\text{lim}}(x^0)$  и  $|p_{\text{neg}}|_{\text{max}}(x^0)$  дает значение лагранжевой координаты точки разрыва (см. рис. 2.8). Полученный результат соответствует экспериментальным данным, что свидетельствует о справедливости предложенного механизма абляции.

Ультракороткие ультрафиолетовые лазерные импульсы с низкими значениями флюенса  $F \sim F_{abl}$ , рассматривавшиеся в работе [105, (O1:2:9)], в которой был предложен механизм откольной абляции диэлектриков, и с большими значениями  $F \sim 200 \text{ мДж/см}^2$ , изученные в [109; 110, (O1:2:11, 13)]), создают различные по величине отрицательные давления, вызывающие откольную абляцию. Из рисунков 2.6–2.8 видно, что в околопороговом случае отрицательные давления достигаются на ранней стадии на небольшой глубине  $\approx 10$  нм, и их амплитуда  $|p_{\text{neg}}| \approx 3.5$  ГПа составляет примерно половину амплитуды волны сжатия. При больших флюенсах отрицательные давления появляются позже, на значительной глубине, при этом их максимальная амплитуда  $|p_{\text{neg}}|_{\text{max}}$  того же порядка, что и в околопороговом случае. Но теперь она составляет только малую часть (менее, чем 0.1 при  $F = 180 \text{ мДж/см}^2$ ) максимального давления на волне сжатия. При этом температуры в приповерхностном слое (см. рис. 2.4, (T)) достигают величин, при которых становятся существенными другие механизмы абляции, приводящие к появлению в абляционном факеле смеси мелкодисперсного вещества и газа, в отличие от металлов в случае LiF это не плавление—испарение, а, скорее, разложение вещества.

Таким образом:

- При воздействии на прозрачные диэлектрики ультракоротких (пикофемтосекундного диапазона) рентгеновских (ультрафиолетовых) импульсов необходимо схему двухтемпературной гидродинамики (1.4)-(1.8), рассмотренную выше в главе 1 для металлов, дополнить уравнением для дополнительной термодинамической переменной плотности числа электронов в зоне проводимости (степенью ионизации) 2.1.
- Использование такой дополненной схемы впервые позволило корректно описать происходящую при этом термомеханическую абляцию диэлектриков, в частности значительное снижение порога абляции по сравнению с наблюдаемым для более длительных импульсов (микросекундных и длиннее).

#### Глава 3. Прохождение тепловых и акустических возмущений через мишень конечной толщины. Ударные волны. (01:3, 02:3)

Выше в главе 1 рассматривались процессы вблизи нагреваемой лазером поверхности. Для экспериментального наблюдения таких процессов зондирующие импульсы посылаются на то же место мишени, что и греющий импульс. Возможна другая постановка экспериментов, когда зондирующие импульсы посылаются на тыльную поверхность, и наблюдение ведется за волной, прошедшей через мишень. При этом проявляются процессы, происходящие в веществе мишени под действием распространяющейся тепловой и акустической (ударной) волны.

При исследовании выхода возмущения, вызванного лазерным импульсом, на тыльную поверхность в работе [115, (O1:3:14)] было показано, что, хотя гидродинамический расчет — применение системы уравнений 1.4–1.8 — с использованием равновесного уравнения состояния (см. 1.1.2), как было рассмотрено в 1.2–1.4, дает качественно правильные результаты, время прихода возмущения



Рисунок 3.1 — [115, (O1:3:14), рис. 7] Сопоставление теории с экспериментом. Смещение тыльных поверхностей алюминиевых пленок толщиной 350 и 1200 нм. Сплошные кривые — МД, штриховые — 2*Т*ГД (с равновесным уравнением состояния)

оказывается больше, чем в эксперименте и МД—моделировании, как это показано на рисунке 3.1. Причиной этого, как было отмечено в [115, (O1:3:14)] и подробнее проанализировано в [116;117, O2:3:4], является то, при гидродинамическом расчете с равновесным УРС не учитывается сдвиговая упругость.

#### 3.1 Учет упругого сдвигового напряжения в 1D—гидродинамике [118, (O2:3:5)]

Принципиальным отличием твердого вещества от жидкости и газа является стремление к сохранению формы. При ее изменении возникает сдвиговое напряжение. В линейном приближении для сплошной среды, исходно однородной и изотропной, при одноосном движении вдоль оси *x* оно пропорционально деформации

$$S_{xx} = \frac{4}{3}G\frac{\partial\xi}{\partial x^0},\tag{3.1}$$

где  $\xi = x - x^0$ , G — модуль сдвига.

Таким образом

$$S_{xx} = \frac{4}{3}G\left(\frac{\partial x}{\partial x^0} - 1\right) = \frac{4}{3}G\left(\frac{\rho^0}{\rho} - 1\right)$$

(с учетом уравнения непрерывности (1.5)  $\partial x(x^0,t)/\partial x^0 = \rho^0/\rho$ ).

Это напряжение прибавляется к изотропному гидростатическому напряжению, определяемому равновесным УРС,  $-P_{\rm h}$ , и суммарное действующее напряжение становится анизотропным. В интересующем нас направлении движения

$$P_{xx} \equiv -\sigma_{xx} = P_{\rm h} - S_{xx}. \tag{3.2}$$

Уравнение движения вещества вдоль оси x (1.6) приобретает вид

$$\frac{\partial v(x^0,t)}{\partial t} = -\frac{1}{\rho^0} \frac{\partial P_{xx}(x^0,t)}{\partial x^0}, \qquad P_{xx} = P_{\rm h} - S_{xx}, \quad P_{\rm h} = P_{\rm e} + P_{\rm i}.$$

В связи с тем, что модуль сдвига G составляет значительную долю модуля объемного сжатия K, упругая скорость звука  $c_{\rm el} = \sqrt{(K + \frac{4}{3}G)/\rho}$  оказывается заметно больше, чем скорость звука в пластичном веществе  $c_{\rm pl} = \sqrt{K/\rho}$ .

Одновременно с напряжением сдвига возникает соответствующий вклад в энергию. При вышеуказанных предположениях вклад в удельную энергию, связанный с упругим сдвигом,

$$E_S = \frac{4}{3} \frac{G}{2\rho^0} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x^0}\right)^2$$

Легко оценить, что этот вклад мал, однако, вблизи границы плавления, при определении температуры по УРС  $T = T(\rho, E_h)$  различие E и  $E_h = E - E_S$  может привести к неправильному определению фазового состояния вещества.

Поскольку

$$\mathbf{p}^{0}\frac{\partial E_{S}}{\partial t} = \frac{4}{3}G\frac{\partial(x-x^{0})}{\partial x^{0}}\frac{\partial^{2}(x-x^{0})}{\partial t\partial x^{0}} = S_{xx}\frac{\partial v}{\partial x^{0}}$$

в уравнении теплового баланса вклад энергии и напряжения сдвига тождественно сокращаются. Как отмечалось в 1.1.1, это справедливо для любого сбалансированного вклада, не зависящего от температуры. Таким образом, уравнения (1.7), (1.8) полностью сохраняются и при учете упругого сдвига в упругом твердом теле.

Пока рассматривается только одноосное движение в веществе, которое остается упругим твердым, учет сдвигового напряжения можно рассматривать как модификацию уравнения состояния. Однако гидростатическое давление, задаваемое уравнением состояния, и сдвиговый вклад принципиально различны. Последний зависит не только от текущего состояния вещества, но и от предыстории. Например, если вещество было расплавлено — при этом сдвиговые напряжения пропадают — а затем снова затвердело, деформацию  $\xi$  в (3.1) надо отсчитывать уже не от исходного состояния, а от того, в котором вещество затвердело. В результате при возвращении к нормальной плотности при комнатной температуре в веществе останутся сдвиговые напряжения.

Сдвиговая упругость постепенно разрушается при достаточно большом напряжении. Происходит это в процессе зарождения и динамики дислокаций, аккуратно рассмотреть которую можно только в рамках молекулярно—динамического моделирования. Учитывая результаты такого моделирования, можно написать уравнение на  $S_{xx}$  как дополнительную динамическую переменную в гидродинамическом приближении, как это сделано, например, в [119;120]. Ниже настолько большие деформации и динамика  $S_{xx}$  рассматриваться не будут.

В жидкой фазе и более высокотемпературных фазах сдвиговое напряжение отсутствует. Молекулярно—динамическое моделирование показывает, что при плавлении материала сдвиговое напряжение не исчезает сразу, но, по крайней мере вблизи солидуса, уменьшается постепенно. Для двухфазной области жидкость—твердое тело ниже будет использоваться следующее простое сглаживающее приближение, обобщающее (3.1):

$$S_{xx} = F_{\text{sol}} \times S_1, \quad S_1 = \frac{4}{3} G\left(\frac{\partial x}{\partial x^0} - R_c\right),$$
(3.3)

где  $F_{\rm sol}$  — доля твердой фазы, а  $R_{\rm c}$  сначала равен 1, а затем берется такой, чтобы  $S_{xx}$  и  $S_1$  не увеличивались по абсолютной величине. Соответственно изменяется и формула для энергии

$$E_S = \frac{1}{2\rho^0} S_{xx} \left( \frac{\partial x}{\partial x^0} - R_c \right).$$
(3.4)

Поскольку  $F_{sol}$  зависит от  $T_i$ , в уравнении (1.8) в двухфазной области необходимо рассмотреть непосредственно вклад  $E_S$  в энергию и  $-S_{xx}$  в давление. При расчетах это приводит к тому, что при плавлении вещества энергия упругого сдвига переходит в тепловую, усиливая плавление. В результате расслоение двухфазной области происходит быстрее. Сравнение с молекулярно динамическим моделированием показывает, что этот эффект существует и в используемой схеме учтен недостаточно.

### 3.2 Влияние сдвиговой упругости в гидродинамических расчетах ([118;121, (O2:3:5, O1:3:18)])

В наших работах [118;121, (O2:3:5, O1:3:18)] гидродинамические расчеты, проведенные в [115, (O1:3:14)] с использованием 2*T*—гидродинамики без сдвиговой упругости, были повторены с ее включением в расчет.

Моделируется воздействие лазерного импульса с длительностью 150 фс (по полуширине) и плотностью поглощаемой энергии в центральной области 1,3 Дж/см<sup>2</sup>, направленного через стеклянную подложку на осажденную алюминиевую пленку с толщинами 350, 500, 760 и 1200 нм. С учетом отражения, поглощенная энергия  $F_{\rm abs} \approx 130 \text{ мДж/см}^2$ . В расчетах временной профиль импульса был взят гауссовым с  $\tau = 100$  фс. Уравнение состояния и кинетические коэффициенты для алюминия, лежащего при  $x^0 > 0$ , использовались, как в 1.2.



Рисунок 3.2 — [121, (O1:3:18), рис. 1] (a) Распределения температуры и энергии в конце нагрева с помощью короткого лазерного импульса, когда достигаются максимальные значения электронных термодинамических параметров.

(b) Возникновение сдвигового напряжения и его исчезновение при плавлении.

(c) Сдвиговое напряжение при движении волны сжатия из расплава в твердое вещество

Пренебрегая различием акустических свойств алюминия и стекла, в расчетах для ионной подсистемы всюду использовалось широкодиапазонное уравнение состояния алюминия (см. 1.1.2, [59]). В стекле (при  $x^0 < 0$ ) электронный вклад в энергию и давление и теплопроводность отсутствуют.

# 3.2.1 Напряжение сдвига в твердом теле на 2*T* стадии и распространение волны сжатия от жидкости к твердому телу ([121, (O1:3:18)])

На рисунке 3.2 представлено гидродинамическое моделирование с учетом сдвиговой упругости.

На ранней 2*T*—стадии вся поглощенная энергия в металле вкладывается во внутреннюю энергию электронов  $E_{\rm e}$  см. рис. 3.2 (а). Энергия когезии для Al составляет  $\approx 3$  эB/атом. На ранней стадии энергия  $E_{\rm e}$  превышает это значение. При контакте нагреваемой поверхности с вакуумом (воздухом) это приводит к отрыву тонкого поверхностного слоя, см. 1.2.2. Стекло препятствует расширению этого слоя, а быстрый (сверхзвуковой) отток энергии благодаря теплопроводности (передача энергии в ионную подсистему на таких временах мала) снижает локальную тепловую энергию со значений, значительно превышающих ее величину в критической точке, до значений порядка нескольких теплот плавления.

Большое давление, изначально электронное, приводит к расширению нагретого слоя вглубь и в сторону стекла. Рис. 3.2 (b) иллюстрирует процессы формирования упругого сдвигового напряжения в Al вследствие расширения в стекло и снятия сдвигового напряжения в результате плавления. Показаны три момента. Для нагрева ионной подсистемы выше температуры плавления, соответствующей текущему локальному давлению, необходим конечный интервал времени. В течение этого интервала горячее твердое тело вблизи контакта стекло—Al одноосно растягивается в направлении к стеклу, в основном, за счет электронного давления Pe. В результате возникает напряжение сдвига. На временном интервале 0  $\rightarrow$  0.3 пс сначала появляется тонкий слой растянутого кристалла, затем появляется растянутый жидко-твердый слой (он сосуществует с растянутым твердым телом), после чего кристалл плавится, и напряжение сдвига падает до нуля. В момент времени t = 0.3 пс жидкость контактирует с правой стороны с толстым слоем сжатой твердожидкостной смеси. Слой этой смеси ограничен с левой стороны ликвидусом, а с правой стороны солидусом. Точка x = 26 нм при t = 0.3 пс соответствует мгновенному положению солидуса. Вблизи солидуса при t = 0.3 пс происходит некоторое сжатие металла. Это приводит к образованию отрицательного напряжения S<sub>xx</sub>. Но электронный перенос тепла на ранней 27-стадии является сверхзвуковым, поэтому степень сжатия мала, а абсолютные значения этих отрицательных напряжений пренебрежимо малы, так как они пропорциональны степени сжатия.

Тепловой транспорт проходит гиперзвуковую, трансзвуковую и дозвуковую стадии в течение интервала времени, показанного на рис. 3.2 (с). Число Маха скорости смещения точки ликвидуса уменьшается с  $\approx 5$  до  $\approx 0.02$  на этом интервале. Значительно позже на временном масштабе 0.1–1 нс в результате рекристаллизации происходит затвердевание расплавленного слоя, если толщина алюминиевой пленки значительно превышает термическую глубину  $d_T \approx 100$  нм [122]. Трансзвуковой переход длится от 4 до 6 пс. Это этап, когда преимущественно тепловая эволюция переходит в преимущественно механическую. Профили ионных термодинамических параметров  $T_i, E_i, P_i$  имеют перегибы, см. 1.3.1. До перехода эти перегибы "сидят" в точках солидуса и ликвидуса. Но после трансзвукового перехода термодинамические перегибы отделяются от динамических: перегибы на профилях  $T_i, E_i$  остаются в точках солидуса и ликвидуса, а перегибы на профилях давления отделяются от точек солидуса и ликвидуса. Это происходит при обгоне волной сжатия резко замедляющейся тепловой волны. Перегибы на профилях давления являются "изображениями" солидуса и ликвидуса. Они движутся вдоль акустических характеристик, распространяющихся в объеме.

### 3.2.2 Движение волны сжатия по упруго-пластичному веществу ([118, (O2:3:5)])

При малых временах учет упругого напряжения сдвига приводит в значительной степени к замене им ионного давления  $P_i$ , общее давление  $P_{xx} = P_h - S_{xx}$ (изотропное  $P = P_h$ , если сдвиговое напряжение не учитывается) изменяется меньше (см. рис. 3.3). Видно увеличение скорости волны. Так, на рис. 3.3 слева профиль давления в расчете с учетом напряжения сдвига в момент времени t = 10 пс лучше соответствует времени t = 11 пс в расчете без напряжения сдвига, а справа t = 20 пс лучше соответствует t = 22 пс без учета сдвига. Со временем разница становится больше (рис. 3.3 справа – 20 пс).

Еще более существенные различия проявляются при выходе волны на поверхность пленки, и, особенно, после ее отражения от поверхности (рис. 3.4). Напряжение сдвига приводит к значительному увеличению тормозящего напряжения и, следовательно, более быстрому замедлению поверхности пленки.

Затем в области наибольшего напряжения происходит холодное плавление вещества, что приводит к его расширению и снятию напряжения сдвига (рис. 3.5). Это приводит к уменьшению тормозящего напряжения и некоторому ускорению поверхности пленки, предшествующему ее отрыву. Возможно, с этим механизмом связано сложное немонотонное движение пленки, которое наблюдается экспериментально.

Поскольку плавление идет с затратой энергии, это понижает ионную температуру, но в растянутом веществе оно приводит к снятию упругого сдвигового напряжения и преобразованию упругой энергии сдвига в тепловую энергию ионной подсистемы и, в результате, росту ионной температуры, как видно на рис. 3.5 справа. Это может быть механизмом разрыва — в расплавленном веществе,



Рисунок 3.3 — [118, (O2:3:5), рис. 1,2] Профили давления в моменты времени t = 10 пс (слева) и 20 пс (справа). Здесь и далее жирная линия — полное давление с учетом напряжения сдвига  $P_{xx} = P_{\rm h} - S_{xx}$ , пунктир — гидростатическое давление  $P_{\rm h} = P_{\rm i} + P_{\rm e}$ , штрихи — сдвиговое напряжение  $-S_{xx}$ , тонкая линия — давление в расчете без сдвиговой упругости, и толстая линия точка—тире — давление в расчете без сдвиговой упругости в последующий момент времени



Рисунок 3.4 — [118, (O2:3:5), рис. 3,4] Выход волны на поверхность 500 нм пленки (t = 65 пс) (справа) и волна после отражения от поверхности (t = 70 пс)



Рисунок 3.5 — [118, (O2:3:5), рис. 5] Профили давления (слева) и температур (справа) в момент времени t = 90 пс



Рисунок 3.6 — [118, (O2:3:5), рис. 6] Временные профили смещения тыльных поверхностей 350, 500 и 760 нм пленок в эксперименте [118, (O2:3:5)] и гидродинамическом расчете без сдвиговой упругости и с ее учетом



Рисунок 3.7 — [117, (O2:3:4), рис. 1] Сравнение упругих (S<sub>el</sub>) и пластических (S<sub>pl</sub>) адиабат Гюгонио с экспериментом [115; 123, (O1:3:14)] (кресты, горизонтальные и вертикальные размеры крестов дают погрешность измерения)

к тому же с большей температурой, вероятность разрыва значительно больше, чем в твердом.

Сравнение временных зависимостей смещения тыльных поверхностей пленок в расчете с напряжением сдвига и без него показано на рис. 3.6. Видно, что учет напряжения сдвига приводит к гораздо лучшему согласию между расчетами и экспериментальными результатами [115, (O1:3:14)].

#### 3.3 Упругопластические явления в сильных ударных волнах. Сверхупругость [117, (O2:3:4)]

Сравнение расчетов с экспериментами показывает, что вещество в ударных волнах (УВ), вызванных воздействием УКЛИ, остается упругим (см. рис. 3.6) — скорость звука "упругая", с вкладом сдвигового напряжения — даже когда скорость УВ и напряжение в ней значительно превосходят классический предел упругости Гюгонио, см. 3.7

На рис. 3.7 маркерами в виде крестов представлены данные, полученные в фемтосекундных лазерных экспериментах, описанных в [115; 123, (O1:3:14)],



Рисунок 3.8 — [117, (O2:3:4), рис. 2] Упругая (S<sub>el</sub>) и пластическая (S<sub>pl</sub>) ударные адиабаты. Соответствующий рисунку 3.7 отрезок МД S<sub>el</sub> охватывает диапазон давлений 7,4—33 ГПа. Маркерные кружки получены с помощью МД расчетов. Нижний кружок с P = 7.4 ГПа соответствует нижнему кружочку на рис. 3.7

в сравнении с упругой ( $S_{\rm el}$ ) и пластической ( $S_{\rm pl}$ ) адиабатами Гюгонио. Для  $S_{\rm pl}$  зависимость для скорости ударной волны  $D_{\rm pl} = c_{\rm pl} + 1.37 u_p$  аппроксимирует большое количество экспериментальных данных по алюминию [59], здесь  $u_p$  — скорость частиц вещества за фронтом ударной волны (скорость поршня),  $c_{\rm pl} = 5.35$  км/с. Все скорости приведены относительно вещества перед волной. Упругая адиабата  $S_{\rm el}$ , показанная на рис. 3.7 прямой пунктирной линией, проходит через кружки, полученные в результате молекулярно—динамического (МД) моделирования [116; 124] с потенциалом ЕАМ (Embedded Atom Method, метод погруженного атома) для алюминия, взятым согласно [114]. Это упругая адиабата одноосного ударного сжатия монокристаллического гцк алюминия по направлению [111]. Ее аппроксимация имеет вид  $D = c + ku_p$  с коэффициентами c = 7.051 км/с, k = 1.581.

На рис. 3.8 показаны адиабаты  $S_{\rm el}$  и  $S_{\rm pl}$  на плоскости  $P - V/V_0$ . В то время как пластическая адиабата  $S_{\rm pl}$  не ограничена высокими скоростями и деформациями и переходит в жидкую адиабату в точке пересечения с кривой плавления (точка пересечения находится вне рамок рис. 3.7, 3.8), упругая адиабата  $S_{\rm el}$  проходит над маркером HEL и ограничена на больших амплитудах теоретическим пределом сдвиговой прочности. Это расширение выделено на рис. 3.8 жирными штрихами и заканчивается ограничивающим маркером в виде сплошного кружка HEL\*. Как показано в [124], для алюминия предел  $p_{\text{HEL}*} \approx 30$  ГПа. В этом смысле, идеальный кристалл за ударным фронтом, связанным с участком упругой адиабаты  $S_{\text{el}}$  между HEL и HEL\*, находится в метастабильном упруго сжатом ("сверхупругом") состоянии. Распад этого состояния идет через образование, движение и размножение дислокаций и, следовательно, происходит за время, определяемое положением в интервале между HEL и HEL\*. Таким образом, происходит релаксация напряжения сдвига и переход от упругого к пластическому состоянию. Обычно это время находится в пикосекундной области. Вблизи HEL\* одноосная деформация настолько велика, что кристаллическая ячейка разрушается во фронте ударной волны в слое толщиной порядка нескольких межатомных расстояний за время порядка 0,1 пс. На интервале 0— HEL ударно—сжатый кристалл стабилен.

С расширением упругого адиабатического НЕL появляется возможность нового режима распространения VB: устойчивое сосуществование упругой и пластической волн [125]. Стационарная одноволновая двузонная конфигурация соответствует линии Рэлея, проходящей через три точки (1,0), ( $v_{\rm ew}$ ,  $P_{\rm ew}$ ) и  $P_{\rm stat}$  на рис. 3.8 (ew — упругая волна). В этом режиме существуют две зоны — упругая и пластическая. При постоянном давлении на поршень  $P_{\rm stat}$  ( $P_{\rm OD} < P_{\rm stat} < P_{\rm OD}$ \*) расстояние  $d_{\rm el}$  между упругим и пластическим фронтами практически не изменяется со временем (стационарно). Состояние вещества в упругой зоне представлено точкой  $P_{\rm ew}$  на рис. 3.8. Это состояние находится на продолжении упругой адиабаты, найденном в статьях [116;124] (жирные штрихи на рис. 3.8). Упругий материал тверже пластически преобразованного, соответственно упругая адиабата круче пластической. Поэтому прямая (1,0) –  $P_{\rm ew}$  –  $P_{\rm stat}$ , сначала пересекает упругую адиабату. Точка  $P_{\rm stat}$  принадлежит пластической адиабате. Эта точка представляет собой пластически преобразованное состояние за фронтом пластической волны.

На рис. 3.9 показаны профили скорости вещества (справа) и смещение поверхности Al (справа) из MD (тонкая черная линия), 2*T*-hd (толстая синяя линия) и 2*T*ГД с учетом сдвиговой упругости (красная штриховая линия) расчетов с условиями, соответствующими эксперименту [126] (справа — прямоугольные маркеры): алюминиевая фольга начальной толщины 400 нм на стекле, поглощенная энергия  $F_{\rm abs} = 2.6 \ \text{Дж/см}^2$ , длительность импульса  $\tau_{\rm L} = 0.12$  пс.



Рисунок 3.9 — Слева [117, (О2:3:4), рис. 3] совместное распределение справа налево упругого предвестника и пластического фронта при воздействии лазерного импульса с  $I_{\rm inc} = 7.7 \cdot 10^{13} \text{ Bt/cm}^2$ ,  $\tau_{\rm L} = 0.12$  пс из работы [126], что соответствует  $F_{\rm abs} \approx 2.6 \text{ Дж/см}^2$ . Справа [117, (О2:3:4), рис. 4] смещение границы со стеклом  $\Delta x$  (на рисунке справа обозначена линией В) при прохождении через нее волны сжатия. Тонкая черная линия — MD, толстая синяя —  $2T\Gamma$ Д, красная штриховая — с учетом сдвиговой упругости, прямоугольные маркеры — эксперимент [126]. Упругая зона толщиной  $d_{\rm el} = 70$  нм в МД между упругой ударной волной (скачок справа) и пластическим фронтом (скачок слева) отмечена двусторонней горизонтальной стрелкой.

Значение  $F_{\rm abs} = 2.6 \ \text{Дж/см}^2 = AF_{\rm inc}$  соответствует интенсивности падающего излучения  $I_{\rm inc} = 7.7 \cdot 10^{13} \ \text{Bt/cm}^2$ . [126]

В этом МД расчете кристалл ориентирован в направлении [110] относительно оси движения x. В качестве начала координат x = 0 принимается начальное положение фронтальной границы пленки. Эта граница подвергается воздействию греющего импульса. Концентрация случайно рассеянных точечных вакансий в кристалле перед волной составляет  $10^{-3}$  на атом. Вакансии были введены для оценки роли дефектов. В  $2T\GammaД$  коде используется пластическое уравнение состояния [54; 59; 115], поэтому упругая зона на гидродинамическом профиле отсутствует "(см. рис. 3.9, толстая синяя линия), некоторое повышение давления связано с опережающим движением тепловой волны. При учете сдвиговой упругости, как описано в 3.1 появляется упругий предвестник (рис. 3.9, красная штриховая линия), однако при использованных в расчете параметрах меньше, чем в МД. МД моделирование согласуется с  $2T\GammaД$  расчетами по амплитуде и ширине пластически сжатой зоны. Упругое  $p_{ew}$  и пластическое  $p_{up}$  (см. рис. 3.8) давления за соответствующими ударными фронтами в момент, показанный на рис. 3.9, составляют 20 и 93 ГПа. Это значение  $p_{ew}$ примерно вдвое превышает значение  $p_{ew}$ , достигнутое в экспериментах [115;123].

Как видно из рис. 3.9 справа, МД расчет (тонкая черная сплошная линия) хорошо согласуется с экспериментальными данными [126] (прямоугольные маркеры). В [126] присутствие предвестника было замечено, но его происхождение осталось необъясненным. Тогда казалась невероятной идея о существовании упругих эффектов в волнах большой амплитуды. Расчетные и экспериментальные данные согласуются по времени выхода предвестника и пластической волны на поверхность пленки и скорости вещества за предвестником и пластической ударной волной (0.7 км/с и 3–4 км/с, сравните с МД профилем на рис. 3.9). Таким образом, эксперимент подтверждает существование упругого предвестника перед пластическим скачком с амплитудой 1 Мбар.

Таким образом

 В динамике твердых тел существенную роль играет сдвиговая упругость. Без ее учета качественная картина движения сохраняется, но скорости получаются неправильными (заниженными)

Разработанная модель с включением сдвиговой упругости позволяет (впервые) получить результаты, полностью соответствующие МД—моделированию и экспериментам.

В том числе показано, что вещество в короткой треугольной ударной волне (УВ) остается упругим (скорость УВ соответствует упругому веществу) несмотря на значительное превышение классического порога упругости, что позволило объяснить эксперимент [126].

### Глава 4. Воздействие коротких лазерных импульсов на тонкие пленки на подложке и многослойные мишени (01:4, 02:4)

Как правило, в экспериментах облучаемая мишень состоит из металлической фольги (может быть несколько слоев разных металлов), нанесенной на диэлектрическую (стеклянную) подложку. Если нагрев и наблюдение осуществляются со стороны свободной поверхности, и толщина пленки достаточно большая, чтобы за интересующее время идущие в глубь пленки тепловые и акустические возмущения не успевали отразиться от границы пленки с подложкой, то наличием пленки можно пренебречь, и считать мишень сплошной бесконечно толстой, как это делалось в главе 1, 1.2–1.4. В остальных случаях наличие подложки необходимо учитывать.

Если подложка прозрачная, нагрев возможен как со стороны свободной поверхности, так и через подложку. В последнем случае интенсивность падающего излучения ограничена пробоем вещества подложки. Если термодинамические свойства металла и вещества подложки близки, как это имеет место с алюминиевой пленкой на стеклянной подложке, можно при рассмотрении процессов в пленке пренебречь различием свойств пленки и подложки и использовать всюду единое уравнение состояния, учитывая только, что излучение начинает поглощаться от границы металла, а в стекле отсутствует подсистема свободных электронов проводимости и, соответственно, электронная теплопроводность. Та-



Рисунок 4.1 — Металлическая пленка на подложке

кой подход был использован в главе 3. Как правило, однако, свойства пленки и подложки различаются достаточно сильно.

### 4.1 Особенности использования лагранжевой гидродинамики при наличии слоев различных веществ

Лагранжевы координаты привязаны к веществу. Целесообразно выбирать лагранжеву сетку так, чтобы все границы вещества и различных слоев лежали в узлах сетки. При этом каждая ячейка заполнена одним веществом, и это сохраняется при движении. Для описания каждого вещества (пленка, подложка), лежащего в определенном интервале  $x^0$  (определенном интервале целых номеров ячеек) используется свое уравнение состояния (УРС), свои коэффициенты электрон—ионного теплообмена и теплопроводности. В частности, если металлическая пленка лежит при  $x^0 > 0$ , а стеклянная подложка при  $x^0 < 0$ , то при  $x^0 > 0$  используется полная система уравнений 2T—гидродинамики (1.4)–(1.8) с электронным и ионным УРС металла, его коэффициентами электрон—ионного теплообмена и теплопроводности, а при  $x^0 < 0$  для стекла используется 1T гидродинамика без уравнения теплового баланса электронной подсистемы (1.7), отсутствующей в стекле, с УРС стекла. Отдельная электронная температура в стекке отсутствует, для общности представления берется  $T_e = T_i = T$ .

В стекле движение, как правило, практически адиабатическое. Это позволяет в уравнении (1.6) для давления P использовать аппроксимацию адиабаты  $P = P(\rho)$ , см. 1.1.2, (1.27). При этом тепловой баланс в стекле можно вообще не рассматривать. Если же, используя (1.8), сосчитать изменение энергии  $E_i = E$ , то можно ввести фиктивную температуру  $T = E/c_V$  ( $c_V$  – теплоемкость). Такая фиктивная температура соответствует действительной температуре, при использовании УРС  $P = P(\rho, T), E = c_V T$ , которому соответствует используемая адиабата. Использование полноценного УРС  $P = P(\rho, T), E = E(\rho, T)$  позволяет, при необходимости, учесть прогрев стекла при действии лазерного импульса. Для этого тепловой источник переносится в уравнение (1.8). При использовании такого УРС при необходимости может быть учтена и теплопроводность в подложке, хотя, как уже указывалось, обычно она пренебрежимо мала.

Лагранжеая переменная — массовая. Если начальная плотность постоянна  $\rho^0 = \text{const}$ , можно, вводя  $\zeta = \rho^0 x^0$  и вынося постоянное  $\rho^0$  из под дифференциала  $d\zeta = \rho^0 dx^0$ , использовать вместо лагранжевой переменной начальную координату  $x^0$ , как это сделано выше в уравнениях (1.4)–(1.8) при рассмотрении однородных мишеней в главе 1 и дальше. При переходе к разностной схеме если взять сетку с постоянным шагом по  $x^0$ :  $x^0_{I+1} - x^0_I = \Delta x^0$  по  $\zeta$  будет постоянный шаг  $\rho^0 \Delta x^0$ .

При наличии слоев различных веществ (пленка на подложке), находящихся исходно в равновесном состоянии (p = 0, атмосферным давлением пренебрегаем) при комнатной температуре, их равновесная плотность будет различной. Можно по—прежнему использовать координату  $x^0$ , понимая ее как  $x^0 = \zeta/\rho^0$ . Тогда в металлической пленке она является начальной координатой  $x(x^0 > 0, t_{\text{init}}) = x^0$ , но в стекле начальная координата будет отличаться:  $x(x^0 < 0, t_{\text{init}}) = x^0 \rho^0 / \rho_{\text{glass}}^0$ , где  $\rho_{\text{glass}}^0$ — начальная равновесная плотность стекла. Если в численной схеме взять сетку с постоянным шагом по  $\zeta$  равным  $\rho^0 \Delta x^0$ , то длина ячейки в металле будет  $\Delta x^0$ , а в подложке  $\Delta x^0 \rho^0 / \rho_{\text{glass}}^0$ , и при большом различии плотностей металла и вещества подложки может быть большой.

При использовании обобщенной лагранжевой схемы, в которой масса в ячейке фиксируется в начальный момент и может быть различна в различных ячейках, можно сохранить разбиение по  $x^0$  с постоянным шагом  $\Delta x^0$ , при этом масса в каждой ячейке пропорциональна равновесной плотности вещества, находящейся в данной ячейке ( $\rho^0 \Delta x^0$  в металлической пленке при  $x^0 > 0$  и  $\rho_{glass}^0 \Delta x^0$  в подложке при  $x^0 < 0$ ). Такая обобщенная схема может быть удобна при рассмотрении многомерного движения (цилиндрически, сферически симметричного). Тогда в сетке с постоянным шагом по радиусу  $r_I^0 = \Delta r^0 I$  масса в ячейках будет расти с номером ячейки  $\propto (I+1)^D - I^D$ , при цилиндрической симметрии 2I+1, при сферической 3I<sup>2</sup>+3I+1. Если, однако, основной интерес представляет приповерхностная область, а внутренние слои можно рассматривать грубее, может быть более выгодна схема с классическим постоянным шагом по  $\zeta$ . В этом случае  $r_I^0 \propto I^{1/D}$ .

Различные слои удерживаются вместе благодаря адгезии. Величина адгезии — предельное напряжение, при превышении которого происходит отрыв одного слоя от другого — может быть очень разной в зависимости от контактирующих веществ и их фазового состояния. МД моделирование показывает, что при контакте жидких слоев (расплавов) величина адгезии может быть промежуточной между прочностями контактирующих слоев, т.е. больше, чем прочность более слабого слоя. При контакте твердых слоев (пленка на подложке) адгезия обычно меньше (может быть значительно меньше) прочности контактирующих слоев. При этом возникает возможность существования дополнительного порога, при превышении которого  $F_{\rm abs} > F_{\rm del}$  напряжение на границе слоев достигает величины адгезии и слои разрываются. Порог  $F_{\rm del}$  может быть не только меньше порога разрыва вещества пленки  $F_{\rm abl}$ , который рассматривался выше в главе 1, 1.4, но и порога  $F_{\rm melt}$ , при превышении которого начинается плавление пленки — пленка может оторваться от подложки не плавясь.

### 4.2 Металлические пленки на подложке: Осцилляции и отслоение пленки от подложки [73;127;128, O1:4:20-22]

Рассмотрим динамику расположенной на стеклянной подложке тонкой металлической пленки, облученной ультракоротким лазерным импульсом. Как указывалось выше, в зависимости от вложенной в пленку энергии  $F_{abs}$  существуют три режима. Они разделены двумя порогами  $F_{del}$  и  $F_{abl}$ . Ниже первого порога (порога расслоения)  $F_{del}$  пленка остается на подложке. Величина этого порога определяется прочностью адгезии между стеклом и пленкой. Между порогами  $F_{del}$  и  $F_{abl}$  пленка отслаивается от стекла. Фактически, она отслаивается целиком. Выше порога  $F_{abl}$  пленка разрушается. Более того, разрушение пленки происходит до того, как волна растягивающего напряжения достигает контакта стекла с металлом.

### 4.2.1 Колебания пленки на подложке $(F_{abs} < F_{del})$ [73;127, (O1:4:21,20, §3)]

Колебательный режим движения пленки был прослежен в нашей работе [73, (O1:4:21)] на примере расчетов, проведенных для пленки серебра толщиной 60 нм на стекле Ругех в качестве подложки. Такой режим возникает при достаточно малой энергии импульса, когда максимальное напряжение на гра-



Рисунок 4.2 — Профили температуры и давления ко времени окончании лазерного импульса ( $t = \tau_{\rm L} = 40~{\rm dc},~F_{\rm abs} = 0.7~{\rm m}{\rm J}{\rm m}/{\rm cm}^2$ )

нице пленки и подложки, отрывающее пленку от подложки, остается меньше напряжения адгезии, которое останавливает отделение пленки от подложки.

Для серебра используется квазифермиевское УРС (1.9)-(1.10) для электронной подсистемы, широкодиапазонное табулированное УРС (по типу 1.1.2) для ионной подсистемы и соответствующие выражения электронной теплопроводности и коэффициента электрон-ионного теплообмена, для стекла используется адиабата (1.27). Начальный шаг сетки в стекле (при  $x^0 < 0$ ) взят в  $\rho^0/\rho_{\text{glass}}^0 = 4.7039$  раз больше, чем в серебре (при  $x^0 > 0$ ), что обеспечивает правильную начальную плотность. Ионная теплопроводность в пленке и теплопроводность стекла отсутствует. Тепло по электронной подсистеме не может выйти из пленки, поэтому она быстро прогревается по всей толщине. Серебряная пленка толщиной  $d_{\rm f} = 60$  нм является тонкой в том смысле, что толщина  $d_{\rm f} < d_T$  толщины слоя, прогреваемого на 2T стадии в объемной мишени. В результате уже на существенно-27 стадии к концу действия лазерного импульса профиль температуры оказывается практически выровненным по всей толщине, см. рис. 4.2. Затем ионная температура в пленке подтягивается к практически выровненной по толщине электронной температуре. При этом зависимость от того, с какой стороны падает лазерное излучение - со стороны свободной поверхности или через стеклянную подложку — почти исчезает.

Колебания определяются прохождением волн от одной поверхности пленки к другой с отражением от свободной поверхности и частичным отражением

от границы с подложкой. Частичное проникновение волны в подложку приводит к затуханию колебаний.

Полученные в результате расчетов профили скорости и давления показаны на рисунках 4.3 и 4.4.

Лазерный нагрев приводит к росту температуры и давления в пленке, сначала электронного, затем, по мере электрон-ионной релаксации, ионного. В результате, во-первых, от границы между пленкой и подложкой и от свободной поверхности пленки выходят волны сжатия, вызванные нагревом пленки (см. рисунок 4.3, вверху, t = 3.6 пс). При t = 8 пс эти волны встречаются на середине пленки, образуя острие на профиле давления. Затем волна, отраженная от свободной поверхности пленки, приходит к границе пленки со стеклом, а волна, отраженная от этой границы, приходит к свободной поверхности в виде волн растяжения (см. рисунок 4.3, t = 21 пс). При t = 24 пс эти волны встречаются на середине пленки. После этого волна, которая стала волной растяжения, отразившись от границы со стеклом, и, отразившись от свободной поверхности, снова стала волной сжатия, снова достигает границы со стеклом (см. рисунок 4.3, внизу). Это определяет негармоническую, скорее трапециевидную, даже близкую к прямоугольной форму профиля колебаний скорости и давления. Частичное проникновение волн сжатия-расширения в стекло при их выходе на границу пленки со стеклом определяет затухание колебаний.

Период колебаний определяется прохождением звуковой волны через пленку. Форма колебаний не меняется при изменении поглощенной энергии, а их амплитуда практически пропорциональна поглощенной энергии, что показано на рис. 4.4, верхняя и средняя панель — поглощенная энергия отличается в 10 раз — 0.07 и 0.7 мДж/см<sup>2</sup> (как на рис. 4.3).

В расчете без упругого напряжения сдвига (рис. 4.4 внизу) скорость звука оказывается ниже, а период колебаний длиннее. Рост и спад получаются более плавными.

Возмущения скорости вещества и давления, переходящие в стеклянную подложку, затем движутся в ней вглубь со скоростью звука, см. рис. 4.5. Поэтому представленные на рисунке 4.4 мгновенные профили отражают временные профили этих величин на границе пленки и подложки.

Временной профиль электронной температуры, показанный на рисунке 4.6, напоминает треугольную волну и хорошо коррелирует с экспериментальными данными [129]. Без упругого напряжения сдвига (пунктирная линия на





Рисунок 4.3 — [73, (O1:4:21), рис. 2] Колебательный режим в серебряной пленке толщиной 60 нм под действием лазерного импульса  $F_{\rm abs} = 0.7 \, {\rm M} {\rm Д} {\rm m} / {\rm cm}^2$  в различные моменты времени. Профили скорости (м/с, слева) и давления (ГПа, справа) в металлической пленке (расположена справа) и прилегающей стеклянной подложке (расположена слева). В металле показано давление: полное  $P_{xx}$ ,

ионное  $P_{\rm i}$ , электронное  $P_{\rm e}$  и напряжение сдвига  $S_{xx}$ ; в стекле — полное.



Рисунок 4.4 — [73, (O1:4:21), рис. 3] Колебательный режим как на рис. 4.3, при t = 100 пс под действием  $F_{\rm abs} = 0.07$  мДж/см<sup>2</sup> (сверху), 0.7 мДж/см<sup>2</sup> (посередине) и под действием 0.7 мДж/см<sup>2</sup> без учета сдвиговой упругости (снизу)



Рисунок 4.5 — Динамика скорости вещества (v), давления (полного,  $P_{xx}$ ) и электронной температуры  $(T_{\rm e})$  в пленке серебра, лежащей на стеклянной подложке, под действием лазерного импульса  $F_{\rm abs} = 0.7$  мДж/см<sup>2</sup>.

рисунке 4.6) период колебаний, как обсуждалось выше в главе 3, 3.2, больше, чем экспериментально наблюдаемый. Таким образом, учет упругого напряжения сдвига имеет большое значение.

Аналогичные колебания возникают и при воздействии достаточно слабого импульса  $F_{\rm abs} < F_{\rm del}$  на тонкую золотую пленку на подложке.

На рисунках 4.7–4.8 показаны затухающие колебания золотой пленки, наблюдаемые при воздействии импульса с энергией ниже порога отслоения пленки от стекла  $F_{\rm abs} = 10 \text{ мДж/см}^2 < F_{\rm del}$ . Контакт с вакуумом справа. Мгновенное положение левого контакта золото—стекло видно по скачку на профиле давления. Скачок обусловлен большой разницей в плотности стекла (2,23 г/см<sup>3</sup>) и золота (19,3 г/см<sup>3</sup>). Давление в стекле существенно меньше давления в золоте, так как акустический импеданс стекла ( $z_{\rm glass} = \rho_{\rm glass}c_{\rm glass} = 0.87 \times 10^6 \text{ г/см}^2$ ) мал по сравнению с акустическим импедансом золота ( $z_{Au} = \rho_{Au}c_{Au} = 5.9 \times 10^6 \text{ г/см}^2$ ). Отношение импедансов золота и стекла равно q = 6.8.

Возникновение движения, показанного на рис. 4.7–4.8, обусловлено быстрым нагревом пленки. Время нагрева электронной подсистемы всей пленки имеет величину порядка одной пикосекунды. Это время мало по сравнению с акустическим масштабом. Поэтому, по сути, происходит «удар» по пленке. Фактически на границах пленки с вакуумом и стеклом возникает ситуация с коллапсом сброса давления, так как давление в металле быстро возрастает за 1 пс, а распад происходит на акустическом временном масштабе, который имеет больший порядок величины.



Рисунок 4.6 — [73, (O1:4:21), рис. 4] Колебательный режим в серебряной пленке толщиной 60 нм под действием лазерного импульса  $F_{\rm abs} = 0.7 \, {\rm M} {\rm J} {\rm m} {\rm /cm}^2$ . Электронная температура вблизи свободной поверхности в расчете с учетом упругого напряжения сдвига (сплошная линия) и без его учета (пунктирная). Вставка в верху рисунка показывает коэффициент отражения, полученный в эксперименте [129, Рис. 1]



Рисунок 4.7 — Колебательный режим при воздействии  $F_{\rm abs} = 10 \text{ мДж/см}^2 < F_{\rm del}$  на золотую пленку толщиной  $d_{\rm f} = 60$  нм на стеклянной подложке. Начальная стадия (t = 3, 10 и 20 пс, [127, (O1:4:20), рис. 2] слева) и излучение акустических волн в стекло (t = 80, 100 и 150 пс, [127, (O1:4:20), рис. 3] справа).



Рисунок 4.8 — [127, (O1:4:20), рис. 4] Затухающие колебания давления на контакте между золотом и стеклом

Соответственно, колебания пленки, показанные на рис. 4.7 и 4.8, как и колебания серебряной пленки на рис. 4.3–4.4, далеки от синусоидальных колебаний. Они имеют острые углы, за которыми следует быстрый рост давления на левой и правой границах пленки. Резкий рост давления на рис. 4.8 в моменты времени  $t \approx 0, 40, 80, 120$  пс обусловлен выходом волы сжатия на правую границу (границу с вакуумом). Резкие падения давления на временах порядка 20, 60, 100 и 140 пс на рис. 4.8 вызваны приходом фронта волны разрежения от правой границы (вакуум) на левую границу (стекло).

Надо отметить, что если распространение тепловой волны в двухтемпературном металле происходит быстро, то двухтемпературная релаксация в золоте довольно велика и составляет 10—15 пс. Это связано с большой массой ионов золота, из—за чего замедляется электрон—ионный теплообмен. Таким образом, время релаксации имеет порядок звукового времени в тонкой пленке  $t_s = d_f/c_s$ . Во время релаксации общее давление меняется от преимущественно электронного (на начальном этапе двухтемпературной фазы) к преимущественно ионному (после двухтемпературной стадии). Это изменяет параметр Грюнайзена, который для ионной подсистемы примерно в два раза больше, чем для электронной подсистемы [22]. Поскольку внутренняя энергия, запасенная в пленке, мало изменяется во время электрон—ионной релаксации, это увеличение параметра Грюнайзена приводит к увеличению общего давления во время релаксации. Этот факт влияет на волновой профиль.

## 4.2.2 Отслоение пленки от подложки и разрыв в пленке $(F_{del} < F_{abs})$ [73; 127, (O1:4:20,21, §3.2)]

В диапазоне поглощенных флюенсов  $F_{del} < F_{abs} < F_{abl}$  происходит механический отрыв пленки от подложки. Напряжение между металлом и диэлектрической подложкой определяется поверхностной энергией их взаимодействия. Адгезионные напряжения  $p_{adh}$  находятся в диапазоне от нуля до, обычно, примерно одного ГПа. Точные значения мало известны. Вне окрестности порога расслоения изменение  $p_{adh}$  в диапазоне 0—1 ГПа довольно слабо влияет на скорость центра масс v отделившейся пленки. Дело в том, что на этапе, когда происходит увеличение скорости центра масс v, давление на контакте





вакуумом справа со стеклом слева в друга, когда давление в центральной толще пленки. Стрелки указывают по- области пленки начинает быстро сниложение контакта и ударной волны в момент времени 9.5 пс.

больше, чем значение  $p_{adh}$ . Более того, продолжительность этапа положительного давления больше, чем продолжительность времени, в течение которого контактное давление становится отрицательным и к моменту отрыва достигает *p<sub>adh</sub>*. К этому вопросу мы вернемся ниже. Теперь перейдем к рис. 4.9.

На рис. 4.9 показано распространение волн разрежения от краев пленки к центру и далее. К моменту времени 3 пс волны разрежения проходят около 10 нм (начальная толщина пленки 60 нм). Волна разрежения состоит из резкого скачка и более плавного участка за ним. Справа виден провал волны разрежения, появление которого вызвано чрезвычайно резким увеличением электронного давления в скин-слое золота в очень коротком по длительности  $(\tau_L = 100 \text{ dc})$  лазерном импульсе. Это очень резкое увеличение электронной температуры и электронного давления связано с облучением правой границы (граница с вакуумом). Слева на границе никакого увеличения не происходит. Ширина провала мала, и имеет порядок ~ 0.3 нм. Это расстояние сравнимо со
средним межатомным расстоянием. Поэтому оно не наблюдается в МД моделировании.

К моменту времени 10 пс, левая и правая волны разрежения распространяются на расстояния около 30 нм и встречаются в центре пленки, как показано на рис. 4.9, синяя линия. Затем левая волна движется вправо, а правая — влево. Амплитуда давления в центре начинает резко уменьшаться, см. рис. 4.10. Сравним два расчета с разными значениями  $F_{\rm abs}$  на рис. 4.7 и 4.9 в момент времени 3 пс. Давление увеличивается примерно пропорционально вложенной энергии F<sub>abs</sub>, как это отмечалось выше при рассмотрении колебательного режима в серебряной пленке, см. рис. 4.4. Кроме того, видно, что давление вне провала растет со временем в течение двухтемпературной стадии из-за прихода волн, идущих от краев пленки, см. максимумы давления на рис. 4.9 в моменты времени 3 пс и 10 пс. Увеличение давления вызвано перетоком энергии из «мягкого» (с меньшим параметром Грюнайзена) электронного газа в жесткую ионную подсистему. Соотношение внутренней энергии электронной и ионной подсистем изменяется в течение двухтемпературной релаксации, а полная внутренняя энергия пленки остается приблизительно постоянной (потери из-за перехода энергии золота в кинетическую и внутреннюю энергии стекла малы).

Давление в стекле существенно меньше максимального положительного и отрицательного (по абсолютной величине) давления в пленке. При рассматриваемой поглощенной энергии  $F_{abs}$  гидродинамическая скорость намного меньше скорости звука — ср. расстояния, пройденные ударной волной (две стрелки слева на рис. 4.9 и 4.10 указывают положение ударной волны в стекле) и сдвиг конца профиля давления в золоте (внешней поверхности пленки) направо на этих рисунках. Температура золота в конце двухтемпературной фазы составляет около 1800 К. Пленка полностью расплавлена.

В момент времени 30 пс давление на контакте золото—стекло все еще положительное, см. рис. 4.10. Двойная толстая коричневая стрелка показывает, как уменьшается контактное давление на интервале времени 15—30 пс.

Давление на контакте золото—стекло уменьшается, пересекает нулевую точку, и падает до порога  $-p_{adh}$ . В расчете, показанном на рис. 4.9–4.11, напряжение адгезии  $p_{adh}$  равно 1 ГПа. На рис. 4.11 проиллюстрированы два момента времени — до и после достижения порогового значения контактного давления  $-p_{adh}$ . В момент, когда уменьшающееся давление на контакте до-

110



Рисунок 4.11 — [127, (O1:4:20), рис. 7] Эволюция профилей давления (слева) и скорости (справа) в окрестности момента отделения пленки от стекла. В момент отделения давление на контакте золото—стекло (здесь и на последующих рисунках указан жирной коричневой стрелкой) резко изменяется от  $-p_{\rm adh} = -1$  ГПа до 0.

стигает пороговой величины, давление на левой границе золота и на правой границе стекла резко исчезает. В это время контакт золото—стекло разрывается в том смысле, что между краями золота и стекла образуется зазор. Давлением пара в зазоре можно пренебречь по сравнению с характерным напряжением  $\sim 1 \Gamma \Pi a = 10^4$  атм в конденсированной фазе. Поэтому в зазоре на его концах давление считается равным нулю.

Для сравнения на рис. 4.11 также показаны профили давления и скорости при отсутствии адгезии —  $p_{adh} = 0$ , пленка отлетает от стекла сразу, как только давление на контакте проходит через 0 (зеленые линии). Как видно из 4.11, вне узкой приконтактной области различия очень малы. Это связано с тем, что время, за которое давление на контакте опускается от 0 до  $-p_{adh}$  (в рассматриваемом расчете от t = 37 пс до t = 41 пс, см. рис. 4.11), мало по сравнению с временем, когда пленка ускоряется от подложки под действием положительного давления на контакте, причем значительную часть времени это давление заметно больше  $p_{adh}$ .

Зазор медленно расширяется, а в золоте (справа) и стекле (слева) бегут слабые ударные волны — откольные импульсы. Распространение откольных



Рисунок 4.12 — Излучение слабых ударных волн (откольных импульсов) из точки разрыва контакта золото—стекло при отрыве пленки от подложки при t = 41 пс.

Профили давления ( [127, (O1:4:20), рис. 8], слева), плотности (при t = 45 пс) и скорости ( [127, (O1:4:20), рис. 9], справа). Стрелки указывают положение ударной волны в момент t = 45 пс в золоте и стекле. Двойная коричневая стрелка указывает на разрыв между расходящимися краями золота и стекла в момент времени t = 45 пс.

импульсов и расширение зазора показаны на рис. 4.12. Импульсы бегут со скоростью звука в золоте и стекле, а зазор расширяется со скоростью ~ 100–150 м/с, малой по сравнению со скоростью звука. Стрелки на рис. 4.12 в точках  $x \approx 5$  нм и  $x \approx -24$  нм отмечают положение фронтов импульсов откола соответственно в золоте и стекле в момент t = 45 пс. В стекле скорость звука больше, поэтому откольный импульс проходит большее расстояние (у них одинаковые начальная точка — граница золота и стекла, которая к моменту разрыва находится при x = -4 нм — и время начала движения).

Напряжение адгезии равно 1 ГПа. Разрыв — отрыв пленки от подложки — происходит в момент времени t = 41 пс при отрицательном давлении на контакте такой величины. Поэтому амплитуда обоих откольных импульсов также равна 1 ГПа, см. рис. 4.12.



Рисунок 4.13 — ([73, (O1:4:21), рис. 5]), Отслоение и разрыв золотой пленки толщиной 60 нм. Профили скорости (км/с) и давления (ГПа). Верхняя панель — отслоение и разрыв пленки при  $F_{\rm abs} = 35,7$  мДж/см<sup>2</sup>. Нижняя панель — разрыв пленки без отслоения от подложки при  $F_{\rm abs} = 45$  мДж/см<sup>2</sup>.

На рис. 4.11–4.12 показано отслоение золотой пленки от стеклянной подложки при малом превышении порога  $F_{del}$ . При этом показано (см. рис. 4.11 и обсуждение под ним), что, хотя величина адгезии определяет порог отслоения, после его превышения картина движения практически не зависит от величины  $p_{adh}$ . На рис. 4.13 продемонстрированы отслоение золотой пленки от стеклянной подложки и ее разрыв при увеличении энергии лазерного импульса. Адгезия для простоты принимается равной нулю. Это означает, что порог отслаивания равен нулю.

Если флюенс  $F_{abs}$  меньше порога разрыва пленки (рисунок 4.11), то она отрывается целиком. Место расслоения показано на рисунке 4.11 коричневой стрелкой. На профиле скорости (слева) видно плато при нулевой скорости в подложке (оно расположено слева) и скачки скорости, идущие от подложки к отлетающей пленке. На профиле давления (справа) отрыв проявляется в нулевом давлении между подложкой и пленкой. Как видно на профиле скорости, отрыв происходит в то время, когда значительная часть пленки сжимается.

При большом флюенсе (рис. 4.13, внизу,  $F_{abs} = 45 \text{ мДж/см}^2$ ) разрушение пленки (показано красными стрелками)  $F_{abs} = 45 \text{ мДж/см}^2$ ) происходит обычно еще на стадии ее расширения. При этом задний (прилегающий к подложке) слой движется к подложке. После разрыва передняя часть пленки отлетает, а задняя постепенно тормозится о подложку.

Более сложной является ситуация при небольшом превышении порога разрыва (рисунок 4.13, середина,  $F_{\rm abs} = 35,7$  мДж/см<sup>2</sup>). В этом случае разрыв задерживается до момента, когда только в центральной области пленки продолжается расширение, а на периферии оно сменилось сжатием. В этом случае после разрыва не только передняя, но и задняя часть пленки может продолжать отходить от подложки.

Скорости пленки (центр масс) в целом, при отрыве всей пленки, ее отлетающей вперед части, если произошел разрыв пленки, и назад, если она отлетает от подложки, показаны на рисунке 4.14

До и после отрыва от стекла внутри пленки существует нетривиальное распределение скорости. Скорость распределена неоднородно, и это распределение нестационарно — оно возникает в результате игры левой и правой волн, бегущих по пленке. Однако скорость  $v_{\rm m}$  центра масс пленки, естественно, сразу же перестает меняться после отрыва пленки. Изменение скорости центра



Рисунок 4.14 — ([73, (O1:4:21), рис. 6], Средняя скорость (скорость центра масс) пленки в целом — 0, переднего отлетающего слоя — 1 и заднего слоя — 2. масс следует закону:

$$v_{\rm m}(t) = \frac{1}{\mu} \int_{t_{\rm init}}^{t} p(t_1) dt_1, \qquad \mu = \int_{x_1}^{x_2} \rho dx = \rho_{0,{\rm Au}} d_{\rm f}, \tag{4.1}$$

где под первым интегралом стоит давление на контакте, а точнее давление в золоте у границы между золотом и стеклом. Этот интеграл делится на вес пленки на единицу площади пленки. Пределы  $x_1$  и  $x_2$  второго интеграла относятся к границам пленки.

## 4.3 Воздействие коротких лазерных импульсов на многослойные мишени [130; 131, (01:4:24,25)]

Многослойные структуры (наноламинаты), состоящие из чередующихся слоев наноразмерной толщины из двух или более материалов, широко используются в современной науке и технике. В качестве одного из перспективных методов обработки таких изделий используется лазерное облучение. Ниже будет



Рисунок 4.15 — [130, (O1:4:24), рис. 1] Многослойная схема — начальный профиль плотности. Первая пара слоев никеля и алюминия относительно толстые ( $d_1 = 45$  нм), затем пары тонких слоев Ni и Al ( $d_2 = 25$  нм) и в расчете вместо подложки добавлен слой никеля избыточной толщины (160 nm); в расчете пар тонких слоев взято только чтобы идущая из прогретого слоя волна сжатия за рассматриваемое время не дошла до границы расчетной области, в эксперименте больше тонких слоев и стеклянная подложка.

исследоваться лазерная абляция слоистой мишени, состоящей из чередующихся слоев никеля и алюминия. Первым (внешним) слоем, на который падает лазерный луч, является никель, см. рис. 4.15; лазерный свет приходит с левой стороны. В расчетах первая пара слоев имеет толщину 45 нм, затем пары тонких слоев толщиной 25 нм и толстый слой никеля толщиной 160 нм вместо подложки. В расчете число тонких слоев берется достаточным, чтобы волна сжатия, идущая от горячего приповерхностного слоя, за рассматриваемое время не доходила до границы расчетной области. Ниже рассмотрение будет ограничено первыми двумя порогами, согласно экспериментам 4.16, это порог разрыва приблизительно посередине первого слоя никеля и разрыва на — или вблизи его границы с первым слоем алюминия. В эксперименте тонких слоев больше.

Проведена серия расчетов с увеличивающимся флюенсом  $F_{\rm abs}$ .

В сплошной однородной мишени (см. 1, 1.4) нет видимого повреждения мишени в лазерном пятне до значения флюенса  $F_{abs}|_{abl}$ . Это значение называется порогом абляции. кратер образуется «скачком» при превышении порога, см., например, [37;102;132;133, (O1:1:1)]. При превышении порога абляции глу-



Рисунок 4.16 — [130, (O1:4:24), рис. 2] Профиль кратера на поверхности образца, измеренный методом ACM. Флюенс лазерного излучения в центре пятна выше второго порога  $F_{\rm abs}|_0 > F_{\rm abs}|_{\rm abl-2}$ . Диаметры  $d_1$  и  $d_2$  кратеров при первом и втором отрывах, соответственно, используются для расчета порогового флюенса,  $h_1$  и  $h_2$  — соответствующие глубины кратеров.

бина кратера  $x_{\rm crat}|_{\rm abl}$  меняется мало, толщина отлетающего слоя уменьшается и между ним и остающимся веществом мишени возникает слой пара и мелко диспергированного вещества, см. рис. 1.23–1.26.

Очевидно, что в случае многослойной мишени также существует порог абляции  $F_{abs}|_{abl1}$ , ниже которого верхний слой (и, следовательно, нижние слои) не имеют заметных повреждений. Однако в случае многослойной мишени функция  $x_{crat}(F_{abs})$ , когда флюенс  $F_{abs}$  поднимается выше первого порога  $F_{abs}|_{abl1}$ может иметь дополнительные скачки [134–136]. Эти дополнительные скачки вызваны разрывами во все более глубоко расположенных слоях и на контактных границах.

Конечно, такое поведение обусловлено игрой отраженных и переданных акустических волн и тем, что прочность материалов различных слоев может существенно отличаться, и часто прочность контактов на растяжение ниже, чем прочность прилегающих однородных веществ.

Ниже рассматривается слоистая мишень, показанная на рисунке 4.15. Свет поглощается в никеле (1—й слой). Из—за конечной толщины скин—слоя  $d_{\rm skin}$  около 20 нм) и относительно небольшой толщины первого никелевого слоя ( $d_1 = 45$  нм), часть света проходит через никелевую пленку и нагревает алюминиевый слой. Но доля прошедшего света по сравнению со светом, поглощенным никелем, мала.

Акустический импеданс Ni значительно превышает импеданс Al (отношение импедансов составляет около 3). Поэтому, как будет показано ниже, наименьшим является порог  $F_{\rm abs}|_{\rm internal}$ , при котором происходит внутренний разрыв первого слоя никеля. Причем этот порог значительно меньше, чем порог F<sub>abs</sub>|<sub>bulk</sub>, при котором начинается термомеханическая абляция объемной никелевой мишени [45; 137; 138]. В [137] рассматривается свободно висящая пленка конечной (50 нм) толщины, так что она не дает порога пробоя для сплошной мишени. Согласно [45, уравнениям (1.2), (1.3)] в объемной никелевой мишени на пороге  $F_{
m abs} pprox 140~
m M Дж/cm^2,~d_{
m crat} pprox 20$  нм. Дело в том, что в случае достаточно тонкой пленки существуют две волны разрежения, идущие от передней и задней границ пленки [138;139]. Складываясь, они увеличивают напряжение растяжения. Это снижает порог поглощенного флюенса по сравнению со случаем объемной мишени, когда имеется одна волна разрежения — от фронтальной границы. Выше в этом параграфе слова «достаточно тонкая пленка» означают, что толщина пленки не слишком превышает толщину нагретого лазером слоя  $d_T$ .

## 4.3.1 Физическая модель и расчетная схема [130, (01:4:24), §3]

В рассматриваемых ниже расчетах используется схема 2T—гидродинамики (1.4)–(1.8), (см. 1.1.1). Как обсуждалось выше 4.1, учет многослойности сводится к тому, что в интервале лагранжевых ячеек, относящихся к каждому материалу, используются уравнения состояния, теплопроводности и электронно—ионного теплообмена для этого материала, соответственно (1.18), (1.20) и соотв. таблица для ионного УРС, (1.35), (1.39)–(1.41), (1.43) в никеле и в алюминии (1.9)–(1.10) и соотв. таблица для ионного УРС, (1.30)–(1.34), (1.42), и свои параметры для каждого из металлов в критерии разрыва (1.52). Лагранжева сетка выбирается таким образом, чтобы границы различных веществ попадали на узлы сетки. Поскольку лагранжева координата привязана к веществу, сохраняется начальная привязка ячеек и веществ.

Механические граничные условия на границах различных веществ выполняются автоматически. В отличие от рассматривавшегося выше 4.2.2 отслоения металлической пленки от стеклянной подложки, когда адгезия металлической пленки и стекла значительно меньше прочности металла, адгезия никеля и алюминия взята запрещающей отслоение — с запасом больше наибольшего напряжения, возникающего на границе. При этом расчеты не противоречат экспериментам.

Граничные условия в тепловой задаче не так тривиальны. Толщина первого слоя никеля  $d_1 = 45$  нм (см. рисунок 4.15) более чем в два раза превышает толщину скин—слоя  $d_{skin} = 20$  нм, поэтому основная часть лазерного излучения поглощается в этом слое. Это позволяет нам пренебречь возможными эффектами отражения на границе раздела никеля и алюминия и предположить, что мощность тепловыделения подчиняется закону Бугера с постоянной длиной затухания  $d_{skin}$  (толщина скин—слоя в интенсивности). Как будет видно далее, нагрев за счет теплопроводности не очень значителен по сравнению с действием волны сжатия, выходящей из первого горячего слоя. Поэтому мы пренебрегаем всеми возможными тепловыми эффектами на границе двух металлов и считаем, что там сохраняются электронная температура и тепловой поток. Тогда достаточно принять, что коэффициент теплопроводности на границе металлов 1 и 2 равен

$$\kappa_{1-2} = \frac{\kappa_1 \kappa_2 (x_{b+1} - x_{b-1})}{\kappa_1 (x_{b+1} - x_b) + \kappa_2 (x_b - x_{b-1})},\tag{4.2}$$

где  $\kappa_1$ ,  $\kappa_2$  — коэффициенты теплопроводности для металла 1 и 2, соответственно,  $x_b$ ,  $x_{b-1}$ ,  $x_{b+1}$  это координаты границы (лагранжевого узла на границе), предыдущего лагранжевого узла (в металле 1) и следующего лагранжевого узла (в металле 2).

Хотя говорится о «гидродинамике», в коде сквозным образом описывается как гидродинамика, так и механика деформируемого твердого тела (МДТТ). Механика твердого тела описывается как в пластическом приближении, так и с использованием моделей эластопластики [116–118;124;140, (O2:3:4,5)], см. главу 3. Ниже будет использоваться пластическое приближение. Сквозное описание твердой и жидкой фаз необходимо при анализе задач лазерного воздействия, поскольку существуют процессы плавления и кристаллизации.

# 4.3.2 Ранняя стадия, первая пикосекунда, аномальные температурные профили [130, (O1:4:24), §4]

Ниже внимание будет сосредоточено на расчете первого порога  $F_{\rm abs}|_{\rm abl1}$ по поглощенной энергии и определении глубины кратера  $x_{\rm crat}|_{\rm abl1}$  на первом пороге. Это позволяет проверить используемую модель путем сравнения с экспериментальными данными. Как будет показано ниже, расчеты согласуются с экспериментами. Следовательно, модель адекватно описывает физику процессов. Затем, используя этот проверенный подход, численное моделирование будет продолжено для определения второго порога  $F_{\rm abs}|_{\rm abl2}$ .

Изложение результатов естественно начать с ранних стадий и тепловой картины. Как обсуждалось выше в главе 1, §1.2, при фемтосекундном воздействии первоначальное распространение тепла из скин—слоя происходит со сверхзвуковой скоростью [49, (O1:1:7)]. Позже становятся существенны гидродинамические эффекты, связанные с распространением акустических волн со скоростью звука.

Сравним материаловедческие характеристики, которые необходимы для описания ультракороткого воздействия на нанометровые пленки Ni и Al. Во—первых, существует значительная разница в электронной теплоемкости  $C_{\rm e}(T_{\rm e}, \rho)$ . При нормальных условиях теплоемкость  $C_{\rm e}$  никеля на порядок больше. Это связано со структурой электронного спектра никеля  $3d^{8-9} 4s^{2-1}$  по сравнению с алюминием  $3s^2 3p^1$ . Никель имеет гораздо более плотный спектр электронных состояний ниже и выше уровня Ферми по сравнению с алюминием. Из—за разницы в теплоемкости  $C_{\rm e}$ , электронная температура  $T_{\rm e}$  никеля ниже, чем у алюминия, при равной плотности энергии электронов в единице объема.

Во—вторых, ионная теплоемкость никеля на единицу объема в полтора раза выше, чем у алюминия. Если не принимать во внимание процессы теплопроводности, то это обстоятельство является причиной более высоких ионных температур  $T_i$  в алюминии при равных плотностях ионной энергии на единицу объема. Наконец, в—третьих, никель значительно жестче достаточно мягкого алюминия. Как уже упоминалось выше, акустический импеданс никеля в три раза больше.

С отмеченным выше различием теплоемкостей  $C_e$  связана аномалия профилей электронной температуры на ранней стадии. Как видно из рис. 4.17,



Рисунок 4.17 — [130, (О1:4:24), рис. 3] Поглощенная ( $\tilde{E}_{\rm abs}$ ) и дополнительная ( $\tilde{E}_{\rm add}$ ) энергия электронов и электронная температура  $T_{\rm e}$ 

обычный ход температуры Те вглубь мишени нарушается. А именно, появляется инверсный участок, на котором электронный тепловой поток течет не в толщу мишени, а в обратном направлении — в сторону фронтальной (т.е. облучаемой) поверхности! Эта аномалия также приводит к аномалии в профиле энергии, добавляемой к энергии электронной подсистемы  $\tilde{E}_{add}$ . На ранней стадии, показанной на рисунке 4.17, эта энергия формируется в основном за счет поглощения лазерного излучения (поглощенная энергия  $\tilde{E}_{abs}$ ), но частично перераспределяется за счет теплопроводности. Затем, на 27-стадии, основными эффектами становятся поток энергии из нагретой области вглубь мишени за счет теплопроводности и передача энергии от электронной подсистемы к ионной, а эффекты, связанные с движением вещества, несомненно, доминируют позже на акустической стадии. На рисунке 4.18 показаны результаты серии расчетов, соответствующих времени t = 0 для различных поглощенных флюенсов F<sub>abs</sub>. Ситуация с аномалией аналогична. Время в расчетах отсчитывается от максимальной интенсивности лазерного импульса  $I(t) \propto \exp(-t^2/\tau_{\rm L}^2)$ . Полная ширина импульса на уровне 1/е равна  $2\tau_{\rm L} = 100$  fs. К моменту времени t = 0в мишень попадает половина полного поглощенного флюенса F<sub>abs</sub>, указанного в надписях на рисунках 4.17-4.18 и дальнейших.



Рисунок 4.18 — [130, (O1:4:24), рис. 4] Профили электронной температуры при различной поглощенной энергии

На рисунке 4.19 показаны мгновенные профили электронной температуры  $T_{\rm e}$ , тепловой поток по электронной подсистеме  $q_{\rm e}$  поглощенная энергия  $\tilde{E}_{\rm abs}$  на единицу объема по закону Бугера  $\tilde{E}_{\rm abs} \propto \exp(-x/d_{\rm skin})$  с длиной затухания  $d_{\rm skin} = 20$  нм (толщина скин—слоя по интенсивности) и увеличением электронной энергии  $\tilde{E}_{\rm add}$ . Для тепловыделения — поглощенной энергии  $\tilde{E}_{\rm abs}$  принят упрощенный закон Бугера, в котором не учитывается преломление света на границе контакта между никелем и алюминием. Такой подход оправдан, так как только небольшое количество лазерной энергии достигает контакта.

Для полноты картины на рисунке 4.20 показаны профили коэффициента электронной теплопроводности к и коэффициента электрон—ионного теплообмена *а*.

Таким образом, различие теплоемкостей  $C_{\rm e}$  в никеле и алюминии при непрерывности поглощения тепла  $\tilde{E}_{\rm add}$  на контакте приводит к инверсии теплового потока по электронной подсистеме и аномалии в профиле электронной температуры, видной на рисунке 4.19. Горизонтальная линия на рисунке 4.19 обозначает нулевой тепловой поток, а вертикальная линия обозначает положение контакта между никелем и алюминием. Отметим, что поток тепла составляет единицы ГВт/см<sup>2</sup>, в то время как поглощенная интенсивность светового потока  $I_{\rm abs} \sim F_{\rm abs}/\tau_{\rm L}$  на два порядка выше — сотни ГВт/см<sup>2</sup>. То есть энергии в скин—слой пленки поступает в единицу времени на два порядка больше, чем отводится за счет электронной теплопроводности. Поэтому, во—



Рисунок 4.19 — [130, (O1:4:24), рис. 5] Профиль электронной температуры  $T_{\rm e}$ , тепловой поток по электронной подсистеме  $q_{\rm e}$  поглощенная энергия  $\tilde{E}_{\rm abs}$  и увеличение энергии электронов  $\tilde{E}_{\rm add}$ 



Рисунок 4.20 — [130, (О1:4:24), рис. 6] Коэффициент электронной теплопроводности к и коэффициент электрон—ионного теплообмена **α** 



Рисунок 4.21 — [130, (О1:4:24), рис. 7] Эволюция профилей электронной температуры  $T_{\rm e}$ 

первых, электронная температура повышается во время импульса, а во—вторых, теплоотвод из скин—слоя продолжается в течение значительного времени после окончания импульса.

Однако аномальное поведение, показанное на рисунках 4.17–4.19, длится недолго. На ранних временах степень немонотонности выше. Действительно, если сравнить отношение разности температур между локальным максимумом и локальным минимумом профиля  $T_{\rm e}$  соответственно справа и слева в окрестности контакта никель—алюминий  $\Delta T_{\rm e}$  и температуры поверхности  $T_{\rm e}|_{\rm s}$ в соответствующий момент времени  $\Delta T_{\rm e}/T_{\rm e}|_{\rm s}$  на рис. 4.19, то это отношение равно 0.18 для момента t = -0.05 пс, 0.09 для t = 0 и 0.025 для t = 0.05 пс. Это обусловлено малостью количества световой энергии, попадающей в алюминий через пленку никеля. Уже к первой пикосекунде после ультракороткого лазерного воздействия профили электронной температуры и потока энергии по электронной подсистеме принимают обычный монотонный вид. Эволюция мгновенных профилей от аномального к обычному виду показана на рисунке 4.21.

Быстрое возвращение к стандартному виду связано со следующим обстоятельством. Энергия, накопленная в скин—слое во время импульса с интенсивностью в сотни ГВт/см<sup>2</sup>, затем уносится в толщу пленки тепловым потоком с интенсивностью порядка ГВт/см<sup>2</sup>. Таким образом, небольшое количество энергии, проникшее в алюминий за время импульса, не имеет большого



значения. Действительно, это количество мало по сравнению с энергией, накопленной в скин—слое. Накопленная энергия относительно долго (по сравнению с длительностью  $\tau_L$ ) уходит из скин—слоя. Охлаждение скин—слоя происходит относительно долго из—за относительно малой интенсивности электронного теплового потока.

## 4.3.3 Передача энергии в ионную подсистему и плавление [130, (O1:4:24), §5]

Заметное гидродинамическое движение начинается на акустической стадии, на временах, начиная с нескольких пикосекунд. Но еще раньше изменение фазового состояния начинается в результате нагрева. Изменение фазового состояния сказывается на уравнениях состояния, но особенно важно для понимания процесса разрушения в веществе (процесс термомеханической абляции), поскольку прочность вещества на разрыв значительно снижается при плавлении.

На рисунках 4.22 и 4.23 показано типичное чередование слоев различных фаз на стадии, когда передача энергии от электронной подсистемы к ионной подсистеме почти завершена. Это означает, что двухтемпературная стадия почти завершена, и вещество находится в практически однотемпературном состоянии. Двухфазная смесь состоит из жидкой и твердой фаз. Порог плавления является довольно плохо определенной величиной. Если за порог плавления принимать поглощенный флюенс  $F_{abs}$ , при котором у границы с воздухом появляется чистая жидкая фаза, то этот порог находится где—то в интервале флюенсов  $F_{abs}$  от 35 до 40 Дж/см2<sup>2</sup>, см. рис. 4.23. Если же за порог принимать флюенс, при котором у границы формируется смесь расплава и кристалла, то пороговый флюенс будет существенно меньше.

На момент t = 10 пс, показанный на рисунках 4.22 и 4.23, по первым слоям никеля и алюминия распространяется акустическая волна. В этой волне контакт и алюминий около контакта находятся под сжимающим давлением, см. текст ниже. При этом область двухфазной смеси жидкого и твердого никеля подвергается растяжению под отрицательным давлением. Температура плавления  $T_m$  является функцией давления  $T_m(p)$ . Поэтому плавление никеля происходит при температуре ниже температуры  $T_m(p=0) = 1728$  К. Тогда как алюминий возле контактной границы остается в кристаллическом состоянии, хотя его температура выше температуры плавления алюминия  $T_m(p=0) = 934$  К под ничтожным давлением паров алюминия при этой температуре.

#### 4.3.4 Разрыв в первом слое никеля

Профили давления и температуры (ионных) на стадии, на которой первая пленка никеля подвергается сильному растяжению перед разрывом, и после разрыва в пленке при  $F_{\rm abs} = 40 \text{ мДж/см}^2$  показаны на рис. 4.24. Порог первого разрыва  $F_{\rm abl1} \approx 40 \text{ мДж/см}^2$  внутри первого слоя соответствует экспериментальным данным.

Растяжение связано с суммированием волн разрежения, идущих от границы с воздухом и от границы с алюминием. В этих волнах разрежения происходит разгрузка первого слоя никеля в сторону акустически более слабых сред после подъема давления этом слое из—за быстрого лазерного нагрева. Как видно из рисунка 4.24, разрыв происходит вблизи середины пленки, где сходятся волны разрежения, однако место разрыва немного смещено относительно наибольшего натяжения (наименьшего давления) в направлении свободной границы. Это связано с тем, что температура уменьшается с глубиной, а вероятность разрыва существенно падает при уменьшении температуры.



Рисунок 4.24 — Профили давления и температуры (ионных) перед и после разрыва в первом слое никеля при  $F_{\rm abs}=40~{\rm M}{\rm J}{
m k/cm}^2>F_{\rm abl1}$ 



Рисунок 4.25 — [130, (O1:4:24), рис. 12] Профиль скорости в сегменте вдоль оси *x*, на котором достигается наибольшее растяжение.



Рисунок 4.26 — Профили плотности в первых слоях никеля и алюминия в моменты t = 20 пс (слева) и t = 50 пс (справа)

Растягивающее напряжение держится довольно долго (5—7 пс) около своего наибольшего значения («плато»), см. рис. 4.24. Это повышает в несколько раз величину предэкспоненциального множителя в выражении для вероятности нуклеации пузырька в растянутом расплаве никеля.

На рис. 4.25 представлен профиль продольной скорости в окрестности отрезка по оси x, на котором достигаются наибольшие растяжения, показанные на рисунке 4.24. Оценка темпа растяжения  $\dot{V}/V$  по данным рис. 4.25 дает:

$$\dot{V}/V = (\mathrm{d}(\Delta x)/\mathrm{d}t)/\Delta x = \Delta v/\Delta x = 3 \times 10^9 \ \mathrm{1/c}.$$
 (4.3)

За  $\Delta x$  в (4.3) взята длина отрезка по оси x, показанного на рис. 4.25. При этом разность скоростей  $\Delta v$  на концах данного отрезка составляет примерно 8 м/с.

#### 4.3.5 Увеличение поглощенной энергии до второго порога

На рисунке 4.26 показаны профили плотности в первых слоях никеля и алюминия при воздействии импульсов лазерного излучения с различной энергией:

 $F_{abl} = 35 \text{ мДж/см}^2 < F_{abl1}$  — черная линия на рис. 4.26 — нет абляции.



Рисунок 4.27 — Временные профили давления на границе первых слоев никеля и алюминия.

 $F_{abl} = 40 \text{ мДж/см}^2 \approx F_{abl1}$  — красная линия — после разрыва вблизи середины первого слоя никеля отлетающий слой становится практически однородным, а в глубину от разрыва идет дополнительная волна сжатия.  $F_{abl} = 60, 100, 150 \text{ мДж/см}^2$  — с ростом поглощенной энергии разрыв происходит раньше, толщина отлетающего слоя становится меньше, между ним и оставшейся приблизительно половиной первого слоя никеля возникает слой, заполненный паром и диспергированным веществом.

 $F_{abl} = 200 \text{ мДж/см}^2 \approx F_{abl2}$  — синяя линия на рис. 4.26 — при t = 50 пс видно, что произошел второй разрыв в районе границы первых слоев никеля и алюминия, что соответствует экспериментальным данным.

В результате разрыва давление на границе никеля и алюминия обнуляется, см. рис. 4.27, синяя линия  $F_{\rm abs}=200~{\rm M}{\rm Д}{\rm m}/{\rm cm}^2,~t>45.16~{\rm nc}.$ 

Из сравнения временного хода давления на границе первых слоев никеля и алюминия при различных поглощенных энергиях излучения, показанного на рис. 4.27, видно, что наибольшее напряжение (отрицательное давление) возникает при выходе на эту границу волны растяжения при энергии под порогом разрыва в никеле  $F_{abl1}$ .



Рисунок 4.28 — Временные профили температуры (слева) и плотности (справа) алюминия у границы с первым слоем никеля.



Рисунок 4.29 — Профили давления, температуры и плотности в области, прилегающей к границе никеля и алюминия перед и после разрыва.

При разрыве возникает откольный импульс, порождающий дополнительные волны сжатия, идущие от места разрыва по отлетающему слою и в глубину. В результате изменение давления на границе никеля и алюминия, как видно из рисунка 4.27, является немонотонным.

После разгрузки на разрыве волны разрежения проходят на границу никеля и алюминия с практически одинаковым напряжением. Поскольку, как показывает эксперимент, до порога разрыва в первом слое никеля заметная абляция отсутствует, адгезия никеля и алюминия достаточна, чтобы удержать

пленку никеля при таком напряжении, что соответствует принятой в расчете большой величине адгезии. При этом, однако, практически одинаковое давление реализуется при различных температурах и плотностях, см. рис. 4.28. С увеличением интенсивности температура в приходящей в алюминий волне разрежения растет, плотность падает. В результате при  $F_{\rm abs} = 200$  К температура в алюминии около границы с никелем оказывается достаточной, чтобы при таком давлении произошел разрыв алюминия.

Отличить в эксперименте отрыв по границе слоев никеля и алюминия и получающийся в расчете разрыв алюминия вблизи этой границы представляется невозможным. Толщина слоя алюминия, отлетающего с никелем, меньше ошибки в определении глубины абляции в эксперименте. Так что можно считать полученный в расчете разрыв алюминия соответствующим наблюдаемому в эксперименте отрыву слоя никеля. Порог по интенсивности излучения, при котором происходит этот разрыв, соответствует полученному в эксперименте  $F_{abl2}$ . Принципиально важно, однако, что разрыв в алюминии около границы с никелем происходит при величине адгезии никеля и алюминия большей, чем прочность алюминия — иначе второй порог был бы ниже.

Как видно из рисунка 4.29, при воздействии импульса с интенсивностью  $F_{\rm abs} = 200 \text{ M}\text{Д}\text{ж}/\text{сu}^2$  накануне разрыва в первом слое алюминия он весь расплавлен и растянут, даже наибольшее натяжение в нем не у границы с никелем, а вблизи середины. Однако температура с глубиной уменьшается, хотя в слое алюминия и не сильно, и разрыв происходит в области с более высокой температурой у границы с первым слоем никеля. После разрыва по алюминию бежит волна сжатия, снимающая растягивающее напряжение.

Такая картина позволяет ожидать, что при превышении энергии в импульсе  $F_{\rm abs} > F_{\rm abl2}$  разрыв в алюминии может довольно быстро смещаться на большую глубину.

Последующие слои никеля и алюминия тонкие, падение температуры на толщине слоя оказывается меньше разницы температур плавления никеля и алюминия, изменение давления на толщине слоя существенно меньше разности прочностей никеля и алюминия. Поэтому условия для разрыва в слое алюминия возникают раньше, чем в лежащем перед ним (ближе к поверхности) слое никеля, и даже раньше, чем он будет расплавлен. Это позволяет ожидать картину, аналогичную рассматривавшемуся выше 4.2.2 отслоению пленки от подложки.

- Разработанное расширение модели и расчетной схемы позволило впервые описать воздействие ультракоротких лазерных импульсов на мишени состоящие из двух (пленка на подложке) и более (наноламинаты) слоев веществ с существенно различными свойствами.
- Прослежен переход от колебаний пленки на подложке (при  $F_{\rm abs} < F_{\rm del}$ ) к отслоению пленки и к разрыву в пленке.

Полученные результаты хорошо соответствуют экспериментальным данным.

 Впервые исследовано поведение наноламината из чередующихся тонких слоев никела и алюминия.

Показано, что существует порог разрвыва в первом слое никеля, а следующий порог соответствует разрыву в первом слое алиминия вблизи границы с первым слоем никеля. Полученные пороги соответствуют наблудаемым в эксперименте порогам разрыва в слое никела и вблизи границы первых слоев никеля и алюминия.

### Глава 5. Лазерная абляция в жидкость (О1:5)

Нагрев металлической мишени через прозрачную жидкость во многом аналогичен рассмотренному выше 4.2 случаю металлических пленок на диэлектрической подложке, во всяком случае на достаточно малых временах; пока движение можно считать одномерным то, что диэлектрик жидкий не существенно. Выше 4.2 рассматривались тонкие пленки, при лазерной абляции в жидкость мишени объемные, но в обоих случаях основные процессы происходят в областях, прилегающих к поверхности контакта металла и диэлектрика.

Лазерное испарение в жидкость активно изучается и используется как метод получения наночастиц (НЧ). Существует два основных конкурирующих подхода к производству НЧ — химический и лазерный [141–144]. Наночастицы затем используются во многих важных научных и промышленных приложениях. Химическое производство дешево, но лазерное производство более простое, чистое и экологичное [141–144]. Поэтому исследования, направленные на понимание и на этой основе оптимизацию и удешевление производства НЧ методом лазерной абляции в жидкость (ЛАЖ, LAL—laser ablation in liquid) представляют несомненный интерес. С другой стороны, наличие жидкости или диэлектрической подложки препятствует быстрой разгрузке нагретого лазерным излучением приповерхностного слоя. Это позволяет получить большие давления и более сильную ударную волну, идущую вглубь металла, см. рис. 5.1. Такие сильные ударные волны важны для исследования вещества при большом сжатии и представляют практический интерес для лазерного упрочнения поверхностей (LSP—laser shock pining, лазерная ковка) [145].

В образовании НЧ при ЛАЖ оказываются существенны различные тесно связанные физические процессы, протекающие в логарифмически широком временном диапазоне, см. рисунок 5.2. Ранние стадии, до образования пузырька, недоступны пока для экспериментального исследования, кроме статьи [146], где была предпринята попытка проследить состояние облучаемой поверхности во время лазерного воздействия. В работе [146] (на их вставке на рисунке 9(a)) авторы видят уменьшение отражения от поверхности золота в воде во время наносекундного лазерного импульса.

Кратковременное лазерное воздействие сильно изменяет тепловое и механическое состояние системы, состоящей из поглощающей мишени и прозрачной



Рисунок 5.1 — ([147, (O1:5:32), рис. 1]), Нагрев металла через воду — стрелка «лазер». Лазерное излучение проходит через невозмущенную жидкость (воду) 1, пересекает фронт ударной волны 2, проходит через ударно—сжатую воду 3 и поглощается в горячем слое 5. Импульс длителен во времени («дозвуковой» нагрев) в том смысле, что масштаб звука  $L/c_{\rm s}$  намного короче длительности импульса  $\tau_L$ , здесь L — ширина слоя 5, что соответствует модели [148]. Поэтому границы 4 и 6 слоя 5 действуют как два дозвуковых поршня, толкающих волны 2 и 8. Волны 2 и 8 распространяются намного быстрее, чем скорость расширения

слоя 5. Поэтому слой 5 является тонким по сравнению со слоями 3 и 7.

жидкой или твердой среды, окружающей мишень; ниже будет рассматриваться золотая мишень, контактирующая с водой. Поглощение света и нагрев золота через прозрачную среду сосредоточены в очень тонком поверхностном диске (5 на рис. 5.1), поэтому за один выстрел образуется небольшое количество НЧ. Радиус диска определяется радиусом лазерного луча  $R_{\rm L}$  (обычно  $R_{\rm L} \sim 0.1$  мм), а его толщина равна толщине зоны теплового воздействия  $d_T$  и составляет доли микрона. Далее, после окончания поглощения, следует длительный многоступенчатый процесс релаксации. Положительный и отрицательный импульс уносится из поверхностного слоя нелинейными акустическими волнами (ударные волны в воде и в золоте, 2 и 8 на рис. 5.1) со скоростями  $D_{\rm w}$  и  $D_{\rm m}$ . При этом зона термического влияния развивается отдельно (от ударных волн) со скоростями  $u_{\rm w}$  и  $u_{\rm m}$ , которые малы по сравнению со скоростью звука.

Выше в главе 1, §1.4.2 было показано, что при воздействии ультракоротких лазерных импульсов  $\tau_L < \sim t_{eq}$  на металл через вакуум толщина прогретого слоя металла  $d_T$  (5 на рис. 5.1) значительно увеличивается в течение 2T—стадии, и затем, при разгрузке, при  $F_{abs} \ge F_{abl}$  от поверхности металла отрывается конденсированный слой («откольная пластина»). Это происходит и при облу-



Рисунок 5.2 — ([149, (О1:5:28), рис. 1]), Иерархия процессов, запускаемых лазерным воздействием. Звездочками отмечены длительности  $\tau_L = 100 \, \, \mathrm{dc}$ (фс), 50 пс (м-пс, — мульти—пикосекундный) и 0,5 нс (нс), рассматриваемые ниже. Продолжительность  $t_{eq}$ , когда выравниваются электронная  $T_e$  и ионная температуры  $T_{\rm i}$  в золоте, разделяет значения  $\tau_L$ , когда приходится учитывать двухтемпературные эффекты  $T_{
m e} \gg T_{
m i}$ , см. [150, (O1:5:27)]. Если  $\tau_L < t_{
m s} = d_T/c_{
m s}$ (ударное нагружение), то достигаются наибольшие отношения  $p/F_{\rm abs} \sim 1/d_T;$ здесь  $d_T$  — толщина зоны теплового воздействия,  $c_{\rm s}$  — скорость звука, p — максимальное давление, создаваемое в конце поглощения лазерного импульса. Эллипсами отмечены этапы, когда контактное давление снижается ниже критического давления золота и жидкости (в воде). Пузырь начинает формироваться и существует в течение диапазона времени, обозначенного как «пузырь». Диапазон "РТ" относится к неустойчивости Рэлея—Тейлора (РТИ). Здесь показано начало диапазона РТ для случая фемтосекундного воздействия. Для более длинных импульсов роль РТИ в перемешивании и производстве наночастиц уменьшается.

чении металла через жидкость или прозрачный диэлектрик и будет подробно рассмотрено ниже.

Имеются подробные данные о поздних стадиях, начиная с ~ 1 мкс [141; 142; 144; 151]. Эти данные включают экспериментальные измерения траектории R(t) и теоретические расчеты на основе уравнения Рэлея—Плессета (Rayleigh–Plesset equation, RPe) [151], используемого в работе [151] для определения текущего внутреннего давления внутри пузыря p(t) из R(t) предполагая, что давление окружающей среды в RPe равно давлению внутри контейнера с жидкостью до лазерного воздействия; здесь R(t) — радиус пузыря. Из рисунка 5.2 видно, что эти данные относятся к поздним стадиям релаксации системы по-

сле лазерного воздействия. Это основное направление экспериментальной ветви исследований ЛАЖ на сегодняшний день.

Эффективность образования наночастиц при ЛАЖ при воздействии лазерных импульсов в широком диапазоне частот и длительностей импульсов исследована в [152].

На противоположном направлении исследований ЛАЖ авторы начинают именно с абляции в жидкости [146; 150; 153–161, (O1:5:26–35)], то есть с начала цепочки процессов, показанных на рисунке 5.2. Перечисленные работы описывают начальную абляцию теоретически и с помощью компьютерного моделирования. Статья [146] является исключением. В этой работе теория подкреплена ценными экспериментами, связанными с ранней стадией. Авторы [146] измерили отражательную способность во время наносекундного лазерного импульса. В этих работах изучен временной диапазон, охватывающий несколько наносекунд.

Ниже абляция металла в жидкость будет рассмотрена для пары золото в воду в широком интервале длительностей действующего лазерного излучения. Для золота используются широкодиапазонное табулированное уравнение для ионной подсистемы (см. 1.1.2) и аппроксимация (1.12)—(1.17) электронного УРС, формулы (1.35)—(1.38) [72;94] для теплопроводности и (1.44) [72;82, (O1:1:8), (B.1)] для электрон—ионного теплообмена, причем в формулах для теплопроводности (1.37)—(1.38) учтен скачек теплопроводности при плавлении.

Для воды при воздействии УКЛИ можно, аналогично тому, как в предыдущей главе для стекла, использовать аппроксимацию адиабаты  $p = p(\rho)$ , см. 4.1, 1.1.2, (1.27). Используя имеющиеся в литературе экспериментальные данные [59], ее можно записать как [150, (O1:5:27), ур. (12)] (см. рис. 5.3)

$$p = Ax + Bx^{2} + Cx^{3} + Dx^{4}, \qquad x = \rho/\rho_{0} - 1,$$
 (5.1)

где  $\rho_0 = 1$  г/см<sup>3</sup>, A = 2.25 ГПа, B = 7.072826918 ГПа, C = 25.08229325 ГПа, D = -7.042079289 ГПа.

При больших длительностях импульса (и, соответственно, больших прослеживаемых временных интервалах) становится существенным, что вода в прилегающей к контакту с золотом области может прогреваться до температур выше критической, в том числе за счет теплопроводности, и расширяться до плотностей ниже критической. Это требует использования УРС с явной зависимостью от температуры и учета теплопроводности. Такое уравнение состояния



Рисунок 5.3 — ([150, (О1:5:27), рис. 8, 9]), Сравнение аппроксимации (5.1) (красная линия) и адиабаты по УРС [162] (5.2) (N.,B., 2021 — синяя линия) с

ударной адиабатой воды по экспериментальным данным [59] (символы).

воды типа Ми—Грюнайзена с тепловым вкладом в энергию и давление пропорциональным температуре взято из [162]:

$$p(\rho,T) = (p_0(x) + \Gamma_T T)x, \quad E(\rho,T) = E_0(x) + C_v T + E_{00}, \qquad x = \rho/\rho_0, \quad (5.2)$$

$$p_{0}(x) = Ax^{-\beta} e^{b(1-x^{-\beta})} - Kx^{\xi},$$

$$\Gamma_{T}(x) = R \frac{\rho_{0}}{m_{\text{atH}_{2}0}} \left( a_{0} + (1-a_{0})e^{-(x/r_{e0})^{p_{e0}}} + a_{1}e^{-(x/r_{e1})^{p_{e1}}} + a_{2}e^{-(x/r_{e2})^{p_{e2}}} \right),$$

$$E_{0}(x) = \left( \frac{A}{\beta b} \left( e^{b(1-x^{-\beta})} + 1 \right) - \frac{K}{\xi} \left( x^{\xi} + 1 \right) \right) / \rho_{0},$$

$$r_{\text{де}} \quad \text{в газовой фазе (паре)}$$

$$при \quad \rho \leqslant \rho_{\text{bg}}, T \leqslant T_{\text{cr}}, \quad E_{00} = E_{00,\text{g}} = 0, \quad C_{v} = C_{v,\text{g}},$$

$$\rho_{\text{bg}}(T) = \rho_{c}(1-\tau^{p_{\text{bg}}})^{1/p_{\text{bg}}} e^{(a_{\text{bg}}0t/\tau + b_{\text{bg}}0t^{1/2} + b_{\text{bg}}1t + b^{2}_{\text{bg}}2)},$$

$$\tau = T/T_{\text{cr}}, \quad t = 1 - \tau,$$

$$в \text{ жидкой фазе}$$

$$при \quad \rho \geqslant \rho_{\text{bl}}, T \leqslant T_{\text{cr}}, \quad C_{v} = C_{v,\text{l}}, \quad E_{00} = E_{00,\text{l}} = (C_{v,\text{g}} - C_{v,\text{l}})T_{\text{cr}}$$

$$\rho_{\text{bl}}(T) = \rho_{c}(1 + (1-\tau^{p_{\text{bl}}})^{1/p_{\text{bl}}})(b_{\text{bl}}\sigma^{1/2} + b_{\text{bl}1}\tau + b_{\text{bl}2}\tau^{2} + b_{\text{bl}3}\tau^{3} + b_{\text{bl}4}\tau^{4} + b_{15}\tau^{5}),$$

$$в \text{ сверхкритическом флюиде}$$

$$при \quad T \geqslant T_{\text{cr}}, \quad C_{v} = C_{v,\text{f}}, \quad E_{00} = E_{00,\text{f}} = (C_{v,\text{g}} - C_{v,\text{f}})T_{\text{cr}}.$$

Здесь  $R = 8.314462 \ \text{Дж/(K} \text{ моль)}$  — универсальная газовая постоянная,  $m_{\text{atH}_2\text{O}} = 18,01528 \ \text{г/моль}$  — молекулярная масса воды, плотность воды начальная  $\rho_0 = 0,9982 \ \text{г/см}^3$ , критическая  $\rho_c = 0,3178 \ \text{г/см}^3$ , критическая температура  $T_{\text{cr}} = 647,27 \ \text{K}$ ,  $A = 0,6726 \ \text{ГПа}$ ,  $K = 1,15 \ \text{ГПа}$ ,  $\beta = 0,3333$ , b = 11,55,  $\xi = 0,85, \ a_0 = 2,95, \ a_1 = 2,408, \ a_2 = 12,151, \ r_{e0} = 0,5273, \ p_{e0} = 1,7,$   $r_{e1} = 1,0904, \ p_{e1} = -3,5, \ r_{e2} = 1,3927, \ p_{e2} = -5,0$ , теплоемкость жидкой воды  $C_{v,l} = 4,15 \ \text{Дж/г/K}$ , газообразной (пара)  $C_{v,g} = 1,43 \ \text{Дж/г/K}$ , для сверхкритического флюида взята  $C_{v,f} = 2,44 \ \text{Дж/r/K}$ , в уравнениях для бинодали  $p_{\text{bg}} = 1,686298601197826, \ a_{\text{bg}0} = 8,388612866081148, \ b_{\text{bg}0} = -3,80691366510148,$   $b_{\text{bg}1} = 7,577539157294225, \ b_{\text{bg}2} = 2,434292608066901, \ p_{\text{bl}} = 3,8743538629351515,$   $b_{\text{bl}0} = 77,52860129012416, \ b_{\text{bl}1} = -224,3387912885916, \ b_{\text{bl}2} = 463,6945464936243,$  $b_{\text{bl}3} = -663,0009090953257, \ b_{\text{bl}4} = 497,73647851628897, \ b_{\text{bl}5} = 1 - (b_{\text{bl}0} + b_{\text{bl}1} + b_{\text{bl}2} + b_{\text{bl}3} + b_{\text{bl}4}).$ 

Теплопроводность воды рассчитывается по данным, взятым из литературы, с учетом падения теплопроводности при испарении и асимптотику при больших температурах (см. рис. 5.4):

$$\kappa_{\rm w} = (\kappa_{\rm l}^s + \kappa_{\rm g}^s)^{1/s}, \qquad (5.3)$$
$$\kappa_{\rm l} = at {\rm e}^{-(bt + ct^2 + dt^4 + ht^6)} \qquad t = T/1000 \text{ K},$$

и при  $T < T_{\rm cr}$ ,  $\rho < \rho_{\rm bl}$  (двухфазное состояние—пар),  $p(\rho,T) < p_0$ , дополнительно множится на  $p(\rho,T)/p_0$ ,  $p_0 = 0.025$  ГПа,

$$\kappa_{\rm g} = k_0 * \sqrt{T/T_0} / (1 + T_0/T), \qquad T_0 = 7842,2141452454 \text{ K},$$

 $s\,=\,11.232233542986, \quad a\,=\,2,9930530338596~{\rm Bt/m/K}, \quad b\,=\,1,179447271403, \\ c\,=\,3,428923940386\times10^{-7},\, d\,=\,2,733826808839689\times10^{-7},\, h\,=\,13,015596102324, \\ k_0\,=\,2,373960552726~{\rm Bt/m/K},$ 

Существует характерное время  $t_s$ , разделяющее режимы абляции на короткие/быстрые  $\tau_L \ll t_s$  и длинные/медленные (дозвуковые)  $\tau_L \gg t_s$  в соответствии с длительностью  $\tau_L$  импульса. Это время  $t_s = d_T/c_s$  определяется конкуренцией между акустическими явлениями и нагревом (скорость и длительность нагрева) см. рис. 5.2. Здесь  $c_s$  — скорость звука в поглощающем веществе. Конечно, скорость  $c_s$  изменяется при нагревании. Для оценок обычно принимают значение, соответствующее твердому конденсированному состоянию при комнатной температуре перед лазерным воздействием; например, для



Рисунок 5.4 — Теплопроводность воды по формуле (5.3)

золота  $c_{\rm s}=3.1~{\rm km/c}$ . За толщину  $d_T$  целесообразно принимать толщину зоны термического влияния (ЗТВ), достигнутую к моменту времени  $t=t_{\rm s}$ 

Существует подрежим коротких/быстрых режимов. Он связан с ультракороткими лазерными импульсами (УКЛИ, UsLP), когда длительность импульса  $\tau_L$  меньше времени электрон—ионной релаксации  $t_{eq}$  указанного на рис. 5.2. Такие импульсы относятся к отдельному классу режимов, поскольку их длительность меньше длительности  $t_{eq}$  двухтемпературной (2T) стадии; на этой стадии электроны, поглощающие энергию лазера, гораздо горячее ионов  $T_e \gg$  $T_i$ . С 2T—стадией связана особая физика, рассмотренная выше в главе 1. Из этого рассмотрения становится понятна важность электрон—ионного взаимодействия, характеризуемого величиной  $\alpha$  в конденсированных средах. Еще один важный момент: сильное усиление электронной теплопроводности  $\kappa$  на 2T стадии [72;165]. При этом частично вырожденные электроны с относительно малой теплоемкостью  $c_e$  частично отделены от классической ионной подсистемы с большой теплоемкостью, в результате коэффициент температуропроводности (тепловой диффузии) электронов  $\chi = \kappa/c$  увеличивается в 10—100 раз (см. 1.2.1, [46; 72; 108; 165]) выше своего обычного значения ~ 1 см<sup>2</sup>/s, соответствующего однотемпературным (1*T*) условиям, что приводит к быстрому (сверхзвуковому) смещению зоны плавления в глубь вещества, см. 1.3.1; степень и длительность различия между температурами ионной и электронной подсистем определяются величиной  $\alpha$  — чем больше  $\alpha$ , тем короче время установления равновесия  $t_{eq}$ , определяющее, когда закончится электрон—ионная температурная релаксация.

# 5.1 Абляция при воздействии ультракороткого лазерного импульса $(F_{abs} = 400 \text{ мДж/см}^2, \tau_L = 0.1 \text{ пс}) [150, (O1:5:27)]$

При рассмотрении воздействия ультракоротких лазерных импульсов на сплошные мишени со стороны свободной границы с вакуумом в главе 1, §1.4.2 было показано, что при не слишком большом превышении порога абляции (до порога испарения) от поверхности мишени отлетает конечной толщины слой конденсированного (жидкого) вещества. При увеличении интенсивности излучения толщина отрывающегося слоя уменьшатся, и между ним и остающейся частью сплошной мишени возникает слой, заполненной смесью пара и жидкости. Молекулярно—динамической моделирование показывает, что формируется «пена» с тонкими жидкими стенками и паром внутри. Аналогично происходит абляция и при воздействии ультракоротких лазерных импульсов на мишень через жидкость, что подтверждается и экспериментами, см., например, [163;164], но в этом случае отлетающий слой тормозится жидкостью.

## 5.1.1 Ранняя стадия, 27-релаксация [150, (О1:5:27), §5.3]

Двухтемпературная (2*T*) релаксация, протекающая в первые пикосекунды после воздействия на золото ультракороткого (субпикосекундного) лазерного импульса, такая же, как в случае с вакуумом, рассмотренном выше в главе 1. Сближение электронной  $T_{\rm e}(x,t)$  и ионной  $T_{\rm i}(x,t)$  температур показано на рис. 5.5. Сближение температур происходит одновременно с распространени-



Рисунок 5.5 — ([150, (O1:5:27), рис. 10, 11]), Кинетика электрон—ионной релаксации. Профили электронной  $T_{\rm e}$  и ионной  $T_{\rm i}$  температур и плотности **р**. Слева — ранняя стадия расширения золота, нагретого лазерным импульсом, справа — фактически однотемпературная (1*T*) стадия, когда вклад электронного давления становится пренебрежимым.

ем тепла в толщу объемной мишени из золота благодаря высокой электронной теплопроводности. Это приводит к быстрому (сверхзвуковому) смещению зоны плавления в глубь вещества, см. 1.3.1. На временах около 10 пс продвижение зоны плавления все еще сверхзвуковое — за промежуток времени от 2 до 15 пс зона плавления "m" на рис. 5.5) смещается от  $x \approx 60$  нм до  $x \approx 160$  нм, тогда как головная характеристика волны разрежения на момент 15 пс находится на расстоянии  $\approx 60$  нм от начального положения контактной границы (КГ) воды и золота. На 2T—стадии скорость звука несколько повышается по сравнению со значением около 3 км/с благодаря дополнительной упругости, связанной с давлением электронов и нагревом решетки. Но при плавлении эта скорость снижается.

Зона плавления "m" на рис. 5.5 состоит из смеси твердой и жидкой фаз. Картины плавления в гидродинамике и молекулярной динамике сопоставлены в работе [91, (O1:1:4)] (см. также [166]). Там показано, что по интегральным параметрам (профиль температуры, доля жидкой фазы) эти картины согласуются. Ниже будут приведены данные МД—моделирования абляции золота в воду. Надо отметить, что плавление на ранней стадии происходит под давлением волны сжатия. Поэтому температура в зоне плавления выше температуры

тройной точки [166]. Резкий обрыв температур и плотности на рис. 5.5 происходит на КГ между золотом и водой.

Большая разница между T<sub>e</sub> и T<sub>i</sub> (десятки килокельвинов), существующая на первых пикосекундах (ср. профили на рис. 5.5, относящиеся к 0.3 и 2 пс), нивелируется к 5–10 пс. К этому времени тепловая энергия, перешедшая в ионы, в разы превосходит тепловую энергию, оставшуюся в электронах. Тем не менее даже на 15–30 пс остается заметная разница между локальными значениями температур T<sub>e</sub> и T<sub>i</sub> (см. рис. 5.5 справа). Есть две области и два источника этой разницы. На участке волны разрежения (слева от максимума плотности на рис. 5.5) эта разность связана с сильнейшим гидродинамическим растяжением золота, втекающего в высокоамплитудную волну разрежения. В этой волне плотность падает до значений, близких к критической плотности золота (5.3 г/см<sup>3</sup>). Растяжение является причиной расхода внутренней энергии на работу расширения. О влиянии потока расширения на разность температур можно говорить на стадии  $t < t_{\rm s} \approx 50$  пс. На стадии  $t > t_{\rm s}$  волна разрежения постепенно покидает слой прогрева  $d_T$ . Вне этого слоя температуры  $T_e$  и  $T_{\rm i}$ малы. Во второй области разница между температурам<br/>и $T_{\rm e}$ и $T_{\rm i}$  на рис. 5.5 обусловлена энергетическими затратами, идущими на плавление твердого золота (теплота плавления). Профиль электронной температуры T<sub>e</sub> более сглажен благодаря высокой теплопроводности электронной подсистемы.

# 5.1.2 Формирование «атмосферы» из—за торможения водой и увеличение массы и импульса атмосферы за счет аккреции [150, (O1:5:27), §5.2]

Основные моменты динамической картины расширения золота в воду показаны на рис. 5.6, 5.7. Как и при разлете в вакуум имеются волна разрежения и волна сжатия, идущая в глубь металла. Они разделены головной характеристикой волны разрежения, которая находится в высоком максимуме давления p (есть еще максимум p на фронте УВ). Мгновенное положение максимума давления примерно совпадает с невысоким максимумом плотности (сжатия по плотности невелики). Максимум плотности находится немного правее максимума p из—за убывания температуры в толщу золота.



Рисунок 5.6 — [150, (O1:5:27), рис. 12] Профили плотности и полного давления. Показаны ударная волна в воде и слой ударно—сжатой воды (УСВ), контакт вода — золото (КГ); «атмосфера» (атм) из золота, «нагребаемого» на тормозящую воду. Волна разрежения находится левее максимума давления, а волна сжатия — правее.

При небольших превышениях над порогом  $F_{abs}|_{abl}$  слой сплошного металла у КГ является откольной пластиной или, в случае с конечным диаметром лазерного пучка (см. 1.4.2 рис. 1.27), откольной оболочкой. При увеличении превышения над порогом откольная пластина становится тоньше и, при испарении в вакуум, на пороге испарения  $F_{abs}|_{ev}$  она исчезает [102; 132].

При разлете в вакуум отлетающий слой слегка тормозится упругостью пены между ним и сплошным веществом, но эта упругость мала. При испарении в прозрачное вещество — жидкость, в частности воду, или прозрачный диэлектрик, через которое подводится лазерный импульс — торможение заметнее, определяется соотношением акустических импедансов этого вещества и металла. При этом порог  $F_{\rm abs}|_{\rm ev}$  отсутствует. С ростом  $F_{\rm abs}$  откольная пластина не исчезает — торможение вещества, в которое происходит испарение, «сгребает» металл к КГ. При этом металл превращается в сплошную среду, пока давление на КГ  $p_{\rm CB}$  больше давления паров  $p_{\rm I-5}$  на границе 5 на рис. 5.7.

В неинерциальной системе координат, связанной с КГ, торможение *g* КГ эквивалентно эффективному полю тяжести с ускорением свободного падения *g*. Откольный слой или «атмосфера» 4 вещества опирается своим весом на ударно—сжатое вещество (воду) 3 на рис. 5.7. Этот слой находится в квазигид-



Рисунок 5.7 — [150, (О1:5:27), рис. 13,14] Такая же структура, как на рис. 5.6, но на момент времени t = 20 пс. Цифрами обозначены: 1 — контактная граница (КГ), 2 — ударная волна в воде, 3 — ударно—сжатая вода, 4 — слой сплошного металла, 5 — граница между слоем 4 и пеной 6, 7 — волна расширения в сплошном золоте. Уменьшение плотности и давления между границами 1 и 5 атмосферы вызвано эффективной гравитацией g, возникающей в результате торможения КГ 1.  $\Delta v$  — резкое падение скорости на верхней (по отношению к ускорению g) границе 5 слоя 4. Торможение плотного (см. рис. 5.6) слоя 1—4—5 из золота обеспечивает резкое падение давления  $\Delta p$  в этом слое. Осцилляции плотности

внутри волны разрежения соответствуют начальной стадии нуклеации.

ростатическом равновесии, поскольку это конденсированная фаза с большой скоростью звука (в отличие от двухфазной среды). Звук пробегает его быстрее, чем изменяется торможение g(t). В двухфазной области 6 скорость звука очень мала. Жидкость в этой области летит по инерции, на нее не действует эффективное торможение g. С этим связано появление избытка скорости  $\Delta v$ , показанного на рис. 5.7.

Выпадение вещества (пены или капель) 5–6 слой 4 на рис. 5.7 схоже с аккрецией газа на атмосферу в астрофизике [167–171].

С аккрецией связан приток массы  $\dot{m}$  и импульса  $\dot{m}\Delta v$  в слой 4 на рис. 5.7. Приток массы постепенно увеличивает геометрическую толщину атмосферы и является одной из причин уменьшения темпа торможения *g*. Добавление импульса эквивалентно давлению, прикладываемому к слою 4 на рис. 5.7 со стороны границы 5. Эта добавка также действует в сторону увеличения времени остановки откольной пластины. Вскоре после исчерпания потока  $\dot{m}$  пластина практически останавливается.

Расширение быстро нагретого золота создает УВ в воде, отмеченную цифрой 2 на рис. 5.7. Из—за распада разрыва золото—вода с высоким давлением в золоте (начальное давление в воде пренебрежимо мало) в воду бежит УВ, а в золото — волна разрежения. Между УВ и КГ находится слой ударно—сжатой воды (УСВ на рис. 5.6). Торможение КГ становится заметным по мере увеличения толщины слоя золота, охваченного волной разрежения, по отношению к толщине  $d_{\rm T}$  прогретого слоя. Вследствие замедления КГ появляется градиент давления: давление снижается от значения на фронте УВ к значению  $p_{\rm CB}$  на КГ. Замедляющаяся КГ генерирует затухающую УВ. С течением времени давление на УВ, степень сжатия в УВ и скорости УВ и воды за УВ монотонно снижаются.

Давление на контакте  $p_{CB}$  положительно и постепенно уменьшается со временем. Мгновенная зависимость давления от координаты непрерывна на КГ. Из—за безотрывного прилегания воды и золота на КГ величина замедления gскорости движения КГ одинакова в окрестности КГ для воды и золота. Поэтому в силу резкого скачка плотности на КГ (см. рис. 5.6, 5.7) имеет место скачок градиента давления на КГ. Отношение градиентов  $dp/dx = -\rho|g|$  равно отношению плотностей на КГ. Таким образом, происходит резкое падение давления в «атмосфере» — оболочке (1–4–5) на рис. 5.6, 5.7. На верхней границе 5 атмосферы давление поддерживается за счет давления в хвосте волны разрежения и за счет импульса, втекающего из этой волны в атмосферу.

В силу замедления КГ, вещество в хвосте волны разрежения движется быстрее, чем КГ и атмосфера. С этим и со сверхзвуковым характером движения вещества в хвосте волны разрежения связано появление скачка скорости  $\Delta v$  на верхней границе 5 атмосферы 4 (см. рис. 5.7).

Давление в воде намного ниже давления в волне сжатия, бегущей на рис. 5.6, 5.7 направо в толщу золота. Это обусловлено большой разностью в акустических импедансах воды и золота; в нормальных условиях  $Z_{Au}/Z_{wt} = 40$ . Влияние воды на волну разрежения в золоте ограничено атмосферой. За границей 5 атмосферы золото "не знает" о воде. Из—за малости импеданса воды атмосфера получается тонкой, ее толщина намного меньше толщины  $d_{\rm T}$  слоя прогрева на ранней и средней стадиях расширения.
Постепенно в атмосфере собирается часть порядка единицы от фрагментированного слоя прогрева. Соответственно толщина атмосферы становится сопоставима с  $d_{\rm T}$ . Это происходит на поздних стадиях торможения. При этом толщина атмосферы существенно меньше пройденного ею при торможении пути.

## 5.1.3 Нуклеация и средняя стадия торможения контакта [150, (O1:5:27), §5.3]

Начало нуклеации видно на рис. 5.7 — зубчатый участок в конце волны разрежения на профиле плотности (в расчете используется критерий нуклеации (1.52)). Нуклеация начинается сначала в хвосте волны разрежения, но на некотором конечном расстоянии от тонкой атмосферы. Затем, по мере продвижения волны разрежения, слой нуклеации расширяется (ср. профили плотности на рис. 5.7 и 5.8).

Толщина слоя нуклеации на момент 70 пс составляет 150 нм (см. рис. 5.8 справа). Далее по времени происходит существенное расширение двухфазного слоя жидкость—пар. Это связано с полетом по инерции вещества двухфазного слоя и наличием градиента скорости  $\partial v/\partial x$  в этом слое. Сравнение результатов  $2T\Gamma Д$ —-расчета с использованием критерия нуклеации (1.52) с МД—моделированием, которое будет показано ниже, позволяет сделать выводы относительно трехмерной структуры области жидкость—пар.

Золото в слое нуклеации сильно нагрето, см. рис. 5.8. Температура в нем поднимается от 3 до 8 кК. При таких температурах прочность снижается до малых значений. Поэтому перед началом нуклеации в расплаве не возникает существенных отрицательных давлений. Отрицательные давления появляются по мере снижения локальной температуры из—за постепенного выхода волны разрежения из слоя нагрева толщиной  $d_{\rm T}$ . На рис. 5.8 минимум p < 0 находится на глубине 112 нм. На этой глубине температура снижается до 3 кК.

В результате нуклеации формируется двухфазная смесь пар—жидкость. Давление в смеси низкое, если сравнивать его с давлением в волне сжатия в золоте (см. рис. 5.8). Давление в двухфазной области определяется давлением насыщенного пара в горячей части смеси, прилегающей к атмосфере. Согласно



Рисунок 5.8 — [150, (O1:5:27), рис. 15] Формирование обширной зоны нуклеации F (зубчатый участок профиля ρ) при превышении порога нуклеации по  $F_{\rm abs}$  в несколько раз (примерно в 4 раза,  $F_{\rm abs} = 400 \text{ мДж/см}^2$ ). Постепенно участок F двухфазной смеси трансформируется в пену золота. В пене объемная доля жидкой фазы мала. Атмосфера нагрета до температуры, примерно равной критической температуре. Справа — подробнее атмосфера и зона нуклеации, находящиеся справа от контакта 1 ([150, (O1:5:27), рис. 16]).

используемому УРС золота (построенному К.В. Хищенко по типу [42; 50; 54–59; 87]), давление пара золота порядка 0.1 ГПа при T = 6 кК. Слой пар—жидкость расширяется в режиме, близком к режиму разлета пыли: давление, градиенты давления и скорость звука в этом слое малы. Соответственно разлет происходит с сохранением распределения скорости по лагранжевой координате — значение скорости вморожено в лагранжеву частицу.

Как говорилось, вследствие торможения водой атмосфера движется медленнее, чем двухфазное вещество вблизи атмосферы. Скорость звука в смеси мала, поэтому поток смеси, натекающий на атмосферу, является сверхзвуковым, т. е. скорость звука в смеси меньше разности скоростей  $\Delta v$  на рис. 5.9. Следовательно, двухфазное вещество «не знает» о том, что ему предстоит столкнуться с атмосферой. Таким образом, верхней границей 5 атмосферы (см. рис. 5.6 и 5.7) является УВ, отделяющая атмосферу от аккрецирующего на нее потока. Структура профилей давления и скорости внутри этой УВ показана на рис. 5.9 и 5.10. Толщина атмосферы в момент времени t = 70 пс составляет 15–20 нм. Примерно такова же размытость УВ.



Рисунок 5.9 — [150, (О1:5:27), рис. 17] Резкое уменьшение скорости разлета при столкновении вещества смеси пар—расплав с верхней границей атмосферы  $\Delta v = 150$  м/с (ср. с рис. 5.7, где это снижение скорости составляло 240 м/с).



Структура атмосферы и УВ, которая формирует верхнюю границу атмосферы. Вертикальная метка 1 отмечает мгновенную позицию КГ.

Разность давлений между контактом 1 на рис. 5.10 и давлением в набегающей смеси составляет примерно 1.8 ГПа. По траектории КГ можно определить скорость и замедление g(t) КГ. В момент t = 70 пс получается  $g \approx 4.3 \times 10^{14}$  см/с<sup>2</sup>. Вес атмосферы дает разницу давлений

$$\Delta p_{\rm atm} = \rho g h$$

между границами 1 и 5 атмосферы 4 (см. рис. 5.8). Подставляя  $\rho \approx 10$  г/см<sup>3</sup> и толщину атмосферы h = 10–20 нм, получается  $\Delta p_{\rm atm} \approx 1$  ГПа.

Оценим приращение давления в УВ на границе 5 атмосферы 4. Закон сохранения массы

$$\Delta v + D = CD$$

где  $\Delta v$  — скорость втекающей смеси в системе координат, связанной с атмосферой, D — скорость УВ в этой же системе координат,  $C = \rho_2/\rho_1$  — степень сжатия в УВ,  $\rho_2$  и  $\rho_1$  — плотности вещества в атмосфере на ее верхней границе 5 и в смеси перед УВ. Закон сохранения импульса дает

$$\Delta p_{\rm SW} = \rho_1 \Delta v (\Delta v + D),$$



Рисунок 5.11 — [150, (O1:5:27), рис. 20,22] Затухание треугольной УВ в воде (метка 2) по мере распространения и в следствие постепенного замедления «поршня», толкающего УВ — КГ (метка 1) между золотом и водой. Обычно диаметр пятна нагрева составляет сотни микрометров, поэтому 1D—приближение все еще применимо — УВ в воде, прошедшая к t = 15 нс около 30 мкм, еще остается плоской.

где  $\Delta p_{\rm SW}$  — изменение давления в УВ. Подставляя  $\Delta v = 150$  м/с (см. рис. 5.9),  $C \approx 2$ , находим  $\Delta p_{\rm SW} \approx 0.2$  ГПа. Правда, сумма  $\Delta p_{\rm atm} + \Delta p_{\rm SW} \approx 1.2$  ГПа получается меньше, чем 1.8 ГПа. Это связано с погрешностью оценки. Видно, что в основном разность давлений перед и под атмосферой связана с весом атмосферы.

В рассмотренной УВ происходит захлопывание полостей, и, переходя в атмосферу, двухфазная смесь пар—расплав возвращается в однофазное жидкое состояние. Около КГ (см. рис. 5.8) это состояние сверхкритического флюида с жидкостной плотностью, и температурой и давлением выше критических температуры и давления золота, но ниже критической адиабаты. В дальнейшем (см. ниже 5.1.4) при расширении и охлаждении оно переходит в жидкость.

### 5.1.4 Поздние стадии торможения контакта [150, (O1:5:27), §5.4)]

На рис. 5.11 показано, как ослабляется УВ в воде. Одновременно происходит уширение атмосферы за счет, во-первых, снижения темпа замедления

g КГ и, во—вторых, за счет аккумуляции массы из двухфазной смеси. На интервале 70–250 пс, представленном на рис. 5.11 слева, УВ (метка 2) снижает свою скорость с 3.55 до 3.0 км/с; замедление КГ уменьшается с 43 × 10<sup>13</sup> до  $8.8 \times 10^{13}$  см/с<sup>2</sup>; скорость КГ убывает с 750до 410 м/с; средняя плотность золота в атмосфере повышается с 10.2 до 11.7 г/см<sup>3</sup>. Уплотнение атмосферы вызвано снижением давления на КГ и уменьшением температуры атмосферы с 7.60 до 6.44 кК. Охлаждение атмосферы в 2*T*ГД—расчете связано с присоединением к атмосфере холодной пены вследствие аккреции пены на атмосферу (в рассматриваемом 2*T*ГД—расчете теплопроводностью воды пренебрегаем). В МД—расчетах, которые будут показаны ниже, учитывается и теплопроводность пены (теплоотвод по мембранам и нитям), и вибрационная теплопроводность по молекулам воды.

Изменение распределения плотности в золоте на интервале 0.25 нс < t < 1 нс проиллюстрировано на рис. 5.12. Координата УВ в воде на этом интервале возрастает с 870 до 2850 нм; скорость УВ падает до 2.5 км/с; сжатие воды в УВ при t = 1 нс составляет 20%. УВ находится сильно левее профиля плотности, показанном на рис. 5.12; толщина атмосферы h(t = 1 нс) = 65 нм. Поэтому УВ в воде на этом рисунке не показана. Отметим, что толщина атмосферы увеличилась в 2–3 раза за промежуток времени от 70 пс до 1 нс (ср. рис. 5.12 и рис. 5.9, 5.10). На интервале 0.25 нс < t < 1 нс аккреция двухфазной смеси в атмосферу постепенно прекращается, поскольку большая часть смеси успевает высадиться в атмосферу.

При t = 1 нс давление на УВ в воде составляет  $p_{SW}|_{(t=1 \ HC)} = 1.1$  ГПа и на КГ  $p_{CB}|_{(t=1 \ HC)} = 0.22$  ГПа = 2200 бар, т. е. давление на далеко отошедшей УВ становится намного больше, чем давление на контакте. Температура  $T(t = 1 \ HC) = 5.93$  кК выравнивается по толщине атмосферы. Давление насыщенных паров золота при этой температуре равно 750 бар.

Профили давления в воде на поздней стадии расширения КГ представлены на рис. 5.11 справа и 5.13. УВ ушла далеко, поэтому участок с золотом в этом масштабе виден как слабый всплеск справа от нуля. Этот всплеск медленно (по сравнению со скоростью УВ) смещается влево. Профили течения, показанные на рис. 5.13, не являются автомодельными. В относительных координатах слой крутого снижения давления за УВ становится все тоньше и тоньше по сравнению с расстоянием, которое пробежала УВ.



Рисунок 5.12 — [150, (О1:5:27), рис. 18] Эволюция профиля плотности в золоте от состояния атмосфера плюс вспененная смесь к состоянию с исчерпанным запасом смеси.



амплитуду УВ в воде.



Рисунок 5.14 — [150, (О1:5:27), рис. 24] Зависимости от времени давления (кри-Изменение профиля давления со вая  $p_{\rm CB}$ ) и температуры (кривая  $T_{\rm CB}$ ) на временем в координатах, нормиро- КГ, давления насыщенного пара золота ванных на текущую позицию и при этой температуре (кривая  $p_{\rm vap}(T_{\rm CB})$ ) и давления на УВ в воде (кривая  $p_{SW}$ ).

Сравнение хода давления со временем на УВ и на КГ показано на рис. 5.14. Из рис. 5.13 и 5.14 видно, что со временем давление на КГ падает быстрее, чем давление на УВ. После  $t \approx 100$  пс УВ в воде затухает приблизительно по закону  $p_{SW}(t) \propto t^{-1/2}$  (см. [172, §102]). Это связано с звуковой дисперсией, которая растягивает волну разрежения, «сидящую» на УВ в воде. Здесь речь идет о приблизительно треугольной части спада давления и скорости за УВ (см. рис. 5.11 и 5.13). Давление и скорость воды за УВ приблизительно пропорциональны друг другу в слабонелинейной УВ. Поэтому скорость за фронтом УВ также затухает как  $t^{-1/2}$ . Выход на закон  $t^{-1/2}$  означает, что подталкивание УВ поршнем (т. е. КГ) уже не играет существенной роли.

На субнаносекундном интервале времен давления  $p_{SW}$  и  $p_{CB}$  сопоставимы (см. рис. 5.14). Затем давление на КГ начинает резко снижаться. Это связано с торможением КГ (см. разд. 5.1.5). Ситуация меняется, когда снижающееся внешнее давление (давление воды) на КГ опускается до давления насыщенного пара золота при температуре слоя золота, см. сближение кривых  $P_{CB}$  и  $P_{vap}(T_{CB})$  на рис. 5.14. Далее по времени (после достижения  $p_{vap}$ ) испарение (при наличии ограничения водой объема пара золота) поддерживает давление на КГ на уровне давления насыщенного пара. В результате темп снижения давления на КГ замедляется (см. рис. 5.14).

### 5.1.5 Степень неустойчивости контакта [150, (O1:5:27), §5.5]

На рис. 5.15 приведены временные зависимости координат (слева) и скоростей (справа) за УВ и на КГ. Скорость УВ снижается до скорости звука в воде 1.5 км/с при уменьшении давления УВ существенно ниже объемного модуля воды 2.3 ГПа (см. рис. 5.14). Расширение УВ на рис. 5.15 прослежено примерно до 400 мкм. Далее в экспериментах с диаметром пятна  $2R_{\rm L}$  в сотни микрометров происходит трансформация УВ из одномерной плоской (зависимость параметров от x) в сферическую УВ с зависимостью параметров от радиуса r, отсчитываемого от центра пятна лазерного нагрева. На момент t = 200 нс отношение масс воды за УВ и оторвавшегося слоя золота очень велико:  $x_{\rm SW}/h \approx 350 \times 10^3/50 = 7000$ .



Рисунок 5.15 — Смещение КГ (кривая CB) и УВ (кривая SW) [150, (O1:5:27), рис. 25] слева в зависимости от времени — справа и скорости воды  $v_{\rm CB}$  около КГ и  $v_{\rm SW}$  за фронтом УВ [150, (O1:5:27), рис. 26] — . По мере ослабления УВ эта скорость уменьшается примерно пропорционально давлению на фронте УВ (см. рис. 5.14):  $u_{\rm SW} \approx p_{\rm SW}/Z$ wt,  $Z_{\rm wt}$  — акустический импеданс воды. Кривая Fit — аналитическая аппроксимация.

Смещение  $L = x_{\rm CB}$  КГ составляет около 3 мкм на момент 200 нс, см. рис. 5.15 слева. К этому моменту скорость КГ снижается до единиц м/с (см. рис. 5.15 справа), т. е. слой близок к остановке своего движения. Получается, что в одномерной постановке слой золота (атмосфера) толщиной h = 50-100 нм проходит до остановки путь L в 60–30 своих толщин. Поскольку КГ очень быстро набирает скорость и далее долго тормозится, имеем

$$L = \int \mathrm{d}t \int \mathrm{d}t \, g(t) \sim gt^2/2,$$

где g — среднее замедление, а интегрирование ведется назад от момента остановки.

В неинерциальной системе отчета, связанной с тормозящейся КГ, возникает картина, соответствующая неустойчивости Рэлея—Тейлора (HPT, RTI— Rayleigh—Taylor) — тяжелое золото над легкой водой.

Рэлей—Тейлоровское перемешивание на границе двух сред, сильно различающихся по плотности (золото—вода), идет по закону  $h_+ = \alpha_+ g t^2$ ,  $\alpha_+ \approx 0.03-0.05$  [168; 173; 174]. Здесь h+- путь, пройденный пузырями воды в толщу атмосферы золота от начального положения поверхности КГ. Слой золота толщиной  $h_+$  фрагментирован на струи и капли. Остаток атмосферы  $h-h_+$  на момент t еще сохраняет свою сплошность и выдерживает перепад давления между своей внутренней границей и текущей границей *h*+ проникновения пузырей. Внутренней в данном случае является граница атмосферы и двухфазной смеси.

Атмосфера (пленка золота) полностью перемешивается с водой, когда величина  $h_+$  становится порядка толщины атмосферы,  $h_+ \approx h$ . Отсюда следует оценка пути  $L_{\rm max}$ , пройденного атмосферой до полного перемешивания:  $2\alpha_+L_{\rm max} \approx h$ , или  $L_{\rm max} \approx h/2\alpha_+$ . Поскольку  $\alpha_+ = 0.03$ -0.05, имеем  $L_{\rm max} \approx$ (10-15)h, т. е. до своего распада атмосфера может пройти путь в 10-15 своих толщин. На рис. 5.15 справа показана аналитическая аппроксимация скорости КГ (кривая Fit). Она имеет компактный вид

$$v_{\rm CB} = v_{\rm CB0} \exp\left(c_t (t - t_0)^{p_t}\right),\tag{5.4}$$

где  $v_{\rm CB0} = 4.0554$  км/с,  $c_t = -0.631255$  с<sup>- $p_t$ </sup>,  $t_0 = 1.10875$  с,  $p_t = 0.23302$ . Согласно одномерному расчету, торможение атмосферы происходит после прохождения 30–60 толщин (см. рис. 5.15). Это указывает на возникновение условий, когда неустойчивость Рэлея—Тейлора (HPT, RTI) может стать существенной. 1D лагранжевая гидродинамика не позволяет рассматривать такие не—1D явления, как HPT. Ниже в след. разделе 5.1.6 будут представлены результаты МД—моделирования.

Инкремент HPT в вязкой жидкости с учетом поверхностного натяжения (но без учета конечной толщины атмосферы) имеет вид [175]

$$\gamma = \sqrt{(2k^2 \mathbf{v})^2 + gkAt - k^3 \sigma/(\rho_{Au} + \rho_{wt})} - 2k^2 \mathbf{v}$$
(5.5)

В выражении (5.5) члены gkAt,  $k^3\sigma/(...)$  и  $k^2\nu$  связаны соответственно с плавучестью, капиллярностью и вязкостью. За кинематическую вязкость  $\nu$  будем принимать вязкость золота. Отношение плотностей  $\rho_{\rm Au}/\rho_{\rm wt} \approx 10$ , поэтому число Атвуда At  $\approx 0.8$ . Волновое число  $k = 2\pi/\lambda$ . Для волн  $\lambda < h$  атмосферу можно считать толстой: kh > 6 > 1. Поверхностное натяжение аппроксимируется выражением (1.53)

$$\sigma(T) = \sigma(T_{\rm m}) \left(\frac{T_{\rm c} - T}{T_{\rm c} - T_{\rm m}}\right)^{1.25},$$

где критическая температура золота  $T_{\rm cr} = 7.8$  кK, температура плавления золота  $T_{\rm m} = 1.338$  кK, поверхностное натяжение золота в точке плавления согласно [176]  $\sigma(T_{\rm m}) = 1150$  дин/см. При околокритических температурах имеем  $\sigma = 155, 84, 25$  дин/см при T = 6.5, 7.0, 7.5 кK.



Рисунок 5.16 — [150, (O1:5:27), рис. 27] Замедление КГ. Оно складывается в результате торможения водой и ускорения аккреционным потоком вещества в двухфазном состоянии (см. рис. 5.9). Функция g(t) получена дифференцированием аналитической аппроксимации скорости (5.4) (см. рис. 5.15 справа).

Как видно из формулы (5.5), вязкость замедляет рост HPT, но стабилизировать КГ не может. При любой вязкости стабилизация определяется поверхностным натяжением. Неустойчивой КГ становится при длинах мод, превышающих капиллярный масштаб

$$k_{\sigma} = \sqrt{rac{\operatorname{At}g(
ho_{\operatorname{Au}} + 
ho_{\operatorname{wt}})}{\sigma}}, \qquad \lambda_{\sigma} = rac{\lambda_1}{\sqrt{g/g_{14}}},$$

Здесь  $g_{14} = 10^{14} \text{ см/c}^2$ . Если для оценки принять  $\sigma = 100 \text{ дин/см}$ , At = 0.8,  $\rho_{Au} = 10 \text{ г/см}^3$ ,  $\rho_{wt} = 1 \text{ г/см}^3$ , то  $\lambda_1 \approx 21$  нм. При фиксированных поверхностном натяжении и плотностях масштаб  $\lambda_{\sigma}(g)$  растет по мере убывания темпа замедления g(t) со временем (см. рис. 5.16). Таким образом, если фиксировать длину волны  $\lambda$ , то рост возмущения на этой длине продолжается на конечном интервале времен до момента  $t_*$ , в который величина  $g(t_*)$  уменьшится до значения  $g = g_{14}(\lambda_1/\lambda)^2$ , см. рис. 5.17–5.18, т. е. рост мод большего масштаба продолжается дольше; правда, инкремент их роста меньше.

На рис. 5.17–5.18 показано, как развивается НРТ в рамках линейной теории. Значения параметров были следующими:  $\sigma = 100 \text{ дин/см}, \nu = 0.002 \text{ см}^2/\text{с},$ замедление находилось по формуле  $g = dv_{\text{CB}}/dt$ , где  $v_{\text{CB}}(t)$  дается формулой (5.4). На рис. 5.17 представлена зависимость инкремента неустойчивости



Рисунок 5.17 — [150, (O1:5:27), Pисунок 5.18 рис. 28] Инкремент НРТ  $\gamma(t)$  (5.5). [150, (O1:5:27), рис. 29–30] Амплитуда растет на интервале вре- Рост числа  $\int^t \gamma(t') dt'$  со временем — усимен 0 < t < t<sub>\*</sub>. При t<sub>\*</sub> мода ление амплитуды возмущения a(t) =стабилизируется поверхностным на-  $a(t_0) \exp\left(\int^t \gamma(t') dt'\right)$  в десятки и сотни тяжением (см. текст). Параметры раз при типичных параметрах задачи.  $\sigma = 100 \text{ дин/см}, \ \nu = 0.002 \text{ см}^2/\text{с}.$ 

 $\gamma$  от времени согласно формуле (5.5). На рис. 5.18 показано, как со временем t накапливается величина  $\int^t \gamma(t') dt'$  и происходит экспоненциальное усиление амплитуды линейного возмущения в квазиклассическом приближении  $a(t)/a(t_0) = \exp\left(\int^t \gamma(t') dt'\right)$ . Видим, что усиление значительное — выше на полтора—два порядка. Перейдет ли возмущение на нелинейную стадию, зависит от спектра амплитуд начальных возмущений  $a(t_0, \lambda)$ . Возмущения  $a(t_0, \lambda)$  связаны с начальной шероховатостью мишени, тепловыми флуктуациями и бомбардировкой внешней границы атмосферы продуктами нуклеации, т. е. жидкими фрагментами двухфазной смеси. Чтобы понять, как развивается ситуация возле КГ золото — вода необходимо МД—моделирование, результаты которого показаны ниже, в след. разделе 5.1.6

Проявление HPT было отмечено даже при интенсивностях меньших порога абляции и образования наночастиц по возникающему на поверхности, нагреваемой через жидкость, рельефу [177].

# 5.1.6 Результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования [150, (О1:5:27), §6]

Молекулярно—динамическое моделирование, результаты которого приводятся для сравнения с 2*T*ГД в этом разделе, было проведено В.В. Жаховским во ВНИИА им. Духова (Росатом).

Прямой молекулярно—динамический расчет абляции золота в воду требует огромных численных ресурсов. Даже если ограничиться временами порядка 3 нс (а не 200 нс, как в 2*T*ГД расчете в разд. 5.1.4), толщина, на которую уходят волны сжатия в толщу воды и золота за 3 нс составляет порядка 10 мкм. Поперечный размер должен быть не меньше нескольких толщин атмосферы, т. е.  $L_y = L_z > 100$  нм. В таком объеме содержится больше 10 миллиардов атомов, причем число шагов интегрирования до 3 нс с шагом порядка 1 фс составляет три миллиона. Поэтому, во—первых, вместо моделирования полноценной 3D задачи использовалась квази—2D: толщина  $L_z$  расчетного параллелепипеда бралась 8.2 нм. Из теории НРТ известно, что количественно двумерный и трехмерный случаи различаются умеренно [168;173]. Коэффициенты перемещивания  $\alpha_+$  примерно одинаковы. Скорости всплытия пузырей сопоставимы [178].

Во—вторых, ширина  $L_y$  варьировалась. Сначала выполнялись расчеты с относительно малой шириной 25 нм. Затем выполнялся расчет с большой шириной 250 нм.

Кроме того, использовались приемы с отсечением «лишней» воды и «лишнего» золота. Дело в том, что большая длина  $L_{total} = L_{Au} + L_{wt}$  (по направлению x) слоя, охваченного движением, получается из—за разбегания волны сжатия в золоте и УВ в воде от начальной плоскости КГ. Эти волны движутся со скоростями, которые близки к скорости звука или превышают ее. Скорость звука очень велика по сравнению со скоростями, с которыми происходят движения в интересующем нас намного более тонком (по сравнению с  $L_{total}$ ) приконтактном слое около КГ. Только на акустической стадии длительностью порядка  $t_s = d_T/c_s$  скорость КГ  $v_{CB}(t)$  порядка скорости звука  $c_s$  (см. рис. 5.15 справа).

Между тем после завершения стадии нуклеации волну сжатия в золоте и приконтактную область разделяет двухфазный слой, который находится при околонулевых давлениях, и скорость звука в котором мала. События, происходящие с волной сжатия в золоте (ее распространение, опрокидывание, упругопластическое расщепление [166]), никак не сказываются на приконтактном слое. Длительность нуклеации порядка  $t_{\rm s}$  — нуклеация продолжается пока волна разрежения не покинет слой лазерного прогрева толщиной  $d_T$  вслед за волной сжатия в золоте. Поэтому на временах порядка нескольких масштабов  $t_{\rm s}$  выбран момент времени  $t_{\rm crop}$ , в который толстый двухфазный слой рассекается плоскостью. Атомы золота, находящиеся на глубинах за этой плоскостью, при  $t > t_{\rm crop}$  не участвуют в моделировании.

С отсечением «лишней» воды сложнее.

Сначала делался расчет до 400 пс с малой шириной  $L_y = 25$  нм с начальными условиями, соответствующими прогреву в 2*T*ГД расчете. Эволюция профилей в таком случае показана на рис. 5.19, 5.20. Находилась траектория лагранжевой частицы (материальной частицы)  $x_{140}(t)$ , которая до лазерного воздействия находилась на расстоянии 140 нм от КГ. Для этого выбиралась группа соседних молекул воды на расстоянии около 140 нм от начальной позиции КГ и записывалась траектория их центра масс. Функция  $x_{140}(t)$  после момента t = 400 пс гладко аналитически продолжалась до t = 1 нс.

Затем выполнялся МД—расчет с более тонким слоем воды, находящимся в промежутке между КГ и границей  $x_{140}(t)$ . При этом граница слоя воды принудительно смещалась по закону  $x_{140}(t)$ . Сравнение проверочного расчета с полным слоем ударно—сжатой воды и расчета, ограниченного границей  $x_140(t)$ , показывает, что эти расчеты практически эквивалентны.

Отсечение «лишних» золота и воды комбинировалось с десятикратным увеличением ширины  $L_y$  от 25 до 250 нм. Ширина  $L_y$  исключительно важна для полноценного моделирования развития НРТ. В узких каналах развитие НРТ сильно тормозится.

Десятикратное увеличение ширины  $L_y$  от 25 до 250 нм заключается в том, что расчет в момент  $t_{\text{multi}}$  размножается на десять полос (или каналов) и каналы эти объединяются в единый канал. При  $t > t_{\text{multi}}$  расчет ведется в расчетном параллелепипеде с  $L_y = 250$  нм. Из—за другого расположения ячеек Вороного в расчете с объединенными каналами эти расчеты неэквивалентны. НРТ быстро усиливает эту неэквивалентность. Так что вскоре объединенный широкий канал действительно начинает работать как широкий канал с самого начала лазерного нагрева. Таким образом, осуществлялся расчет с большой шириной  $L_y$  и с намного уменьшенным числом молекул воды по сравнению с прямым моделированием.



Рисунок 5.19 — [150, (О1:5:27), рис. 32] Профили давления и плотности в МД-моделиро- (01:5:27), вании с  $L_v = 25$  нм без отрезания части пены Скачок скорости золота, прилегающей к дну кратера и воды за гра- (торможение) на верхницей  $x_{140}(t)$ . Результаты аналогичны полученным ней границе атмосферы,





t = 206 пс, MД

-0.4

-0.6

Чтобы не пропустить важную стадию замедления КГ, такой расчет начинается с момента времени до начала нуклеации. Все стадии замедления КГ существенны для накопления и усиления возмущений механизмом HPT (см. рис. 5.17, 5.18).

Результат МД-расчетов представлен на рис. 5.21. Размер кадра по горизонтали  $L_y = 249.2$  нм, размер пикселя 0.623 нм, верхней границей кадров на рис. 5.21 является указанная выше лагранжева частица  $x_{140}(t)$ . После выхода УВ в воде за границу  $x_{140}(t)$  толщина слоя воды медленно увеличивается из за постепенного снижения давления в приконтактном слое (см. зависимость  $p_{\rm CB}(t)$  на рис. 5.14). Снижение давления уменьшает плотность воды; в числах это эффект умеренный. Соответственно возрастает толщина слоя воды, показанного на рис. 5.21 (область, занятая водой, окрашена в синий цвет). Эффект уменьшения степени сжатия воды и расширения слоя, ограниченного поверхностью  $x_{140}(t)$ , сплетается с сильной деформацией КГ вода—золото



Рисунок 5.21 — [150, (O1:5:27), рис. 31] Усиление возмущений Рэлея—Тейлора из—за торможения атмосферы давлением воды. Желтым цветом показано золото, голубым — вода. Вблизи границы золото — вода происходит сильный нагрев воды. Это отражено изменением цвета воды с синего на голубой. На последнем кадре видна оторвавшаяся капля золота. Это один из механизмов формирования наночастиц при абляции в жидкость.

из—за развития возмущений Рэлея—Тейлора и с эффектом сильного нагрева воды возле КГ (горячая вода, окрашенная на рис. 5.21 в голубой цвет, при этом дополнительно расширяется). В МД—моделировании теплопроводность золота и воды учитывается. Общее число атомов в расчете, показанном на рис. 5.21, около 50 миллионов.

Из рис. 5.21 ясны процессы аккреции двухфазной смеси из фрагментов расплава и каверн с паром на границу атмосферы (ср. с рис. 5.8–5.10. На рис. 5.21 атмосферой является сплошной однофазный слой золота. Давление в нем растет по направлению снизу вверх. Из-за аккреции толщина атмосферы на рис. 5.21 увеличивается с течением времени, несмотря на повышение плотности золота в атмосфере вследствие постепенного охлаждения атмосферы. Остывание происходит из—за нагрева воды и из—за теплопередачи по мембранам и нитям пены в толщу пены, где температура вспененного золота ниже, чем в горячей атмосфере. Вода обладает небольшой, но существенной атомной теплопроводностью. В золоте электронная теплопроводность намного больше. Она моделируется блоком Монте—Карло, встроенным в МД—алгоритм с динамической декомпозицией по многогранникам Вороного [179].

Влияние удара фрагмента длиной  $\lambda$  по поверхности атмосферы экспоненциально затухает в толщу атмосферы на глубине  $1/k = \lambda/2\pi, k = 2\pi/\lambda$ . Вопервых, скорость удара  $\Delta v$  невелика (см. рис. 5.7, 5.9 и 5.10); правда, и скорость развития НРТ мала. Во—вторых, глубина  $\lambda/2\pi$  меньше текущей толщины атмосферы. С течением времени величина  $\lambda(t)$  растет — укрупнение ячеек пены. Но и толщина атмосферы увеличивается.

Из аналогичных соображений (относительно затухания влияния на глубине  $\lambda/2\pi$ ) была выбрана толщина слоя воды 140 нм, определяющая описанную выше функцию  $x_{140}(t)$ . Рост НРТ—мод с масштабом по оси y, показанном на рис. 5.21, не сказывается на поверхности  $x = x_{140}(t)$ . Соответственно граница  $x = x_{140}(t)$ , составленная из лагранжевых частиц воды, остается плоской (горизонтальной на рис. 5.21), несмотря на сильнейшую деформацию КГ.

# 5.2 Абляция при воздействии лазерного импульса до мульти—пикосекундного диапазона [149;180, (O1:5:31)]

На первый взгляд кажется удивительным, что динамика на стадии, начинающейся после момента t = 50 пс (когда заканчивается импульс длительностью 50 пс), практически одинакова в случаях со столь разными длительностями  $\tau_L$  как 0,1 пс и 50 пс если энергии  $F_{\rm abs}$  одинаковы, как это видно по профилям температуры на рис. 5.22. Температуропроводность  $\chi_{\rm Au}$  золота велика на двухтемпературной  $(2T, T_e > T_i)$  стадии [150, (O1:5:27)] по сравнению с его однотемпературными ( $1T, T = T_e = T_i$ ) значениями в твердом и жидком состояниях. Но длительность ультракороткого импульса и длительность 2T стадии меньше длительности 50 пс субнаносекундного импульса. Поэтому толщины зон теплового воздействия в обоих случаях примерно одинаковы, см. рисунок 5.22.

Глобальная структура потока показана на рисунке 5.23. Как и в случае воздействия ультракороткого лазерного импульса, рассмотренного выше 5.1 (см. [150, (O1:5:27)]), перед действием импульса имеется два неподвижных контактирующих полупространства; левое  $x_0 < 0$  заполнено водой, а правое  $x_0 > 0$  соответствует объемной золотой мишени; здесь  $x_0$  — лагранжева координата; она соответствует начальным (до лазерного воздействия) положениям материальных частиц. Лазерный луч проникает через прозрачную воду и нагревает поглощающее золото в ее скин—слое. Нагрев вызывает рост давления, а градиенты давления, в свою очередь, вызывают движение. После окончания



Рисунок 5.22 — [180, (O1:5:31), рис. 1] Распределения температуры для двух случаев, сильно отличающихся по длительности импульса. Для ультракороткого импульса используется код двухтемпературной (2T) гидродинамики (2TГД) [150, (O1:5:27)] и показан профиль ионной температуры  $T_i(x,t = 70 \text{ nc})$ . В случае субнаносекундного импульса  $\tau_L = 50 \text{ nc } 2T$ —эффекты малозначимы. Поэтому используется код однотемпературной (1T) гидродинамики (1TГД); представлен профиль  $T(x,t = 70 \text{ nc} (T = T_i = T_e)$ . Теплопроводность воды включена в код 1TГД. Температура и тепловой поток продолжаются на контактной границе (КГ) между золотом (Au) и водой (Wt). Теплопроводность  $\chi_{wt}$ воды более чем на два порядка меньше, чем теплопроводность расплавленного Au  $\chi_{Au}$ . Поэтому только тонкий слой воды вблизи CB нагревается до момента, показанного на рисунке.



Профили плотности и скорости. Точка "m" отмечает текущее положение границы между твердым и жидким золотом. Видно, что на этапе после ~ 1 нс приконтактный слой гораздо тоньше, чем область между двумя УВ. Профили построены как функции текущей координаты (слева) и начальных положений  $x_0$  материальных частиц золота и воды, что позволяет легко оценить массы. Например, текущая масса ударно сжатой воды равна  $x_0|_{SW-wt} * \rho_0|_{wt}$ , где  $x_0|_{SW-wt}(t)$  – положение УВ в воде,  $\rho_0|_{wt}$  – начальная плотность воды. В координатах Лагранжа вещество неподвижно;  $x_0 = 0 - K\Gamma$  золота и воды.

импульса пространственное расширение постепенно уменьшает давление. Две ударные волны (УВ) на рисунке 5.23 движутся в воду и в золотую мишень. Ударные волны формируются благодаря нелинейным эффектам вследствие фокусировки характеристик и опрокидывания волн.

На рисунке 5.23 показано сравнение моделирования Au—вода для ультракороткого импульса  $\tau_L = 100 \text{ фc} (5.1 [150, (O1:5:27)])$  и субнаносекундного импульса с  $\tau_L = 50$  пс. Поглощенные энергии одинаковы. В ультракоротком случае на больших временах отрезана медленно движущуюся часть объемного золота (см. 5.1.4 [150, (O1:5:27)]) и сохранена только действительно значимая для смешивания с водой и получения наночастиц часть золотой. Из сравнения двух моделирований на рисунке 5.23, видно, что:

При обеих длительностях лазерного импульса формируется область пены и атмосфера [150;151;153–156;181]. Атмосфера — это слой, контактирующий с водой и находящийся в квазигидростатическом равновесии с КГ, как это описано в выше 5.1.2 [150, (O1:5:27)]. Атмосфера разделяет пену и воду. В случае довольно длинного субнаносекундного



Внутренняя структура слоя пены вблизи КГ с предыдущего рисунка 5.23. Видно, как скачок скорости на рис. 5.23 накапливается вдоль растягивающегося слоя пены. Инерция золота поддерживает это растяжение на показанном временном этапе. Маленькие кружки отмечают положение узлов лагранжевой сетки. Сетка должна покрывать большие расстояния, пройденные УВ. Тем не менее она удовлетворительно описывает образование пены — на каждый жидкий слой пены приходится несколько точек сетки.

импульса атмосфера образуется, когда КГ начинает замедляться. Как будет показано ниже, КГ ускоряется во время нарастания импульса  $I \propto \exp(-t^2/\tau_L^2), \tau_L = 50$  пс и некоторое время после; моделирование начинается с отрицательного момента времени, равного  $-3\tau_L$ .

- На наносекундном временном масштабе и в дальнейшем длительность лазерного импульса, изменяемая в 500 раз от 0,1 до 50 пс, оказывается несущественной.
- Пассивная часть золотой мишени, сохраненная при одном моделировании (обратите внимание на УВ, уходящую в объем, на рисунке 5.23) и удаленная при другом, действительно, незначительна для динамики пены и воды.

Однако есть и различия.

В ультракоротком случае нуклеация начинается на стадии  $t \approx 20$  пс, в то время как в субнаносекундном случае начало нуклеациии приходиться на  $t \approx 80$ пс. Отметим, что время отсчитывается от момента t = 0, соответствующего максимуму гауссова импульса. Нуклеация и вспенивание для ультракороткого

случая (длительность 0,1 пс, поглощенная энергия 400 мДж/см<sup>2</sup>) были описаны в 5.1.3 [150, (O1:5:27)], в то время как для случая субнаносекундного импульса с той же поглощенной энергией процессы зарождения и вспенивания представлены здесь ниже. Лес иголок, наблюдаемый на температурном профиле 5.22 T(x,t = 70 nc) для ультракороткого случая, вызван «1D—пенообразованием». Это представление вспенивания в одномерных гидродинамических симуляциях, где скачки плотности и температуры появляются в области, занятой пеной, см. рис. 5.8 [150, O1:5:27, рис. 15 и 16].

Скачок скорости ~ 0,23 км/с на рисунке 5.23 охватывает слой, в котором находятся атмосфера и пена. Скачок отражает расширение КГ относительно дна пены в момент времени 0,5 нс. Эта скорость мала (всего несколько %) по сравнению со скоростью  $c_s|_{\rm Au} + c_s|_{\rm wt} = 4.5$  км/с, дающей нижний предел скорости увеличения расстояния между двумя УВ на рисунке 5.23. Расширение пены происходит в результате легкой растяжимости паровой компоненты в пене. Структура тонкого слоя вблизи КГ ("скачок" на рисунке 5.23) показана на рисунке 5.24.

Тем не менее, количество выброшенной массы золота  $m_{\rm ei} \approx (1.5-3) \times$ 10<sup>-4</sup> г/см<sup>2</sup> примерно одинаково в обоих случаях. Выброшенная масса образует слой, отделенный зазором от остальной части объемной золотой мишени до стадии  $\sim 10^2$  нс. Слой контактирует с водой. Скорость слоя падает до очень малых значений  $\sim 1-10$  м/с на стадии  $\sim 10^2$  нс, см. 5.1.4 [150, (O1:5:27)]. Судьба слоя на поздних стадиях ≥ мкс неизвестна. Зазор заполняется насыщенным паром золота и имеет давление  $\sim 10^2 - 10^3$  бар, пока золото имеет температуру выше  $\approx 5 \text{ кK } 5.1.4 \ [150, (O1:5:27)]$ . В то время как давление в жидкой, а затем и в газообразной воде составляет  $\sim 10^2 - 10^3$  бар на стадии нескольких микросекунд. Таким образом, слой золота может двигаться назад под давлением воды и закрывать зазор, если слой охлаждается ниже нескольких кК. Слой может слипаться с основным золотом, если золото в слое остается жидким во время уменьшения зазора. Изменение скорости  $\Delta v$  слоя под действием разности давлений  $\Delta p$ , действующей на слой со стороны его внутренней (пары Au в зазоре) и внешней (КГ, вода) границ, велико  $\Delta v = \Delta p \, t_{\mu s}/m_{
m ej} \sim 3$  км/с для  $\Delta p = 10^2$  бар,  $m_{
m ej} = 3 imes 10^{-4}$  г/см $^2$ , и  $t_{\mu s} \sim 1$  мксs. Такие скорости легко могут закрыть зазор за время ~ мкс, поскольку толщина зазора составляет ~ мкм. Эта проблема, очевидно, требует отдельного рассмотрения.

#### 5.3 Воздействие субнаносекундного импульса

При нагреве металла сквозь жидкость при увеличении энергии в импульсе требуется также увеличение длительности импульса, чтобы интенсивность излучения не превысила порог пробоя жидкости.

Ниже рассматривается испарение золота в воду при воздействии лазерного импульса  $F_{\rm abs} = 900 \text{ мДж/см}^2$ ,  $\tau_{\rm L} = 0.5 \text{ пс.}$  Как и в предыдущих случаях расчет начинается при  $t_{\rm ini} = -3\tau = -1,5$  нс. В этот момент золото находится справа от плоскости x = 0, а вода – слева, температура воды и золота комнатная  $T_{\rm ini} = T_{\rm rt} = 293$  K.

В своем развитии процесс проходит несколько стадий. При этом надо отметить, что при больших длительностях лазерного импульса принципиально меняется ход процесса.

- Первая стадия I, на которой происходит нагрев твердого металла. При длительности импульса  $\tau_{\rm L} = 0.5$  нс двухтемпературного сверхзвукового заброса тепла из скин—слоя вглубь золота не происходит что естественно, поскольку в этом случае длительность импульса  $\tau_{\rm L} > t_{\rm s} = d_{\rm T}/c_{\rm s}$  акустического масштаба  $\approx 50$  пс, не происходит отрыва приповерхностного слоя, торможение которого водой создает условие для возникновения неустойчивости Рэлея—Тейлора, развитие которой приводит к образованию наночастиц, как это было рассмотрено выше 5.1.3 (см. [150, (O1:5:27)]). Эта стадия заканчивается, когда начинается плавление металла.
- Затем следует стадия II, на которой слой расплава расширяется, а его температура при контакте с водой повышается. При этом в отличие от случая воздействия ультракоротких лазерных импульсов, когда происходило гомогенное плавление по мере подтягивания ионной температуры к электронной (см. 1.3.1, 5.1.1), по мере нагрева происходит движение фронта плавления вглубь золота. В конце II стадии температура металла на контакте достигает критической температуры золота.
- На стадии III вблизи контакта начинает возникать слой газообразного металла вблизи контакта.



Рисунок 5.25 — [147, (O1:5:32), рис. 2] Ситуация на стадии I — до плавления.

 Стадия IV относится к концу импульса нагрева. На этой стадии в профиле давления начинает образовываться глубокий провал. Этот провал находится в области контакта.

Появление провала связано с прекращением нагрева области контакта и расхождением в направлении акустического возмущения, сформированного при воздействии лазерного импульса.

## 5.3.1 Нагрев, расширение и акустическое излучение: роль плавления [147, (O1:5:32), §3]

На рисунке 5.25 показаны мгновенные профили температуры и давления незадолго до окончания стадии I — лазер нагревает металл, но температура металла остается ниже температуры плавления, для золота  $T_{\rm m} = 1337$  K. Толщина нагретого слоя металла (на полувысоте)  $d_T = 0,1$  мкм. Профиль давления на рисунке 5.25 имеет плавные пространственные крылья слева в воде и справа в золоте. Это акустические возмущения, связанные с левым крылом временной оси временного профиля лазерного импульса  $I \propto \exp(-t^2/\tau_{\rm L}^2)$ , на котором интенсивность растет со временем. Возмущения распространяются по характеристикам со скоростью звука в воде и золоте от нагреваемого слоя золота.

Контактная граница достигает температуры плавления  $T_{\rm m}$  в момент времени  $t \approx -0.6$  нс, см. рисунок 5.26 и рисунок 5.27, где для лучшего понимания фазовая диаграмма золота. В момент образования жидкой фазы на профиле



Рисунок 5.26 — Начало II стадии со слоем расплава. Профили температуры и давления вблизи КГ [147, (O1:5:32), рис. 3] слева и профили плотности и давления [147, (O1:5:32, рис. 6]) справа. Температура контакта  $T_{\rm cb} = 1347$  К на 5 градусов превысила температуру плавления  $T_{\rm m}(p)$  золота при давлении 943 бар в области контактной границы (cb). Зубец на рисунке слева на шкале x на рисунке справа представляет собой очень узкий всплеск при  $x \approx 0$ .



Рисунок 5.27 — [147, (O1:5:32), рис. 4, 5] Кривая плавления  $p_{\rm m}(T)$  ( $T_{\rm m}(p)$ ) и зависимость давления насыщенных паров от температуры  $p_{\rm sat}(T)$  в золоте. Зависимость  $p_{\rm sat}(T)$  заканчивается в критической точке с параметрами 7800 K, 5300 бар и 5,3 г/см<sup>3</sup>. Справа ( [147, (O1:5:32), рис. 4]) показан небольшой участок кривой плавления на плоскости T,p вблизи тройной точки, отмеченный маркером 3. Давление пара в тройной точке пренебрежимо мало  $p_{\rm sat}(T = 1337 \text{ K}) = 4,3 \times 10^{-8}$  бар. Температура кипения составляет  $p_{\rm sat}(T = 3243 \text{ K}) = 1$  бар. Амплитуда давления на зубце, взятая из рисунка 5.26, показана линиями 2. Контактная температура в момент времени t = -0,6 пs  $T_{\rm cb} = 1347$  K на рисунке слева отмечена вертикальной линией 1. Температура  $T_{\rm cb} = 1347$  K на 5 градусов выше температуры плавления  $T_{\rm m}(p = 943 \text{ bar}) = 1342$  K. Давление 943 бар соответствует среднему давлению между горизонтальными линиями 2.

давления *p* на рисунке 5.26 вблизи области контакта формируется зубец. Образование зубца вязано с появлением жидкой фазы и с используемой разностной схемой. Вне зубца профиль давления остается гладким, см. рисунок 5.26 справа. Аналогичная особенность с повышением профиля из—за начала плавления наблюдалась ранее в работах [91, рис 6 и 7], [182, см. рис 2 и 3] (отпечаток плавления в профиле простой римановой волны), [183]. Все эти статьи посвящены ультракоротким лазерным импульсам, когда нагрев происходит изохорно. Тогда участок плавления между солидусом и ликвидусом отпечатывается в профилях температуры и давления. Затем этот участок начинает перемещаться по акустическим характеристикам. Акустические возмущения (простые римановы волны, убегающие в воду и в золото) вне зубца давления являются гладкими функциями координат. На стадии I профиль *p* везде гладкий — зубцов нигде нет.

В работе [166] также наблюдалось усиление риманова профиля простой волны, которое (усиление) излучается из фронта плавления при переходе зоны плавления со сверхзвукового на дозвуковое распространение. Если работы [91;182;183] основаны на гидродинамическом коде, то в [166] используется молекулярная динамика (MD). В MD плавление происходит как в реальности. То есть MD автоматически учитывает возможные реальные эффекты неравновесности плавления; в гидродинамическом моделировании неравновесности нет, используется равновесное уравнение состояния. В профилях давления MD участок плавления сглаживается, но остается заметным.

На рисунке 5.28 показаны профили плотности, температуры и давления в момент времени t = -0,2 нс, соответствующем середине стадии II. Продолжается сильный нагрев золота лазером в нагреваемом слое  $d_T$ . В показанный на рисунке 5.28 момент t = -0,2 нс золото поглотило 29% энергии лазерного импульса, т.е. 29% от 0,9 Дж/см<sup>2</sup>, температура у КГ составляет 6,35 кК, толщина расплава — четверть микрона. Из-за нагрева давление со временем увеличивается, и профиль давления выглядит как бугор с максимумом немного правее слоя нагрева, ср. с рисунком 5.25. На правом и левом акустических крыльях хорошо виден след от начала плавления. Указанный след (или отпечаток), как уже говорилось выше для ультракоротких импульсов, имеет вид участка с более крутым ходом давления. На профиле давления хорошо видны два крутых участка с высокими градиентами давления. Они находятся при x = -0,6 мкм и x = 1,2 мкм. За этими участками профиль p плавно спадает наружу от контакта. Внешние участки — это акустические волны, излучаемые нагревательным слоем на ста-



Рисунок 5.28 — [147, (O1:5:32), рис. 7] Середина II стадии (стадии плавления): t = -0.2 нс. Фронт плавления отмечен вертикалью m.

дии I (т.е. до плавления). Опрокидывание простых римановых волн на крутых участках из—за особенностей фокусировки приводит к зарождению на этих участках ударных волн. Фокусировка обусловлена нелинейными эффектами в простых волнах. Опрокидывание происходит позже по времени относительно момента времени t = -0.2 нс, показанного на этом рисунке.

Градиент температуры выше в жидкой фазе, см. рисунок 5.28. Этот эффект определяется двумя факторами. Во—первых, на этой стадии происходит плавление. То есть расплавляются все новые и новые порции твердого золота. Чтобы покрыть затраты, связанные со скрытой теплотой плавления Q, необходимо, чтобы тепловой поток  $q_{\rm l}$  к фронту плавления превышал тепловой поток  $q_{\rm s}$  от фронта:  $q_{\rm l} - q_{\rm s} = Q \rho_{\rm s} v_{\rm m}$ , где Q— теплота плавления на единицу массы. Во—вторых, коэффициент теплопроводности примерно в 2—2,5 раза ниже в жидкой фазе; модель теплопроводности, используемая в расчетах, учитывает изменение теплопроводности при плавлении.

Под воздействием импульса температура золота повышается. Поэтому точка 3 поднимается все выше и выше по кривой кипения. Однако испарения золота не происходит, так как давление выше давления насыщенного пара, см. рисунок 5.27. Испарение начнется, когда точка 3 достигнет критической точки. Этому вопросу посвящен следующий раздел работы. Самой горячей является точка 3, находящаяся в контакте с водой. Давление в этой точке выше критического давления золота. Пересечение этого коридора с мгновенным профилем распределений плотности и давления соответствует сегменту 2 на ри-

170



Рисунок 5.29 — Состояние вещества на фазовой диаграмме в момент времени -0,2 нс на плоскости ( $\rho$ ,T) [147, (O1:5:32), рис. 10] слева и на плоскости ( $\rho$ ,p) [147, (O1:5:32), рис. 11] справа. Вместе с кривыми фазового равновесия построены профили плотности и температуры в момент t = -0.2 нс в параметрической форме:  $\rho(x,), T(x)$ . Параметром, проходящим через профиль, является координата x. Точки 1—6 относятся к (см. рис. 5.28): 1— невозмущенное золото в глубине мишени, 2— фронт плавления, повторяющий скачок плотности в тройной точке, 3— максимальная температура при контакте с водой, 3—4— скачок плотности от золота к воде, 4— горячая вода рядом с контактом, 4–5 профиль температуры в воде, 6-вода вдали от контакта. Буквами s (solidus) и l (liquidus) обозначены кривые плавления, граничащие с коридором существования смеси твердой и жидкой фаз золота. Разумеется, состояния воды не имеют значения для кривой конденсации золота.

сунке слева. Давление при пересечении фронта плавления резко уменьшается, ср. с рисунком 5.28

В случае длинных импульсов результирующее давление невелико (по сравнению с модулем объемной упругости металла). Поэтому вещество располагается вдоль кривой кипения (правой ветвью бинодали — кривой сосуществования фаз) в соответствии с распределением температуры в золоте. То есть расширение вещества происходит в основном за счет тепла. Имеющееся давление мало влияет на плотность (в смысле отклонения от кривой кипения).

Видно, что на показанный на рисунке 5.29 момент времени t = -0.2 нс все золото (точки 1—2—3) все еще находится справа от критической плотности золота 5,3 г/см<sup>3</sup>. Для того чтобы превысить критическую температуру (см. рисунок

5.29 слева) и снизить плотность ниже критического значения (см. рисунок 5.29 справа), необходим дополнительный нагрев.

## 5.3.2 Превышение критической температуры золота, появление контактного слоя газообразного золота [147, (O1:5:32), §4]

Со временем температура металла вблизи контакта повышается под действием лазера. Как уже говорилось выше, процесс в своем развитии проходит несколько стадий: стадия I заканчивается началом плавления; II стадия завершается с достижением критической температуры металла. На стадии III к контакту металла с водой примыкают три слоя. С переходом от стадии III к стадии III начинается формирование слоя золота в газообразном состоянии. Таким образом, на стадии III вблизи контакта располагается слой газообразного золота, затем следует слой расплава, а после этого появляется твердая фаза.

На рисунках 5.30, 5.31 показана ситуация в момент времени t = 0. Начинается III стадия: температура контакта превышает критическую температуру золота  $T_{\rm cr} = 7,8$  кК, а плотность падает ниже критического значения  $\rho_{\rm cr} = 5,3$  г/см<sup>3</sup>. А вот давление примерно в 4 раза превышает критическое значение  $p_{\rm cr} = 0,53$  ГПа. Как известно, диапазон плотностей  $\rho < \rho_{\rm cr}$  связан с газовой фазой. При плотности  $\rho > \rho_{\rm cr}$  предполагается, что вещество находится в жидкой фазе. Разумеется, выше критической точки такое разделение условно — вещество является газоподобным — сверхкритическим флюидом. Хотя в случае, показанном на рисунках 5.30, 5.31, давление золота в слое газа между границами 2 и 3 на рисунках справа близко к давлению, определяемому по формуле для идеального газа  $p = nk_BT$  для плотности и температуры в этом слое. Согласно использованным в расчетах уравнениям состояния золота [51; 54; 56; 59; 76], коэффициент сжимаемости  $p/(nk_BT)$  равен 0.3 в критической точке.

К моменту времени t = 0 золото поглотило половину энергии  $F_{\rm abs}$  импульса. Из рисунков 5.30, 5.31 следует, что газоподобный слой золота 2—3 формируется в момент  $t \approx 0$ . Совпадение с максимумом импульса  $\tau_{\rm L} = 0,5$  нс,  $F_{\rm abs} = 900$  Дж/см<sup>2</sup> случайное. Действительно, если бы энергия  $F_{\rm abs}$  была несколько меньше — нагрев приповерхностного слоя продолжается после максимума импульса пока поглощение энергии лазерного излучения превышает



0

х, мкм

2

-200

-100

0

100

х, нм

200

300

400

Рисунок 5.30 — [147, (O1:5:32), рис. 12, 13] Профили плотности, температуры и давления в момент времени t = 0. Справа структура контактной зоны показана подробнее ([147, (O1:5:32), рис. 13]). Момент t = 0 близок к моментам опрокидывания простых волн в воде и золоте: крутые участки на профиле давления близки к вертикальным отрезкам в точках перегиба. К моменту времени t = 0 золото поглотило половину энергии  $F_{\rm abs}/2$  падающего импульса  $I(t) = I_0 \exp(-t^2/\tau_{\rm L}^2)$ . При t > 0 интенсивность I(t) уменьшается по сравнению с максимальным значением  $I_0$ . Полосы 1, 2, 3 и 4 обозначают границы слоев. Слева от 1 находится холодная плотная вода. Между границами 1 и 2 находится слой горячей частично диссоциированной воды, 2 — контакт вода—золото. Слой 2—3 представляет собой газообразное золото. Слой 3—4 занимает жидкая фаза, 4 — фронт плавления, он движется относительно вещества вправо. Справа от 4 находится твердая фаза.

отток энергии из—за теплопроводности, то достижение газоподобного состояния происходило бы на спаде после максимума импульса  $I \propto \exp(-t^2/\tau_{\rm L}^2)$ , если больше — то до максимума.

Стоит подчеркнуть, что находящейся в газоподобном состоянии слой 2—3 на рисунках 5.30, 5.31 лежит около критической точки сверху. То есть слой 2—3 образуется не в результате испарения нагретого конденсиованного вещества, а в результате непрерывного роста температуры на температурном профиле T(x,t)золота за время t во время действия лазерного импульса:  $T(x^0, t_2) > T(x^0, t_1)$ , если  $t_2 > t_1$ , здесь  $x^{0-}$  координата Лагранжа, пересекая критическую температуру  $T_{\rm cr}$ . Давление в области 1—2—3 на рисунках 5.30, 5.31 выше давления насыщенного пара  $p_{\rm sat}(T)$ . Это давление выше максимального значения, которое может иметь функция  $p_{\rm sat}(T)$ , т.е. выше критического давления  $p_{\rm cr}$ , см. рисунки 5.27 и 5.31 справа. На фазовой плоскости  $\rho, T$  этот профиль располо-



Рисунок 5.31 — Температурный профиль  $T(\rho)$  на фазовой плоскости  $\rho$ , T ([147, (O1:5:32), рис. 14] слева) и профиль давления  $p(\rho)$  на фазовой плоскости  $\rho$ , p( [147, (O1:5:32), рис. 15] справа) в момент времени t = 0. Постепенный нагрев лазером приводит к тому, что температура на профиле  $T(\rho)$  к моменту t=0поднимается выше критического значения  $T_{\rm cr}=7.8\,$  кК. Единый (для воды и Au) профиль  $T(\rho)$  делится на два фрагмента 1—2—3 (Au) и 4—5—6 (вода). Скачок плотности 3-4 относится к границе контакта, ср. с рисунком 5.29, где показан единый профиль. Плотности Au и воды на контакте составляют 4,35 и 0,25 г/см<sup>3</sup>. Кривые s (солидус) и l (ликвидус) продолжаются через тройную точку в метастабильную область [51; 54; 56; 59; 76]. Точка 1 соответствует золоту на большом расстоянии от контакта, где температура равна комнатной 293 К. За время, прошедшее с предыдущей временной точки t = -0.2 нс, см. рисунок 5.29, давление значительно возросло. Максимальное давление наблюдается в твердой фазе за фронтом плавления. Смысл чисел 1-6 тот же, что и на рисунках 5.29 и 5.31. Профиль 1—2—3, который находился чуть выше кривой кипения на рисунке 5.29, здесь находится далеко от кривой кипения. Это объясняется низкой сжимаемостью конденсированной фазы.



Рисунок 5.32 — Температура (слева) и давление (справа) [184, (О1:5:29), рис. 2] на поверхности контакта золотой пленки с водой. На рисунке справа штриховыми линиями показаны критическое давление  $p_{\rm cr} = p(\rho_{\rm cr}, T_{\rm cr})$  золота и воды.

жен вдоль кривой плавления, см. рисунки 5.29 и 5.31. Мгновенному профилю  $T(x,t), \rho(x,t)$  на рисунках 5.29 и 5.31 соответствуют точки: 1 (состояние далеко в объеме) — 2 (фронт плавления) — 3 (контакт).

Из—за повышения температуры на контакте верхняя точка 3 профиля  $T(x,t), \rho(x,t)$  перемещается вверх вдоль кривой плавления, ср. рисунки 5.31 и 5.29, достигает критического значения  $T_{\rm cr} = 7.8$  кK, а затем (при продолжении нагрева) начинает превышать это значение, если вкладываемая энергия  $F_{\rm abs}$  достаточно велика. Температурный профиль  $T(\rho;t)$  на рисунке 5.31 проходит немного выше кривой кипения, поскольку давление выше, чем  $p_{\rm sat}(T)$ .

Пусть в результате испарения этой жидкости над жидкой фазой образуется насыщенный пар. Тогда на фазовой плоскости  $\rho$ , T существуют два состояния: одно — на кривой кипения, другое — на кривой конденсации. Давление в системе пар—жидкость равно давлению насыщенного пара  $p_{sat}(T)$ , см. рисунок 5.27. В рассматриваемой ситуации, как сказано, испарительное образование слоя чистого пара золота (без воды) невозможно до тех пор, пока не будет выполнено условие  $p > p_{sat}(T)$ .

# 5.3.3 Формирование слоя паров воды и золота вблизи поверхности контакта

Температура на поверхности границы золотой пленки с водой растет при поглощении лазерного импульса, достигая величин, не только значительно превосходящих критическую температуру воды, но, при воздействии с большой энергией (и большой длительностью, чтобы не было пробоя в воде), превышающих критическую температуры золота (см. рис. 5.32). Как видно из рисунка 5.33 в результате продолжающегося расширения возникает широкая приконтактная область сверхкритического пара воды и пара золота. При этом поверхностное натяжение исчезает, что создает условии для их свободной взаимной диффузии. При конденсации золота в воде образуются наночастицы золота.

Лагранжевая гидродинамика не дает возможности описывать диффузию. Молекулярно—динамический расчет (проведенный В.В. Жаховским) подтверждает возникновение таких наночастиц (см. рис. 5.34).

Получающиеся частицы имеют размеры порядка десятков нанометров — меньше, чем характерный размер частиц, возникающих в результате развития неустойчивости Рэлея—Тейлора.

Наночастицы образуются только из золота, продиффундировавшего в воду, пока золото у границы с водой не сконденсировалось. Оценить массу золота в диффузном слое можно следующим образом. Длина свободного пробега равна  $l = 1/(n\sigma)$ , где сечение  $\sigma = \pi (r_{Au} + r_{wt})^2$ . Согласно справочным данным  $r_{Au} = 0.17$  нм,  $r_{H_2O} = 0.15$  нм,  $r_H = 0.12$  нм,  $r_{O_2} = 0.15$  нм. Концентрацию молекул и атомов воды (температуры в горячем слое достаточно велики для частичной диссоциации молекул воды) оценивается по плотности, которая, согласно расчетам, в горячем слое составляет примерно  $0.05 \text{ г/см}^3$ , см. рис. 5.33. Подставляя тепловую скорость  $v_T$  при температурах в приконтактном слое, получаем  $D = (1/3)lv_T \approx 3 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$ . Время, в течение которого золото в приповерхностном слое находится в газоподобном состоянии составляет, в рассматриваемом случае,  $t_{\text{diff}} \approx 3$  нс. Толщина слоя диффузии, сформировавшегося за это время,  $d_{\text{diff}} = 2\sqrt{Dt_{\text{diff}}} \approx 60$  нм. При плотности флюида золота вблизи границы сb на этом промежутке времени  $1-2 \text{ г/см}^3$  (см. рис. 5.33) выход наночастиц получается  $10^{-5} \text{ г/см}^2$ . Если принять средний размер



Рисунок 5.33 — [161, (О1:5:35), рис. 1] Профили плотности, давления и скорости при  $F_{\rm abs} = 0.9 \ \text{Дж/см}^2$ ,  $\tau_{\rm L} = 0.5 \ \text{нc.}$  (а) — Профили плотности и давления в моменты t = 0.3, 0.4 и 1 нс. (b) — Профили давления и скорости в окрестности контакта cb золота и воды при  $t = 1 \ \text{пc.}$  (c) — Скорость и плотность в окрестности контакта при t = 1 и 3 пс. Вертикаль "m" отмечает фронт плавления, ch —

граница между холодной и горячей водой (сверхкритическим паром).



Рисунок 5.34 — [180, (O1:5:31), рис. 22] Образование наночастиц золота при его конденсации в смеси золото—вода по результатам МДМ (В.В. Жаховским)

наночастиц в 5—10 нм, то выход наночастиц оказывается очень небольшим — порядка 10<sup>12</sup> HЧ/см<sup>2</sup> за одно облучение.

Как и в рассмотренных ранее случаях воздействия более коротких лазерных импульсов (см. 5.1, 5.2) золото возле контакта сильнейшим образом тормозится водой после начального резкого ускорения до высокой скорости расширения в воду (5.1.5 [150, (O1:5:27)]). Оказалось, что при наносекундном воздействии замедление *g* контактной границы cb золота и стекла достигают значений, сопоставимых с рассмотренными выше случаями УКЛИ ( $\tau_{\rm L}$  = 100 фс,  $F_{\rm abs} = 400$  мДж/см<sup>2</sup>, см. 5.1, 5.1.5) и мульти—пс импульса (5.2).

Поле *g* существенно снижает давление на толщине атмосферы  $d_{\rm atm}$ , располагающейся между КГ с водой сb и границей а (см. рисунок 5.33b), разделяющей атмосферу, натекающую на КГ, и более глубокие слои золота, движущиеся вглубь. Понижение давления на атмосфере за счет веса вышележащих слоев составляет примерно 0.3 ГПа=3000 атм. Эта величина порядка гидростатической разницы давлений  $\rho_{\rm atm}gd_{\rm atm}$  на атмосфере, где  $\rho_{\rm atm}$  — плотность горячего золота в атмосфере. При этом толщина  $d_{\rm atm}$  и замедление *g* таковы, что звуковой пространственный масштаб атмосферы  $h = c_{\rm s}^2/g$ , где



Рисунок 5.35 — [161, (O1:5:35), рис. 3] Движение контакта  $x_{cb}(t)$ ). Зависимость интенсивности лазерного импульса от времени показана красной кривой.

 $c_{texts}$  — скорость звука в золоте вблизи контакта cb, на порядок превосходит толщину  $d_{atm}$ . Поэтому плотность на толщине  $d_{atm}$  меняется мало.

При нагреве контакт  $x_{cb}(t)$  начинает двигаться в сторону воды, см. рисунок 5.35, ср. с рис. 5.33. После прекращения лазерного воздействия контакт поворачивает назад в момент 1.2 нс под действием давления в слое горячей воды. В момент 3.2 нс контакт останавливается. Это связано с исчезновением газовой части профиля золота — точка 3—сb на диаграмме вида рис. 5.31 уходит под кривую конденсации.

Потерянный путь (путь, потерянный по сравнению с равномерным движением без тормодения g)  $s = \int_{t1}^{t3} d\tau \int_{t1}^{\tau} g(t) dt = (\int_{t1}^{t2} + \int_{t2}^{t3}) v(\tau) d\tau$  набирается на двух участках. Первый участок связан с торможением контакта cb на промежутке времен от момента t1 до момента t2. В момент t1 = 0.07 нс достигается максимальная скорость на траектории cb и происходит перегиб траектории  $x_{cb}(t)$ , см. рис. 5.35. В момент t2 = 1.2 нс граница cb останавливается. Вклад в потерянный путь на первом участке составляет примерно 200 нм.

Второй участок t2 < t < t3— это участок движения контакта назад, t3 = 3.2 нс, см. рис. 5.35. Ускорение g(t) определяется инерцией вытесняемой воды и давлением в расширяющемся слое ch—cb горячей воды, см. рис. 5.33. Величина g на втором участке меньше, чем на первом участке, зато действие более продолжительное. В результате вклад в потерянный путь на втором участке также составляет примерно 200 нм.

На обоих участках эффективное ускорение свободного падения q (вес) в неинерциальной системе координат, связанной с контактом cb, направлено от тяжелого (золото) к легкому (вода). Соответственно на этих участках граница cb неустойчива по Релею—Тейлору [150; 156; 160, (O1:5:35)]. В отсутствие стабилизирующих факторов (поверхностное натяжение, вязкость, диффузия) толщина гидродинамически перемешанного слоя (за счет неустойчивости) составит 5—10% от пути s, т.е. 20-40 нм [150, (O1:5:27)], см. 5.1.5. Эта толщина порядка толщины слоя смешения за счет диффузии, см. выше, начаало этого раздела. Поэтому в случае с наносекундным импульсом нет формирования крупных наночастиц за счет неустойчивости, как в случае фемтосекундного импульса, рассмотренном выше 5.1, 5.1.5 [150; 156; 160, (О1:5:35)]. В фемтосекундном случае такие наночастицы имеются 5.1, 5.1.5 [150; 156; 160, (О1:5:35)]. В случае наносекундного импульса поверхностное натяжение появляется после момента времени 3.2 нс, когда исчезает газоподобный участок профиля золота. Но торможение/ускорение границы сb прекращается как раз в этот момент, см. рис. 5.35. Напротив в случае коротких импульсов благодаря большому давлению в результате прижимающего действия атмосферы (см. рис. 5.32) слоя испаренного золота у границы с водой не возникает, наночастицы образуются только за счет развиния НРТ. Их диаметр определяется капиллярным масштабом и составляет несколько десятков нм.

В результате проведенного рассмотрения лазерной абляции золота в воду:

- Впервые корректно объяснено образование наночастиц золота в воде в результате развития неустойчивости Рэлея—Тейлора на границе воды и оторвавшегося слоя золота, возникающей вследствие торможения контакта водой (5.1.5 — в случае коротких лазерных импульсов).
- Показано образование наночастиц золота в воде при конденсации золота, продиффундировавшего в воду при контакте пара (сверхкритического) воды и испаренного золота (5.3.3 — при длинных импульсах)

### Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

**Целью** данной работы являлось изучить (на масштабах сплошной среды: термо– гидродинамики) процессы, происходящие в веществе твердых мишеней (металлических, диэлектрических) при воздействии ультракоротких (фемто- пикосекундного диапазона) лазерных импульсов.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить **следую**щие задачи:

- 1. Разработать физическую модель и соответствующую расчетную схему 2*T*—гидродинамики (2*T*ГД).
- 2. Разработать расширение 2*T*ГД с учетом возбуждения электронов в диэлектрике под действием импульсов рентгеновского диапазона.
- 3. Разработать расширение 2*T*ГД с учетом сдвиговой упругости твердых веществ.
- 4. Разработать расширение 2*T*ГД при наличии слоев веществ с существенно разными физическими свойствами.

Поставленные цели в работе выполнены:

На основе двухтемпературной модели, предложенной С.И. Анисимовым и др. [3] и лагранжевой гидродинамики [65, глава VIII, §2] разработана модель и расчетная схема 2*T*—гидродинамики [67; 82, (O1:1: 3, O1:1: 8)].

Разработанная схема позволила впервые корректно описать 2*T* эффекты в конденсированном веществе мишеней.

В частности проанализировано принципиальное отличие гомогенного плавления в широкой области по мере постепенного подтягивания ионной температуры к электронной от движения фронта плавления (задачи Стефана) в однотемпературном случае (см. 1.3.1).

2. Молекулярно—динамическое (МД) моделирование, стартующее с состояния, полученного в 2*T*ГД расчете, или 2*T*ГД расчет с использованием впервые предложенного варианта критерия разрыва (1.52) дает правильное описание процесса откольной абляции. Получаемые порог абляции, момент отрыва, толщина отрывающегося слоя и его скорость точно соответствуют экспериментальным результатам.
- 3. При учете радиального распределения интенсивности лазерного излучения — падения интенсивности излучения от центра к периферии лазерного пятна — отлетающий слой имеет вид полупрозрачного купола, опирающегося на практически плоское основание, что соответствует схеме в опытах Ньютона (с перевернутой линзой). Это позволило впервые объяснить наблюдающиеся при лазерной абляции «кольца Ньютона» в микрофотографиях отраженного зондирующего импульса (см. 1.4.2).
- 4. При воздействии на прозрачные диэлектрики ультракоротких (пикофемтосекундного диапазона) рентгеновских (ультрафиолетовых) импульсов необходимо схему двухтемпературной гидродинамики, рассмотренную выше для металлов, дополнить уравнением для дополнительной термодинамической переменной—плотности числа электронов в зоне проводимости (степенью ионизации).

Использование такой дополненной схемы 2 впервые позволило корректно описать происходящую при этом термомеханическую абляцию диэлектриков, в частности значительное снижение порога абляции по сравнению с наблюдаемым для более длительных импульсов (микросекундных и длиннее).

5. В динамике твердых тел существенную роль играет сдвиговая упругость. Без ее учета качественная картина движения сохраняется, но скорости получаются неправильными (заниженными) [115, (O1:3:14)]. Разработанная модель с включением сдвиговой упругости 3.1 позволяет (впервые) получить результаты, полностью соответствующие МД моделированию и экспериментам 3.2.

В том числе показано, что вещество в короткой треугольной ударной волне (УВ) остается упругим (скорость УВ соответствует упругому веществу) несмотря на значительное превышение классического порога упругости.

- Разработанное расширение модели и расчетной схемы 4.1 позволило впервые описать воздействие ультракоротких лазерных импульсов на мишени, состоящие из двух (пленка на подложке) и более (наноламинаты) слоев веществ с существенно различными свойствами.
- 7. Прослежен переход от колебаний пленки на подложке (при  $F_{\rm abs} < F_{\rm del}$ ) 4.2.1 к отслоению пленки и к разрыву в пленке 4.2.2.

Полученные результаты хорошо соответствуют экспериментальным данным.

 Впервые теоретически исследовано поведение наноламината 4.3 из чередующихся тонких слоев никеля и алюминия. Показано, что существует порог разрыва в первом слое никеля 4.3.4,

а следующий порог соответствует разрыву в первом слое алюминия вблизи границы с первым слоем никеля 4.3.5. Полученные пороги соответствуют наблюдаемым в эксперименте порогам разрыва в слое никеля и вблизи границы первых слоев никеля и алюминия.

9. Проведено исследование лазерной абляции в жидкость 5 (на примере абляции золота в воду) в широком диапазоне длительностей лазерных импульсов от фемто- (5.1) до наносекундного диапазона (5.1). Впервые корректно объяснено образование наночастиц золота в воде в результате развития неустойчивости Рэлея—Тейлора на границе воды и оторвавшегося слоя золота, возникающей вследствие торможения контакта водой (5.1.5 — в случае коротких лазерных импульсов) и при конденсации золота, продиффундировавшего в воду при контакте сверхкритических воды и золота (5.3.3 — при длинных импульсах)

Таким образом разработанная теорфизическая модель и расчётная схема двухтемпературной гидродинамики доказала свою эффективность при описании воздействия ультракоротких лазерных импульсов на твердые мишени. Разработанная схема с  $2T\Gamma Д$ —расчетом начальной 2T—стадии с последующим МД—моделированием, использующем результаты  $2T\Gamma Д$  как начальное (или граничное) условие, или с использованием в гидродинамике критерия разрыва (1.52) дает достаточно точное описание развития процессов на больших временах.

Разработанная схема 2*T*ГД используется во ВНИИА им. Духова (Росатом), ИАП РАН (МИАН). Подобная (несколько другая) схема 2*T*—гидродинамики используется в ОИВТ РАН.

Результаты 2*T*ГД—расчетов (при необходимости с последующим МД—моделированием) используются при анализе экспериментальных результатов в ОИВТ РАН, ФИЦ ПХФ и МХ РАН и др.

# Список рисунков

| 1    | Схема pump-probe эксперимента ([25], Рис. 1)  | 7  |
|------|---|----|
| 2    | Микрофотографии алюминиевой мишени после воздействия  |    |
|      | ультракороткого лазерного импульса ([25], Рис. 3)   | 9  |
| 1.1  | Изохора золта при нормальной плотности по широкозонному УРС   |    |
|      | и по уравнению Ми—Грюнайзена  | 32 |
| 1.2  | Изменение $2T$ коэффициента теплопроводности золота   | 36 |
| 1.3  | Зависимость коэффициента электрон—ионного теплообмена $lpha$ от   |    |
|      | электронной температуры   | 39 |
| 1.4  | Профили электронной температуры $T_{ m e}(x)$ в алюминии  | 43 |
| 1.5  | $\Phi$ ормирование прогретого слоя (Al, $F_{ m abs}=60$ мДж/см $^2$ )   | 43 |
| 1.6  | Профили электронной $T_{ m e}$ и ионной $T_{ m i}$ температур и электронного  |    |
|      | $P_{ m e}$ , ионного $P_{ m i}$ и полного $p=P_{ m e}+P_{ m i}$ на $2T$ стадии  | 44 |
| 1.7  | Полное $(p = P_{\rm e} + P_{\rm i})$ , электронное $(P_{\rm e})$ и ионное $(P_{\rm i})$ давление                      | 45 |
| 1.8  | Траектория физического состояния лагранжевой ячейки на  |    |
|      | плоскости $({f  ho}, T_{ m i})$ при «холодном» испарении  | 46 |
| 1.9  | Температуры в области плавления вещества на $2T$ стадии $\ldots$ .  | 48 |
| 1.10 | Температуры, давление и плотность в области плавления вещества  |    |
|      | на временах, когда волна сжатия обгоняет тепловую   | 49 |
| 1.11 | Давление в волне сжатия—растяжения  | 51 |
| 1.12 | $\Phi$ ормирование волны растяжения (Al, $F_{ m abs}=60~{ m mJ/cm^2})$  | 51 |
| 1.13 | Полное и электронное давление в золоте  | 52 |
| 1.14 | Полученный в результате МД—моделирования профиль плотности .  | 53 |
| 1.15 | Критическое давление разрыва в золоте   | 57 |
| 1.16 | Профили давления $p$ , температуры $T$ и плотности $ ho$ перед  |    |
|      | (t = 18.4  nc) и после разрыва $(t = 18.5$ и 19 пс)   | 59 |
| 1.17 | Формирование волны растяжения и разрыв  |    |
|      | $(F_{\rm abs}=70~{ m M}{ m /cm^2}>F_{\rm abl}$  | 59 |
| 1.18 | Динамика давления и плотности при воздействии надкритического   |    |
|      | излучения $F_{ m abs}=70 m M Д  m {\ensuremath{{ m M}}/cm^2}>F_{ m abl}$ на алюминий $\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$ | 59 |
| 1.19 | Профили плотности и давления после формирования   |    |
|      | оторвавшегося слоя  | 60 |
| 1.20 | Формирование волны растяжения и разрывы при воздействии   |    |
|      | излучения $F_{ m abs}=80{ m M}{ m /cm^2}$ на алюминий $\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$                          | 60 |

| 1.21 | Карта плотности в МД моделировании  | 60 |
|------|---|----|
| 1.22 | Траектории физического состояния $(T, {f  ho})$ в лагранжевых ячейках                           |    |
|      | на фоне фазовой диаграммы на плоскости $ ho-T$  | 61 |
| 1.23 | Динамика давления и плотности при воздействии излучения с                                       |    |
|      | энергией, превышающей критическую ( $F_{ m abs}=80$ мДж/см $^2,$                                |    |
|      | алюминий)   | 61 |
| 1.24 | Динамика давления и плотности при воздействии излучения с                                       |    |
|      | энергией, заметно превышающей критическую   |    |
|      | $(F_{ m abs}=100$ мДж/см $^2$ , алюминий) $\ldots$  | 62 |
| 1.25 | Динамика давления и плотности при превышении порога   |    |
|      | существования откольной пластины $F_{ m ev}~(F_{ m abs}=200~{ m sd}{ m M}{ m /cm}^2>F_{ m ev},$ |    |
|      | алюминий)   | 63 |
| 1.26 | Зависимость положения передней (front) и задней (layer 1 back)                                  |    |
|      | поверхностей внешнего отлетающего слоя (откольной пластины) и                                   |    |
|      | оставшегося вещества (crater bottom) в декартовых и лагранжевых                                 |    |
|      | переменных от поглощенной энергии   | 64 |
| 1.27 | Откольный купол при $t=30,50$ и 100 пс в предположении  |    |
|      | гауссовой зависимости интенсивности излучения от радиуса  | 65 |
| 1.28 | Карты плотности, полученные в серии МД расчетов с различными                                    |    |
|      | начальными температурами  | 65 |
| 1.29 | Форма купола на основе МД расчетов, показанных на рис. 1.28 $$                                  | 65 |
| 1.30 | Сравнение экспериментальной и расчетных интенферограмм  | 66 |
| 2.1  | Увеличенное в 40 раз изображение пятна фокусировки пучка XRL,                                   |    |
|      | полученное на поверхности кристалла LiF   | 69 |
| 2.2  | «Холодные кривые» и ударные адиабаты для LiFu Al  | 73 |
| 2.3  | Зависимость коэффициента электрон—ионного теплообмена $lpha$ от                                 |    |
|      | электронной температуры $T_{ m e}$ при равновесной степени ионизации                            |    |
|      | $Z(T_{ m e})$   | 74 |
| 2.4  | Нагрев LiF при воздействии импульса EUV-FEL–лазера  | 76 |
| 2.5  | Электронное $P_{\rm e}$ , ионное $P_{\rm i}$ и полное $P=P_{\rm e}+P_{\rm i}$ давление в LiF    |    |
|      | после действия импульса EUV—FEL—лазера с интенсивностью   |    |
|      | вблизи порога абляции ( $	au_{ m L}=800~{ m cc},~F=10~{ m sd}{ m M}/{ m cm}^2$ )                | 76 |

| 2.6 | Формирование волны сжатия и возникновение ударной волны в                            |    |
|-----|--|----|
|     | результате обрушения волны сжатия после действия импульса                            |    |
|     | EUV—FEL—лазера с интенсивностью вблизи порога абляции                                |    |
|     | $(	au_{ m L}=800~{ m dc},~F=10~{ m M}{ m Д}{ m w}/{ m cm}^2)$                        | 77 |
| 2.7 | Формирование акустического возмущения и ударной волны после                          |    |
|     | действия сильного импульса EUV—FEL—лазера ( $	au_{ m L}=800~{ m cc},$                |    |
|     | $F=180$ мДж/см $^2$ )  | 77 |
| 2.8 | Зависимости максимального растягивающего напряжения $ p_{ m neg} _{ m max}$          |    |
|     | от лагранжевой координаты $x^0$  | 79 |
| 3.1 | Сопоставление теории с экспериментом. Смещение тыльных                               |    |
|     | поверхностей алюминиевых пленок толщиной 350 и 1200 нм                               | 81 |
| 3.2 | (a) Распределения температуры и энергии в конце нагрева с                            |    |
|     | помощью короткого лазерного импульса, когда достигаются                              |    |
|     | максимальные значения электронных термодинамических                                  |    |
|     | параметров. (b) Возникновение сдвигового напряжения и его                            |    |
|     | исчезновение при плавлении. (с) Сдвиговое напряжение при                             |    |
|     | движении волны сжатия из расплава в твердое вещество                                 | 85 |
| 3.3 | Профили давления в моменты времени $t = 10$ пс и 20 пс $\ldots$                      | 88 |
| 3.4 | Выход волны на поверхность 500 нм пленки $(t=65~{ m nc})$ и волна                    |    |
|     | после отражения от поверхности $(t = 70 \text{ nc})$                                 | 88 |
| 3.5 | Профили давления и температур в момент времени $t = 90$ пс $\ldots$ .                | 89 |
| 3.6 | Временные профили смещения тыльных поверхностей 350, 500 и                           |    |
|     | 760 нм пленок  | 89 |
| 3.7 | [117, (О2:3:4), рис. 1] Сравнение упругих $(S_{ m el})$ и пластических $(S_{ m pl})$ |    |
|     | адиабат Гюгонио с экспериментом [115;123, (О1:3:14)] (кресты,                        |    |
|     | горизонтальные и вертикальные размеры крестов дают                                   |    |
|     | погрешность измерения)   | 90 |
| 3.8 | [117, (О2:3:4), рис. 2] Упругая $(S_{ m el})$ и пластическая $(S_{ m pl})$ ударные   |    |
|     | адиабаты. Соответствующий рисунку 3.7 отрезок МД $S_{ m el}$                         |    |
|     | охватывает диапазон давлений 7,4—33 ГПа. Маркерные кружки                            |    |
|     | получены с помощью МД расчетов. Нижний кружок с $P=7.4~\Gamma\Pi{ m a}$              |    |
|     | соответствует нижнему кружочку на рис. 3.7   | 91 |
| 3.9 | Упругий предвестник и пластическая волна   | 93 |
| 4.1 | Металлическая пленка на подложке   | 95 |

| 4.2  | Профили температуры и давления ко времени окончании лазерного                                    |
|------|--|
|      | импульса ( $t = \tau_{\rm L} = 40~{ m cc},~F_{ m abs} = 0.7~{ m M}{ m Д}{ m k/cm^2})$            |
| 4.3  | Колебательный режим в серебряной пленке толщиной 60 нм под                                       |
|      | действием лазерного импульса $F_{ m abs}=0.7$ мДж/см $^2$ в различные                            |
|      | моменты времени  |
| 4.4  | Колебательный режим как на рис. 4.3, при $t = 100~$ пс под                                       |
|      | действием $F_{ m abs}=0.07$ мДж/см $^2$ и под действием $0.7$ мДж/см $^2$ без                    |
|      | учета сдвиговой упругости  |
| 4.5  | Динамика скорости вещества $(v)$ , давления (полного, $P_{xx}$ ) и                               |
|      | электронной температуры (T <sub>e</sub> ) в пленке серебра, лежащей на                           |
|      | стеклянной подложке, под действием лазерного импульса  |
|      | $F_{\rm abs}=0.7~{ m m}{ m J}{ m w}/{ m cm}^2$ .   |
| 4.6  | Колебательный режим как на рис. 4.3. Электронная температура                                     |
|      | вблизи свободной поверхности в расчете с учетом упругого   |
|      | напряжения сдвига и без его учета  |
| 4.7  | Колебательный режим при воздействии $F_{\rm abs} = 10~{ m M}{ m J}{ m m}/{ m cm}^2 < F_{ m del}$ |
|      | на золотую пленку толщиной $d_{\rm f} = 60$ нм на стеклянной подложке.                           |
|      | Начальная стадия ( $t = 3, 10$ и 20 пс) и излучение акустических                                 |
|      | волн в стекло  |
| 4.8  | Затухающие колебания давления на контакте между золотом и  |
|      | стеклом  |
| 4.9  | Быстрый рост давления в пленке и движение волн расширения от                                     |
|      | контакта с вакуумом справа со стеклом слева в толще пленки 108                                   |
| 4.10 | Ситуация после прохождения фронтов волн разрежения друг через                                    |
|      | друга  |
| 4.11 | Эволюция профилей давления и скорости в окрестности момента                                      |
|      | отделения пленки от стекла   |
| 4.12 | Излучение слабых ударных волн (откольных импульсов) из точки                                     |
|      | разрыва контакта золото-стекло при отрыве пленки от подложки . 111                               |
| 4.13 | Отслоение и разрыв золотой пленки толщиной 60 нм   |
| 4.14 | Средняя скорость (скорость центра масс) пленки   |
| 4.15 | Многослойная схема — начальный профиль плотности   |
| 4.16 | Профиль кратера на поверхности образца   |
| 4.17 | Поглощенная $(	ilde{E}_{ m abs})$ и дополнительная $(	ilde{E}_{ m add})$ энергия электронов и    |
|      | электронная температура $T_{ m e}$   |

# 

| 4.18 | Профили электронной температуры при различной поглощенной                              |     |
|------|--|-----|
|      | энергии  | 121 |
| 4.19 | Профиль электронной температуры $T_{ m e},$ тепловой поток по                          |     |
|      | электронной подсистеме $q_{ m e}$ поглощенная энергия $	ilde{E}_{ m abs}$ и увеличение |     |
|      | энергии электронов $	ilde{E}_{ m add}$   | 122 |
| 4.20 | Коэффициент электронной теплопроводности к и коэффициент                               |     |
|      | электрон—ионного теплообмена <b>α</b> .  | 122 |
| 4.21 | Эволюция профилей электронной температуры $T_{ m e}$                                   | 123 |
| 4.22 | Фазовые состояния слоев  | 124 |
| 4.23 | Границы фаз  | 124 |
| 4.24 | Профили давления и температуры (ионных) перед и после разрыва                          |     |
|      | в первом слое никеля при $F_{ m abs}=40{ m M}{ m M}{ m k/cm}^2>F_{ m abl}$             | 126 |
| 4.25 | Профиль скорости в сегменте вдоль оси $x$ , на котором достигается                     |     |
|      | наибольшее растяжение  | 126 |
| 4.26 | Профили плотности в первых слоях никеля и алюминия в моменты                           |     |
|      | t = 20 пс (слева) и $t = 50$ пс (справа)   | 127 |
| 4.27 | Временные профили давления на границе первых слоев никеля и                            |     |
|      | алюминия   | 128 |
| 4.28 | Временные профили температуры (слева) и плотности (справа)                             |     |
|      | алюминия у границы с первым слоем никеля   | 129 |
| 4.29 | Профили давления, температуры и плотности в области,                                   |     |
|      | прилегающей к границе никеля и алюминия перед и после разрыва.                         | 129 |
| 5.1  | Нагрев металла через воду  | 133 |
| 5.2  | Иерархия процессов, запускаемых лазерным воздействием                                  | 134 |
| 5.3  | Ударная адиабата воды  | 136 |
| 5.4  | Теплопроводность воды по формуле (5.3)   | 138 |
| 5.5  | Кинетика электрон—ионной релаксации  | 140 |
| 5.6  | Профили плотности и полного давления   | 142 |
| 5.7  | Такая же структура, как на рис. 5.6, но на момент времени $t = 20$ пс                  | 143 |
| 5.8  | Формирование обширной зоны нуклеации при превышении порога                             |     |
|      | нуклеации по $F_{\rm abs}$ в несколько раз   | 146 |
| 5.9  | Резкое уменьшение скорости разлета при столкновении вещества                           |     |
|      | смеси пар—расплав с верхней границей атмосферы   | 147 |

| 5.10 | Структура атмосферы и УВ, которая формирует верхнюю границу   |
|------|---|
|      | атмосферы   |
| 5.11 | Затухание треугольной УВ в воде по мере распространения и в   |
|      | следствие постепенного замедления «поршня», толкающего УВ 148   |
| 5.12 | Эволюция профиля плотности в золоте от состояния атмосфера  |
|      | плюс вспененная смесь к состоянию с исчерпанным запасом смеси . 150                                       |
| 5.13 | Изменение профиля давления со временем в координатах,   |
|      | нормированных на текущую позицию и амплитуду УВ в воде 150  |
| 5.14 | Зависимости от времени давления и температуры на КГ, давления   |
|      | насыщенного пара золота при этой температуре и давления на УВ в   |
|      | воде  |
| 5.15 | Смещение КГ и УВ и скорости воды около КГ и за фронтом УВ в   |
|      | зависимости от времени  |
| 5.16 | Замедление КГ   |
| 5.17 | Инкремент НРТ   |
| 5.18 | Рост числа $\int^t \boldsymbol{\gamma}(t')  \mathrm{d}t'$ со временем — усиление амплитуды возмущения 155 |
| 5.19 | Профили давления и плотности в МД—моделировании   |
| 5.20 | Скачок скорости вниз (торможение) на верхней границе  |
|      | атмосферы, где двухфазная смесь входит в атмосферу 158  |
| 5.21 | Усиление возмущений Рэлея—Тейлора из—за торможения  |
|      | атмосферы давлением воды  |
| 5.22 | Распределения температуры для двух случаев, сильно  |
|      | отличающихся по длительности импульса   |
| 5.23 | Профили плотности и скорости  |
| 5.24 | Внутренняя структура слоя пены вблизи КГ с предыдущего  |
|      | рисунка 5.23  |
| 5.25 | Ситуация на стадии I — до плавления   |
| 5.26 | Начало II стадии со слоем расплава  |
| 5.27 | Кривая плавления $p_{ m m}(T)~(T_{ m m}(p))$ и зависимость давления                                       |
|      | насыщенных паров от температуры $p_{\rm sat}(T)$ в золоте   |
| 5.28 | Середина II стадии (стадия плавления)   |
| 5.29 | Состояние вещества на фазовой диаграмме в момент времени -0,2 нс. 170                                     |
| 5.30 | Профили плотности, температуры и давления в момент времени $t = 0172$                                     |

| 5.31 | Температурный профиль $T({f  ho})$ на фазовой плоскости ${f  ho}, T$ и     |
|------|--|
|      | профиль давления $p({f  ho})$ на фазовой плоскости ${f  ho}, p$ в момент   |
|      | времени $t = 0$  |
| 5.32 | Температура (слева) и давление (справа) на поверхности контакта            |
|      | золотой пленки с водой   |
| 5.33 | Профили плотности, давления и скорости при $F_{ m abs}=0.9~{ m /Jm/cm^2},$ |
|      | $\tau_{\rm L}=0.5~{ m Hc}$   |
| 5.34 | Образование наночастиц золота при его конденсации в смеси                  |
|      | золото-вода  |
| 5.35 | Движение контакта $x_{cb}(t)$  |

#### Основные публикации

Большинство публикаций написано с соавторами по схеме: эксперимент, как правило проведенный сотрудниками ОИВТ РАН (С. И. Ашитков и др., А. Я. Фаенов и др.) — теоретический анализ на основе 2*T*ГД расчетов, при необходимости дополненных МД—моделированием, выполненным, как правило, В. В. Жаховским и др. В.А. Хохлов выполнил 2*T*ГД расчеты и принимал активное участие в обсуждении постановки задач и теоретическом анализе полученных результатов. Публикации, в которых основные обсуждаемые результаты относятся к эксперименту и/или МД—моделированию, а 2*T*ГД расчет играет только вспомогательную роль для запуска МД в список основных не включены.

## O1 Статьи в рецензируемых журналах, индексируемых Web of Science: Core Collection, и/или Scopus

# 01:1 Воздействие ульракоротких лазерных импульсов (УКЛИ) на объемные мишени и толстые пленки. Абляционный кратер. Кольца Ньютона

- Разлет вещества и образование кратера при абляции под действием ультракороткого лазерного импульса / С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, К. Нишихара, Ю. В. Петров, В. А. Хохлов // ЖЭТФ. — 2006. — Т. 130(2). — С. 212–227. — [Ablated matter expansion and crater formation under the action of ultrashort laser pulse / S. I. Anisimov, V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, K. Nishihara, Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov // JETP. — 2006. — V. 103(2). — Р. 183–197.] — DOI: 10.1134/S1063776106080024. — WoS: 000240552200002
- Interaction of short laser pulses with metals at moderate intensities /
   S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov,
   V. V. Zhakhovskii, K. Nishihara, M. B. Agranat, S. I. Ashitkov,

P. S. Komarov // Appl. Phys. A. -2008. - V. 92(4). - P. 939-943.- DOI: 10.1007/s00339-008-4607-y. - WoS: 000258451600035

- Theoretical and experimental study of hydrodynamics of metal target irradiated by ultrashort laser pulse / N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov, V. A. Zhakhovskii, K. Nishihara, M. B. Agranat, S. I. Ashitkov, P. S. Komarov // Proc. SPIE. - 2008. - V. 7005. - P. 70052F. - DOI: 10.1117/12.782598. -WoS: 000258905800051
- 4. Two-temperature relaxation and melting after absorption of femtosecond laser pulse / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovskii, S. I. Ashitkov, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, P. S. Komarov, M. B. Agranat, S. I. Anisimov, K. Nishihara // Appl. Surf. Sci. - 2009. - V. 255(24). -P. 9712-9716. - arXiv:0812.2965. -

**DOI:** 10.1016/j.apsusc.2009.04.139. – **WoS:** 000270420700037

- Pump-probe method for measurement of thickness of molten layer produced by ultrashort laser pulse / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, S. I. Ashitkov, M. B. Agranat, P. S. Komarov, V. A. Khokhlov, V. V. Shepelev // AIP Conf. Proc. - 2010. - V. 1278. - P. 590-599. -DOI: 10.1063/1.3507151. - WoS: 000287183900062
- Electron-Ion Relaxation, Phase Transitions, and Surface Nano-Structuring Produced by Ultrashort Laser Pulses in Metals / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, Y.V. Petrov, V. A. Khokhlov, S. I. Ashitkov, K. V. Khishchenko, K. P. Migdal, D. K. Ilnitsky, Y. N. Emirov, P. S. Komarov, C. W. Miller, I. I. Oleynik, M. B. Agranat, A. V. Andriyash, S. I. Anisimov, V. E. Fortov // Contrib. Plasma Phys. - 2013 -V. 53(10). - P. 796-810. - DOI: 10.1002/ctpp.201310049. -WoS: 000328062200012
- Ultrafast lasers and solids in highly excited states: results of hydrodynamics and molecular dynamics simulations / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov, S. I. Ashitkov, Yu. N. Emirov, K. V. Khichshenko, A. Ya. Faenov, T. A. Pikuz, M. Ishino, M. ando, N. Hasegawa, M. Nishikino, P. S. Komarov, B. J. Demaske, M. B. Agranat, S. I. Anisimov, T. Kawachi, I. I. Oleynik // J. Phys.: Conf. Ser. - 2014 . - V. 510. - P. 012041. -DOI: 10.1088/1742-6596/510/1/012041. - WoS: 000350296800041

 Ablation of gold irradiated by femtosecond laser pulse: Experiment and modeling / S. I. Ashitkov, P. S. Komarov, V. A. Zhakhovsky, Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov, A. A. Yurkevich, D. K. Ilnitsky, N. A. Inogamov, M. B. Agranat // J. Phys.: Conf. Ser. - 2016. - V. 774. - P. 012097. -DOI: 10.1088/1742-6596/774/1/012097. -- WoS: 000403483200098

### О1:2 Рентгеновские УКЛИ. Прозрачные диэлектрики

- Spallative Ablation of Metals and Dielectrics / N. A. Inogamov, A. Ya. Faenov, V. A. Khokhlov, V. A. Zhakhovskii, Yu. V. Petrov, I. Yu. Skobelev, K. Nishihara, Y. Kato, M. Tanaka, T. A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S. V. Bulanov, T. Kawachi, S. I. Anisimov, V. E. Fortov // Contrib. Plasma Phys. - 2009. - V. 49. - No. 7-8. - P. 455-466. - DOI: 10.1002/ctpp.200910045 -WoS: 000271253900004
- Spallative ablation of dielectrics by X-ray laser / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, A.Y. Faenov, V. A. Khokhlov, V. V. Shepelev, I. Yu. Skobelev, Y. Kato, M. Tanaka, T. A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S. V. Bulanov, T. Kawachi, Yu. V. Petrov, S. I. Anisimov, V. E. Fortov // Appl. Phys. A - 2010 - V. 101(1). -P. 87-96. - arXiv:0912.3184. - DOI: 10.1007/s00339-010-5764-3. - WoS: 000283097300016
- Ablation by shoft optical and X-ray laser pulses / N. A. Inogamov,
   S. I. Anisimov, V. A. Zhakhovsky, A. Ya. Faenov, Yu. V. Petrov,
   V. A. Khokhlov, V. E. Fortov, M. B. Agranat, S. I. Ashitkov, P. S. Komarov,
   A. Ya. Faenov, I. Yu. Skobelev, Y. Kato, T. A. Pikuz, V. V. Shepelev //
   Proc. SPIE. 2010. V. 7996. P. 79960T. DOI: 10.1117/12.887429.
   -- WoS: 000296336100029
- Two-Temperature Warm Dense Matter Produced by Ultrashort Extreme Vacuum Ultraviolet-Free Electron Laser (EUV-FEL) Pulse / N. A. Inogamov, A. Ya. Faenov, V. A. Zhakhovsky, T. A. Pikuz, I. Yu. Skobelev, Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov, V. V. Shepelev, S. I. Anisimov, V. E. Fortov, Y. Fukuda, M. Kando, T. Kawachi, M. Naga-

sono, H. Ohashi, M. Yabashi, K. Tono, Y. Senda, T. Togashi, T. Ishikawa // *Contrib. Plasma Phys.* - 2011. - V. **51**(5). - P. 419-426. -**DOI:** 10.1002/ctpp.201110013. - **WoS:** 000293627500003

13. Абляция диэлектриков под действием коротких импульсов рентгеновских плазменных лазеров и лазеров на свободных электронах / Н. А. Иногамов, С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, А. Ю. Фаенов, Ю. В. Петров, В. А. Хохлов, В. Е. Фортов, И. Ю. Скобелев, Ю. Като, Т. А. Пикуз, В. В. Шепелев, Ю. Фукуда, М. Танака, М. Кишимото, М. Ишино, М. Нишикино, М. Кандо, Т. Кавачи, М. Нагасоно, Н. Охаши, М. Ябаши, К. Тано, Ю. Сенда, Т. Тогаши, Т. Ишикава // Оптический журнал. -2011 - T. 78(8). -C. 5-15. - [Ablation of insulators under]the action of short pulses of X-ray plasma lasers and free-electron lasers / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovskii, A. Ya. Faenov, V. E. Fortov, Y. Kato, V. V. Shepelev, Y. Fukuda, M. Kishimoto, M. Nagasono, N. Ohashi, Y. Senda, M. Yabashi, K. Tano, M. Tanaka, I. Yu. Skobelev, T. A. Pikuz, S. I. Anisimov, Yu. V. Petrov, M. Ishino, T. Ishikawa, T. Togashi, M. Nishikino, V. A. Khokhlov, M. Kando, T. Kawachi // J. Opt. Technol. -2011. - V. 78(8). - P. 473-480. - DOI: 10.1364/JOT.78.000473. -WoS: 000294662900002

# 01:3 Прохождение тепловых и акустических возмущений через мишень. Ударные волны

14. Прочностные свойства расплава алюминия в условиях экстремально высоких темпов растяжения при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов / М. Б. Агранат, С. И. Анисимов, С. И. Ашитков, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, П. С. Комаров, А.В. Овчинников, В. Е. Фортов, В. А. Хохлов, В. В. Шепелев // Письма в ЖЭТФ. – 2010. – Т. 91(9). – С. 517–523. – [Strength properties of an aluminum melt at extremely high tension rates under the action of femtosecond laser pulses / M. B. Agranat, S. I. Anisimov, S. I. Ashitkov, V. A. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, P. S. Komarov, A. V. Ovchinnikov, V. E. Fortov, V. A. Khokhlov, V. V. Shepelev // JETP Lett. – 2010. –

V. **91**(9). – P. 471–477.] – **DOI:** 10.1134/S0021364010090080. – **WoS:** 000279691400008

15. Сверхупругость и распространение ударных волн в кристаллах / Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, В. В. Шепелев // Письма в ЖЭТФ. — 2011. — Т. 93(4). — С. 245–251. — [Superelasticity and the propagation of shock waves in crystals / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovskii, V. A. Khokhlov, V. V. Shepelev // JETP Lett. — 2011 — V. 93(4). — P. 226–232.], —

**DOI:** 10.1134/S0021364011040096. - **WoS:** 000290279500010

- Ultrashort elastic and plastic shock waves in aluminum / N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, S. I. Anisimov, V. A. Zhakhovsky, B. J. Demaske, I. I. Oleynik, S. I. Ashitkov, K. V. Khishchenko, M. B. Agranat, V. E. Fortov, C. T. White // AIP Conf. Proc. – 2012. – V. 1426. – P. 909–912. – DOI: 10.1063/1.3686425. – WoS: 000302774300213
- 17. Super-elastic response of metals to laser-induced shock waves / V. A. Zhakhovsky, B. J. Demaske, N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, S. I. Ashitkov, M. B. Agranat, I. I. Oleynik // AIP Conf. Proc. 2012. V. 1464. P. 102-112. DOI: 10.1063/1.4739864. WoS: 000306992500008
- Two-temperature hydrodynamics of laser-generated ultrashort shock waves in elasto-plastic solids / D. K. Ilnitsky, V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, Yu. V. Petrov, K. V. Khishchenko, K. P. Migdal, S. I. Anisimov // J. Phys.: Conf. Ser. - 2014. - V. 500. - P. 032021. -DOI: 10.1088/1742-6596/500/3/032021. - WoS: 000337722900033
- Two-temperature hydrodynamic expansion and coupling of strong elastic shock with supersonic melting front produced by ultrashort laser pulse / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov, B. J. Demaske, K. V. Khishchenko, I. I. Oleynik // J. Phys.: Conf. Ser. - 2014. -V. 500. - P. 192023. - DOI: 10.1088/1742-6596/500/19/192023. - WoS: 000337722900314

### 01:4 Воздействие УКЛИ на тонкие металлические пленки и многослойные мишени

- 20. Thin 10-100 nm film in contact with substrate: Dynamics after femtosecond laser irradiation / V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, V. V. Shepelev, D. K. Il'nitsky // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V. 653. P. 012003. DOI: 10.1088/1742-6596/653/1/012003. WoS: 000368507600003
- 21. Metal film on a substrate: Dynamics under the action of ultrashort laser pulse / V. A. Khokhlov, V. A. Zhakhovsky, K. V. Khishchenko, N. A. Inogamov, S. I. Anisimov // J. Phys.: Conf. Ser. - 2016. - V. 774. - P. 012100. -

**DOI:** 10.1088/1742-6596/774/1/012100. – **WoS:** 000403483200101

22. Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation / V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, D. K. Ilnitsky, K. P. Migdal, V. V. Shepelev // AIP Conf. Proc. - 2017. - V. 1793. - P. 100038. -

**DOI:** 10.1063/1.4971663. - **WoS:** 000404282600207

- 23. Energy redistribution between layers in multi-layered target heated by X-ray pulse / N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, V. A. Zhakhovsky, Yu. V. Petrov // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 946. P. 012009. DOI: 10.1088/1742-6596/946/1/012009. WoS: 000446782200009.
- 24. Laser ablation of a multilayer target with layers of nanometer thickness / V. A. Khokhlov, S. I. Ashitkov, N. A. Inogamov, P. S. Komarov, A.N. Parshikov, Yu. V. Petrov, S. A. Romashevskii, E.V. Struleva, P.A. Tsygankov, V. A. Zhakhovsky // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. V. 1787. P. 012022. -

**DOI:** 10.1088/1742-6596/1787/1/012022. - **Scopus:** 2-s2.0-85102348939.

25. Фемтосекундное лазерное воздействие на многослойную наноструктуру металл-металл / С. А. Ромашевский, В. А. Хохлов, С. И. Ашитков, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, П. С. Комаров, А. Н. Паршиков, Ю. В. Петров, Е. В. Струлева, П. А. Цыганков // Письма в ЖЭТФ. – 2021. – Т. 113 (5). – С. 311–319. – DOI: 10.31857/S1234567821050049. – [Femtosecond Laser Irradiation of a Multilayer Metal-Metal Nanostructure / S. A. Romashevskiy, V. A. Khokhlov, S. I. Ashitkov, V. A. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, P. S. Komarov, A. N. Parshikov, Yu. V. Petrov, E. V. Struleva, P. A. Tsygankov // JETP Lett. - 2021. - V. 113(5). P. 308-316. -DOI: 10.1134/S002136402105009X. ] - WoS: 000650320200004.

#### О1:5 Лазерная абляция в жидкость

26. Laser ablation of metal into liquid: Near critical point phenomena and hydrodynamic instability / N. Inogamov, V. Zhakhovsky, V. Khokhlov // AIP Conf. Proc. - 2018. - V. 1979. - P. 190001. - arXiv: 1803.07343 [physics.comp-ph] -

**DOI:** 10.1063/1.5045043. – **WoS:** 000440134300275.

- 27. Динамика абляции золота в воду / Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский,
  В. А. Хохлов // ЖЭТФ. 2018. Т. 154(1). С. 92-123. [Dynamics of Gold Ablation into Water. / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovskii,
  V. A. Khokhlov. // JETP. 2018. V. 127(1). Р. 79-106] DOI: 10.1134/S1063776118070075. WoS: 000442614400009.
- 28. Hydrodynamic phenomena induced by laser ablation of metal into liquid / Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov, V. A. Zhakhovsky, N. A. Inogamov // Appl. Surf. Sci. - 2019. - V. 492. - P. 285-297. - DOI: 10.1016/j.apsusc.2019.05.325 -

arXiv:1812.09109 [physics.comp-ph] (2018). - WoS: 000489699700034.

29. l Condensation of laser-produced gold plasma during expansion and cooling in a water environment / Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov // Contrib. Plasma Phys. - 2019. V 59(6). - P. e201800180. -

arXiv:1812.09929 [physics.comp-ph] (2018). - **DOI:** 10.1002/ctpp.201800180. - **WoS:** 000475653900004.

Laser ablation in liquid / Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov, V. A. Zhakhovsky,
 N. A. Inogamov // J. Phys.: Conf. Ser. - 2020. - V. 1556. - P. 012002.

**DOI:** 10.1088/1742-6596/1556/1/012002. - **WoS:** 000619216000003.

- 31. Laser ablation in liquid: Heating, diffusion, and condensation / V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky // J. Phys.: Conf. Ser. 2020. V. 1556. P. 012003. DOI: 10.1088/1742-6596/1556/1/012003. WoS: 000619216000004.
- 32. Physical processes in laser ablation into liquid and laser shock wave pinning /

S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov,
 V. A. Zhakhovsky // J. Phys.: Conf. Ser. - 2020. - V. 1556. - P. 012004.
 -

**DOI:** 10.1088/1742-6596/1556/1/012004. - **WoS:** 000619216000005.

33. Hydrodynamic and molecular-dynamics modeling of laser ablation in liquid: from surface melting till bubble formation / N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, V. A. Zhakhovsky // Optical and Quantum Electronics. - 2020. - V. 52(2). - P. 63. arXiv:1910.08924 [physics.comp-ph] (2019) -

**DOI:** 10.1007/s11082-019-2168-2. — **WoS:** 000519120700009.

34. Laser shock peening / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, D. K. Ilnitsky, V. A. Khokhlov // J. Phys.: Conf. Ser. - 2021. - V. 1787. - P. 012024.

**DOI:** 10.1088/1742-6596/1787/1/012024. - **Scopus:** 2-s2.0-85102353680.

35. Физические процессы при лазерной абляции в жидкость / Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов // Письма в ЖЭТФ. — 2022.
— Т. 115 (1). — С. 20–27. — DOI: 10.31857/S1234567822010049.
— [Physical Processes Accompanying Laser Ablation in Liquid / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovskii, V. A. Khokhlov // JETP Lett. — 2022. — V. 115(1). — Р. 16–22. — DOI: 10.1134/S002136402201009X].
— WoS: 000773937900004.

#### О2 Статьи в сборниках конференций

# O2:1 Воздействие ульракоротких лазерных импульсов на объемные мишени и толстые пленки. Абляционный кратер. Кольца Ньютона

- Гидродинамика взаимодействия ультракороткого лазерного импульса с веществом: сравнение расчётов с экспериментом / Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, Ю. В. Петров, В. А. Хохлов, С. И. Ашитков, С. И. Анисимов, М. Б. Агранат, К. Нишихара // Физика экстремальных состояний вещества — 2008 / Ред. В. Е. Фортов и др. — Черноголовка, ИПХФ РАН — С. 172–175.
- Ablation and Spallation of Metals by Femtosecond Laser Pulse / N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, S. I. Ashitkov, V. A. Khokhlov, B. J. Demaske, S. I. Anisimov, M. B. Agranat, V. E. Fortov, I. I. Oleynik // 19th European Conference on Fracture, European Structural Integrity Society (ESIS), August 2012, Kazan, Russia. — ISBN 978-5-905576-18-8. — 2012. P. 226 proceeding.

#### О2:2 Рентгеновские УКЛИ. Прозрачные диэлектрики

 Ablation of lithium fluoride dielectric crystal by the short pulses of x-ray plasma laser and extreme ultraviolet free electron laser / S. I. Anisimov, A. Yu. Faenov, N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, I. Yu. Skobelev, V. A. Zhakhovsky // Physics of Extreme States of Matter - 2011 / Ed. by V. E. Fortov et. al. - Chernogolovka. - 2011. - P. 38-41.

# O2:3 Прохождение тепловых и акустических возмущений через мишень. Ударные волны

- Elastic-plastic phenomena and propagation of strong shock waves under the action of femtosecond laser pulses / N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, V. A. Zhakhovsky // Physics of Extreme States of Matter - 2011 / Ed. by V. E. Fortov et. al. - Chernogolovka. - 2011. - P. 11-14.
- 5. Elastic-plastic phenomena in shock waves caused by short laser pulses. Comparison of hydrodynamic and molecular dynamics simulations / V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, S. I. Anisimov // Physics of Extreme States of Matter — 2013 / Ed. by V. E. Fortov et. al. — Chernogolovka. — 2013. — P. 61–64.

#### О2:4 Воздействие УКЛИ на тонкие металлические пленки

- Investigation of two-temperature relaxation in thin foil on a glass substrate initiated by the action of ultrashort laser pulse / V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, V. A. Zhakhovsky, V. V. Shepelev, S. I. Ashitkov, P. S. Komarov, M. B. Agranat, V. E. Fortov // Physics of Extreme States of Matter — 2010. The compendium of the XXV Int. Conf. on Equations of State for Matter, March 1–6, 2010 / / Ed. by V. E. Fortov et. al. — Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia. Chernogolovka. — 2010. P. 127–129.
- Femtosecond Laser Ablation of Thin Films on Substrate / N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, V. A. Zhakhovsky, Yu. V. Petrov, K. V. Khishchenko, S. I. Anisimov // Progress In Electromagnetics Research Symposium. — PIERS Proceedings, July 6–9, 2015, Prague. — 2015. P. 2422–2426.

#### Список литературы

- Каганов М. И., Лифшиц И. М., Танатаров Л. В. / Релаксация между электронами и решеткой. // ЖЭТФ — 1957. — Vol. 31, по. 2. — Р. 232–237. —
- С. И. Анисимов, А. М. Бонч-Бруевич, М.А. Ельяшевич et al. /Действие мощных световых потоков на металлы // Ж. техн. физики. — 1966. — Vol. 36, no. 7. — Р. 1273–1284. — [S.I. Anisimov, A.M. Bonch-Bruevich, M.A. El'yashevich, et al., Sov. Phys. Tech. Phys. 11, 945 (1967)].
- Анисимов С. И., Капелиович Б. Л., Перельман Т. Л. / Электронная эмиссия с поверхности металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов. // ЖЭТФ — 1974. — Vol. 66. — Р. 776–779. — [S.I. Anisimov, B.L. Kapeliovich, T.L. Perelman, Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses, Sov. Phys. JETP 39(2), 375-377 (1974)].
- Laser and Electron Beam Processing of Materials / Ed. by C.W. White. 1st Edition edition. - Elsevier, 1980. - P. 788 pages.
- Анисимов С. И., Лукьянчук Б. С. / Избранные задачи теории лазерной абляции. // УФН — 2002. — Vol. 172, no. 3. — Р. 301–333. — [Anisimov, S. I. & Luk'yanchuk, B. S. Selected problems of laser ablation theory Physics-Uspechi, 2002, 45, 293-324].
- Bäuerle D. Laser Processing and Chemistry. Berlin, Heidelberg : Springer Verlag, 2011.
- Artem B. Cherepakhin, Dmitrii V. Pavlov, Ivan I. Shishkin et al. / Laser-printed hollow nanostructures for nonlinear plasmonics //Appl. Phys. Lett. – 2020. – Vol. 117, no. 4. – P. 041108.
- Sergey I. Kudryashov, Andrey A. Samokhvalov, Yaroslav D. Golubev et al. / Dynamic all-optical control in ultrashort double-pulse laser ablation // Appl. Surf. Sci. - 2021. - Vol. 537. - P. 147940.

- 10. S. Romashevskiy, Anton Ignatov, Vasily Zhakhovsky et al. / Embossing of silicon with an ultrashort laser pulse diffracted by a bubble in liquid // Appl. Surf. Sci. - 2023. - 12. - Vol. 614. - P. 156212.
- T. Kawashima, T. Sano, A. Hirose et. al. / Femtosecond Laser Peening of Friction Stir Welded 7075-T73 Aluminum Alloys // Journal of Materials Processing Technology. - 2018. - Vol. 262. - P. 111 - 122.
- U. Trdan, T. Sano, D. Klobcar et al. / Improvement of corrosion resistance of AA2024-T3 using femtosecond laser peening without protective and confining medium // Corrosion Science. - 2018. - Vol. 143. - P. 46 - 55.
- Н. А. Иногамов, Е. А. Перов, В. В. Жаховский и др.. / Лазерная ударная волна: пластичность, толщина слоя остаточных деформаций и переход из упругопластического в упругий режим распространения. // Письма в ЖЭТФ— 2022. — Vol. 115, по. 2. — Р. 80–88. — [Inogamov, N.A., Perov, E.A., Zhakhovsky, V.V. et al., Jetp Lett. 115, 71–78 (2022)].
- 14. В. А. Хохлов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др. / Плавление титана ударной волной, вызванной мощным фемтосекундным лазерным импульсом. // Письма ЖЭТФ- 2022. Vol. 115, no. 9. Р. 576-584. [JETP Lett., 2022, Vol. 115, No. 9, pp. 523-530].
- 15. V. Zhakhovsky, Yu. Kolobov, S. Ashitkov et. al. / Shock-induced melting and crystallization in titanium irradiated by ultrashort laser pulse. // Physics of Fluids-2023. - Vol. 35. - P. 096104.
- W. S. Fann, R. Storz, H. W. K. Tom, J. Bokor / Direct measurement of nonequilibrium electron-energy distributions in subpicosecond laser-heated gold films // Phys. Rev. Lett. - 1992. - Vol. 68. - P. 2834-2837.
- 17. C.-K. Sun, F. Vall'ee, L. H. Acioli et al. / Femtosecond-tunable measurement of electron thermalization in gold // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 50, no. 20. P. 15337.

- J. Hohlfeld, S.-S. Wellershoff, J. Guedde et al. / Electron and lattice dynamics following optical excitation of metals // Chem. Phys. - 2000. - Vol. 251, no. 1. - P. 237-258.
- N. Del Fatti, C. Voisin, M. Achermann et al. / Nonequilibrium electron dynamics in noble metals // Phys. Rev. B. - 2000. - Vol. 61, no. 24. -P. 16956-16966.
- 20. Smith A. N., Norris P. M. / Influence of intraband transitions on the electron thermoreflectance response of metals //Appl. Phy. Lett. - 2001. - 02. -Vol. 78, no. 9. - P. 1240-1242.
- 21. P. E. Hopkins, P. M. Norris / Substrate influence in electron-phonon coupling measurements in thin Au films // Appl. Surf. Sci. 2007. Vol. 253, no. 15. P. 6289-6294.
- 22. Yu. V. Petrov, K. P. Migdal, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky / Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse. // Appl. Phys. B- 2015. - Vol. 119, no. 3. - P. 401-411.
- 23. Baerbel Rethfeld, Dmitriy S Ivanov, Martin E Garcia, Sergei I Anisimov / Modeling ultrafast laser ablation. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. Vol. 50. P. 193001.
- 24. Downer M. C., Fork R. L., Shank C. V. / Femtosecond imaging of melting and evaporation at a photoexcited silicon surface. // J. Opt. Soc. Am. B-1985. – Apr. – Vol. 2, no. 4. – P. 595–599.
- 25. K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, A. Cavalleri, D. von der Linde / Observation of a transient insulating phase of metals and semiconductors during short-pulse laser ablation // Appl. Surf. Sci.— 1998.— Vol. 127-129.— P. 755-760.
- 26. K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, A. Cavalleri et al. / Transient States of Matter during Short Pulse Laser Ablation // Phys. Rev. Lett. – 1998. – Vol. 81. – P. 224–227.
- Sokolowski-Tinten, 27. Vasily V. Temnov, Klaus Ping Zhou, Dietrich Linde Ultrafast imaging interferometry von der at

femtosecond-laser-excited surfaces. // J. Opt. Soc. Am. B. - 2006. - Vol. 23, no. 9. - P. 1954-1964.

- J. C. Crowhurst, M. R. Armstrong, K. B. Knight t et al. / Invariance of the Dissipative Action at Ultrahigh Strain Rates Above the Strong Shock Threshold // Phys. Rev. Lett. - 2011. - Sep. - Vol. 107. - P. 144302.
- 29. S. I. Ashitkov, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov et al. / The behavior of iron under ultrafast shock loading driven by a femtosecond laser // AIP Conf. proc. - 2017. - Vol. 1793. - P. 100035 - 1-5.
- 30. J. G. Fujimoto, J. M. Liu, E. P. Ippen, N. Bloembergen / Femtosecond laser interaction with metallic tungsten and nonequilibrium electron and lattice temperatures // Phys. Rev. Lett. - 1984. - Vol. 53. - P. 1837-1840.
- 31. M. B. Agranat, S. I. Anisimov, B. I. Makshantsev / The anomalous thermal radiation from metals produced by ultrashort laser pulses // Appl. Phys. B – 1988. – Vol. 47. – P. 209–221.
- J. P. Girardeau-Montaut, C. Girardeau-Montaut / Theory of ultrashort nonlinear multiphoton photoelectric emission from metals. // Phys. Rev. B - 1995. – Vol. 51. – P. 13560–13657.
- 33. S. I. Anisimov, V. A. Khokhlov / § 4. Effects of ultrashort laser pulses. In: Instabilities in laser-matter interaction. - CRC Press, Inc., 1995. - P. 63-72.
- 34. K. Eidmann, J. Meyer ter Vehn, T. Schlegel, S. Hüller / Hydrodynamic simulation of subpicosecond laser interaction with solid-density matter. // Phys. Rev. E - 2000. - Vol. 62, no. 1. - P. 1202-1214.
- 35. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, Ю. В. Петров и др. / Разлет вещества, нагретого ультракоротким лазерным импульсом. // Письма в ЖЭТФ— 1999. — Vol. 69, по. 4. — Р. 284–289. — [Inogamov, N. A.; Petrov, Y. V.; Anisimov, et. al., JETP Lett., 1999, 69, 310-316].
- 36. В. В. Жаховский, К. Нишихара, С. И. Анисимов, Н. А. Иногамов / Молекулярно-динамическое моделирование волн разрежения в средах с фазовыми переходами. // Письма в ЖЭТФ — 2000. — Vol. 71, no. 4. — P. 241–248. — [Zhakhovskii, V. V.; Nishihara, K.; Anisimov, S. I. & Inogamov, N. A., JETP Lett., 2000, 71, 167-172].

- 37. С. И Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др. / Разлет вещества и образование кратера при абляции под действием ультракороткого лазерного импульса. // ЖЭТФ — 2006. — Vol. 130, no. 2. — Р. 212–227. — [Anisimov, S. I.; Zhakhovskii, V. V.; Inogamov, et. al., J. Experim. Theor. Phys. (JETP), 2006, 103, 183-197].
- Дерягин Б. В. / Общая теория формирования новой фазы. Статическая кавитация в нелетучей жидкости. // ЖЭТФ 1974. Vol. 65, no. 6. Р. 2261–2271. [Deryagin, B. V., Sov. Phys. JETP, 1973, 38, 1129].
- 39. Grady D. E. / The spall strength of condensed matter. // J. Mech. Phys. Solids 1988. Vol. 36, no. 3. P. 353-384.
- 40. Н.А. Иногамов, В. В. Жаховский, Ю. В. Петров et al. / Гидродинамика взаимодействия ультракороткого лазерного импульса с веществом: сравнение расчётов с экспериментом // Физика экстремальных состояний вещества — 2008 / Ed. by В. Е. Фортов, и др. — Черноголовка : ИПХФ РАН, 2008. — Р. 172–175.
- 41. S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov et al. / Interaction of short laser pulses with metals at moderate intensities // Appl. Phys. A. - 2008. – Vol. 92, no. 4. – P. 939–943.
- 42. K. V. Khishchenko, S. I. Tkachenko, P. R. Levashov et al. / Metastable States of Liquid Tungsten Under Subsecond Wire Explosion // Int. J. Thermophys. – 2002. – Vol. 23, no. 5. – P. 1359–1367.
- 43. К. В. Хищенко / Уравнение состояния магния в области высоких давлений // Писъма в ЖТФ. — 2004. — Vol. 30, по. 19. — Р. 65–71.
- 44. Nail A. Inogamov, Viktor A. Khokhlov, Yurii V. Petrov et al. / Ultrashort elastic and plastic shockwaves in aluminum // AIP Conf. Proc. - 2012. --Vol. 1426. - P. 909-912.
- 45. N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, V. V. Zhakhovsky et al. / Two-temperature thermodynamic and kinetic proporties of transition metals irradiated by femtosecond lasers // AIP Conf. Proc. - 2012. - Vol. 1464. - P. 593-608.

- 46. Nail A. Inogamov, Vasily V. Zhakhovsky, Yurii V. Petrov et al. / Ultrashort laser - matter interaction at moderate intensities: two-temperature relaxation, foaming of stretched melt, and freezing of evolving nanostructures // Proc. SPIE. - 2013. - 02. - Vol. 9065. - P. 906502,1-14.
- 47. N. A Inogamov, V. V Zhakhovsky, S. I Ashitkov и др. / Surface nano-structuring produced by spallation of metal irradiated by an ultrashort laser pulse //J. Phys.: Conf. Ser. - 2014. - Vol. 500. - P. 112070,1-6.
- 48. N. A Inogamov, V. V Zhakhovsky, V. A Khokhlov et al. / Two-temperature hydrodynamic expansion and coupling of strong elastic shock with supersonic melting front produced by ultrashort laser pulse // J. Phys.: Conf. Ser. – 2014. – Vol. 500(19), no. 05. – P. 192023,1–6.
- 49. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov et al. / Ultrafast lasers and solids in highly excited states: results of hydrodynamics and molecular dynamics simulations // J. Phys.: Conf. Ser. 2014. 05. Vol. 510(1). P. 012041[1-15].
- Исследование 50. Хищенко Κ. В., Фортов В. Ε. уравнений концентрации энергии состояния материалов npuвысокой ИЗВЕСТИЯ КАБАРДИНО-БАЛКАРСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА. — 2014. — Vol. 4(1), по. 1. — Р. 6–16.
- 51. K. V. Khishchenko / Equation of state for iridium at high pressures // J. Phys.: Conf. Ser. 2022. Vol. 2154. P. 012009.
- 52. Бушман А. В., Ломоносов И. В., Фортов В. Е. // Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. — Черноголовка: ИХФЧ РАН, 1992.
- 53. А. В. Бушман, В. Е. Фортов / Модели уравнения состояния вещества. // УФН. — 1983. — Vol. 140. — Р. 177–232. — [Bushman A V, Fortov V E "Model equations of state" Sov. Phys. Usp. 26 465–496 (1983)].
- 54. A. V. Bushman, G. I. Kanel', A. L. Ni, V. E. Fortov / Intense dynamic loading of condensed matter. Washington, D.C. : Taylor & Francis, 1993.

- 55. V. E. Fortov, K. V. Khishchenko, P. R. Levashov, I. V. Lomonosov / Wide-range multi-phase equations of state for metals // Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, A. - 1998. - Vol. 415, no. 3. - P. 604-608.
- 56. Lomonosov I. V. / Multi-phase equation of state for aluminum. // Laser and Particle Beams - 2007. - Vol. 25. - P. 567-584.
- 57. Ломоносов И. В., Фортова С. В. / Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // ТВТ. 2017. Vol. 55, по. 4. Р. 596–626.
- 58. P. R. Levashov, K. V. Khishchenko, I. V. Lomonosov, V. E. Fortov / Database on shock-wave experiments and equations of state available via Internet // AIP Conf. Proc. - 2004. - Vol. 706. - P. 87-90.
- 59. SW EOS database. http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/ http://www.ihed.ras.ru/rusbank/.
- 60. Y. V. Petrov, V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov et al. / Equation of state of matter irradiated by short laser pulse and geometry of spalled cupola // Proc. SPIE. - 2008. - Vol. 7005. - P. 70051W.
- 61. N. A. Inogamov, S. I. Ashitkov, V. V. Zhakhovskii et al. / Band structures of simple and noble metals and their material properties in a two-temperature state with hot electrons overheated above a cold crystal lattice by an ultrashort laser pulse // "Physics of Extreme States of Matter - 2009," The compendium of the XXIV International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter, / Ed. by Fortov V.E. et al. — Chernogolovka, 2009. — P. 7–11.
- 62. Yu. V. Petrov / Energy exchange between the lattice and electrons in a metal under femtosecond laser irradiation // Laser and Particle Beams. — 2005. — Vol. 23. — P. 283–289.
- 63. Ю. В. Петров, С. И. Анисимов / Теплопроводность и электрон-фононная релаксация в металле, нагретом субпикосекундным лазерным импульсом // Оптический журнал. — 2006. — Vol. 73 (6), по. 6. — Р. 4–6.

- 64. Н. А. Иногамов, Ю. В. Петров / Теплопроводность металлов с горячими электронами // ЖЭТФ. 2010. Vol. 137, по. 3. Р. 505–529. [Inog-amov, N. A. & Petrov, Y. V., JETP, 2010, 110, 446-468].
- 65. А. А. Самарский / *Теория разностных схем.* М.: «НАУКА» Главная редакция физико-математической литературы, 1977.
- 66. S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov et al. / Thresholds for frontal ablation and backside spallation of thin foil irradiated by femtosecond laser pulse // Appl. Phys. A. - 2008. - Vol. 92, no. 4. - P. 797-801.
- 67. N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, Yu. V. Petrov et al. / Theoretical and experimental study of hydrodynamics of metal target irradiated by ultrashort laser pulse // Proc. SPIE. - 2008. - Vol. 7005. - P. 70052F.
- B. Rethfeld, A. Kaiser, M. Vicanek, G. Simon / Ultrafast dynamics of nonequilibrium electrons in metals under femtosecond laser irradiation // Phys. Rev. B. - 2002. - Vol. 65. - P. 214303.
- 69. B. Y. Mueller and B. Rethfeld / *Relaxation dynamics in laser-excited metals under nonequilibrium conditions* // *Phys. Rev. B.* 2013. Vol. 87. P. 035139.
- 70. А. А. Абрикосов / Основы теории металлов. М.: «НАУКА» Главная редакция физико-математической литературы, 1977.
- B. Y. Mueller, I. Klett, B. Rethfeld Laser excited metals under non-equilibrium conditions // AIP Conf. Proc. - 2012. - Vol. 1464. - P. 609.
- 72. Ю. В. Петров, Н. А. Иногамов, К. П. Мигдал Теплопроводность и коэффициент электрон-ионного теплообмена в конденсированных средах с сильно возбужденной электронной подсистемой. // Письма в ЖЭТФ. 2013. Vol. 97, по. 1. Р. 24–31. [Petrov, Y. V.; Inogamov, N. A. & Migdal, К. Р., JETP Lett., 2013, 97, 20–27].
- 73. V. A. Khokhlov, V. V. Zhakhovsky, K. V. Khishchenko et al. / Metal film on substrate: dynamics under action of ultra-short laser pulse // J. Phys.: Conf. Ser. - 2016. - Vol. 774, no. 1. - P. 012100.

- 74. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер / Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Физматлит, 2008.
- 75. В. Е. Фортов, И. В. Ломоносов / Зельдович и проблемы уравнений состояния вещества в экстремальных условиях // УФН. — 2014. — Vol. 184. — Р. 231–245. — [Fortov V E, Lomonosov I V "Ya.B., Phys. Usp. 57 219–233].
- 76. M.E. Povarnitsyn, N.E. Andreev, E.M. Apfelbaum et al. / A wide-range model for simulation of pump-probe experiments with metals // Appl. Surf. Sci. – 2012. – Vol. 258. – P. 9480–9483.
- 77. G. Kresse, J. Furthmüller / Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Comput. Mater. Sci. - 1996. - Vol. 6, no. 1. - P. 15 - 50.
- 78. G. Kresse, J. Furthmüller / Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B. 1996. Oct. Vol. 54. P. 11169-11186.
- 79. С. И. Анисимов, М. И. Трибельский, Я. Г. Эпельбаум / *Неустойчивость* плоского фронта испарения при взаимодействии лазерного излучения с веществом // ЖЭТФ. — 1980. — Vol. 78, no. 4. — Р. 1597–1605. — [S.I. Anisimov, M.I. Tribel'skii, Ya.G. Épel'baum, Instability of plane evaporation front in interaction of laser radiation with a medium, Sov. Phys. JETP 51(4), 802-806 (1980)].
- 80. S. I. Anisimov, V. A.Khokhlov / 5. Instability of sublimation waves in solids: linear theory. In: Instabilities in laser-matter interaction. - CRC Press, Inc., 1995. - P. 73-92.
- 81. Ю. В. Петров. Частное сообщение.
- 82. S. I. Ashitkov, P. S. Komarov, V. V. Zhakhovsky et al. / Ablation of gold irradiated by femtosecond laser pulse: experiment and modeling // J. Phys.: Conf. Ser. - 2016. - Vol. 774, no. 1. - P. 012097.
- 83. L. A. Girifalco / Statistical physics of materials. Wiley, 1973.

- 84. K. V. Khishchenko / Equations of state for rubidium and cesium at high pressures in shock waves // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. jan. Vol. 1147. P. 012001.
- 85. K. V. Khishchenko / Equation of state for rhenium at high pressures // J. Phys.: Conf. Ser. 2020. may. Vol. 1556. P. 012041.
- 86. Yu. Petrov, K. Migdal, N. Inogamov et al. / Ruthenium under ultrafast laser excitation: Model and dataset for equation of state, conductivity, and electron-ion coupling // Data in Brief. 2020. February. Vol. 28. P. 104980.
- 87. P. R. Levashov, K. V. Khishchenko / Tabular multiphase equations of state for metals and their applications // AIP Conf. Proc. - 2007. - Vol. 955. -P. 59-62.
- K. V. Khishchenko / Equations of state for two alkali metals at high temperatures // J. Phys.: Conf. Series. - 2008. - Vol. 98, no. 3. - P. 032023.
- 89. K. V. Khishchenko / Equation of state for tungsten over a wide range of densities and internal energies // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. Vol. 653. P. 012081.
- 90. K. V. Khishchenko / Equation of state of sodium for modeling of shock-wave processes at high pressures // Math. Montis. - 2017. - Vol. 40. - P. 140-147.
- 91. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskii, S. I. Ashitkov et al. / Two-temperature relaxation and melting after absorption of femtosecond laser pulse // Appl. Surf. Sci. - 2009. - Vol. 255. - P. 9712-9716.
- 92. Ю. В. Петров, К. П. Мигдал, Н. А. Иногамов, С. И. Анисимов / Процессы переноса в металле с горячими электронами, возбужденными лазерным импульсом // Письма в ЖЭТФ. — 2016. — Vol. 104, по. 6. — Р. 446–454. — [Petrov, Y. V.; Migdal, K. P.; Inogamov, N. A. & Anisimov, S. I. JETP Lett., 2016, 104, 431-439].
- 93. Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, S. I. Anisimov et al. / Thermal conductivity of condensed gold in states with the strongly excited electron subsystem // J. Phys. Conf. Ser. - 2015. - Vol. 653. - P. 012087.

- 94. K. P. Migdal, D. K. Il'nitsky, Yu. V. Petrov, N A Inogamov / Equations of state, energy transport and two-temperature hydrodynamic simulations for femtosecond laser irradiated copper and gold // J. Phys.: Conf. Seri. - 2015. --Vol. 653. - P. 012086.
- 95. Zh. Lin, L. V. Zhigilei, V. Celli / Electron-phonon coupling and electron heat capacity of metals under conditions of strong electron-phonon nonequilibrium // Phys. Rev. B. - 2008. - Vol. 77. - P. 075133.
- 97. Н. А. Иногамов, В. А. Хохлов, С. А. Ромашевский и др. / Определение важнейших параметров металла, облученного ультракоротким лазерным импульсом // Письма в ЖЭТФ. — 2023. — Vol. 117, no. 2. — Р. 107–114. — [Jetp Lett., 2023, 117, 104–110 (2023)].
- 98. Д. А. Заярный, А. А. Ионин, С. И. Кудряшов и др. / Абляция поверхности алюминия и кремния ультракороткими лазерными импульсами варьируемой длительности // Письма в ЖЭТФ. — 2016. — Vol. 103, no. 12. — Р. 846–850. — [JETP Lett. 103, 752 (2016)].
- 99. D. A. Zayarny, A. A. Ionin, S. I. Kudryashov1 et al. / Pulse-width-dependent surface ablation of copper and silver by ultrashort laser pulses // Laser Phys. Lett. - 2016. - Vol. 13, no. 7. - P. 076101.
- 100. S. C. Gupta / The Classical Stefan Problem. Elsevier, 2017.
- 101. А. А.Самарский, П. Н. Вабищевич / Вычислительная теплопередача. 2е изд. / Москва: ЛИБРОКОМ. 2009. Р. 784 с.
- 102. M. B. Agranat, S. I. Anisimov, S. I. Ashitkov et al. / Dynamics of plume and crater formation after action of femtosecond laser pulse // Appl. Surf. Sci. – 2007. – Vol. 253. – P. 6276–6282.
- 103. С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др. / Формирование кратера и откольной оболочки коротким лазерным импульсом // Матем. моделирование. — 2006. — Vol. 18(8), по. 8. — Р. 111–122.

- 104. A. Ya. Faenov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskii et al. / Low-threshold ablation of dielectrics irradiated by picosecond soft X-ray laser pulse // Appl. Phys. Lett. - 2009. - Vol. 94. - P. 231107.
- 105. N. A. Inogamov, A. Ya. Faenov, V. A. Khokhlov et al. / Spallative Ablation of Metals and Dielectrics // Contrib. Plasma Phys. - 2009. - Vol. 49, no. 7-8. -P. 455-466.
- 106. B. Rethfeld, D. S. Ivanov, M. E. Garcia, S. I. Anisimov / Modelling Ultrafast Laser Ablation // J. Phys. D: Appl. Phys. - 2016. - Vol. 50. - P. 193001. -Topical Review.
- 107. S. I.Anisimov, V. A.Khokhlov / § 2. Interaction of laser rediation with dielectrics. In: Instabilities in laser-matter interaction. — CRC Press, Inc., 1995. — P. 25–44.
- 108. N. A. Inogamov, A. Ya. Faenov, V. V. Zhakhovsky et al. / Two-temperature warm dense matter produced by ultrashort extreme vacuum ultraviolet- free electron laser (EUV-FEL) pulse // Contrib. Plasma Phys. - 2011. - Vol. 51, no. 5. - P. 419-426.
- 109. N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, V. V. Zhakhovsky et al. / Ablation by short optical and X-ray laser pulses // SPIE Proc. - 2010. - Vol. 7996. - P. 79960T.
- 110. Н. А. Иногамов, С. И. Анисимов, В. В. Жаховский и др. / Абляция диэлектриков под действием коротких импульсов рентгеновских плазменных лазеров и лазеров на свободных электронах // Оптический экурнал. — 2011. — Vol. 78, no. 8. — Р. 5–15. — [Inogamov, N. A.; Anisimov, S. I.; Petrov, Y. V.; et. al. J. Opt. Technol., 2011, 78, 473-480].
- 111. S. I. Anisimov, A. Yu. Faenov, N. A. Inogamov et al. / Ablation of lithium fluoride dielectric crystal by the short pulses of x-ray plasma laser and extreme ultraviolet free electron laser. // Physics of Extreme States of Matter – 2011 / Ed. by V. E. Fortov, et al. – Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia. : Chernogolovka, 2011. – March. – P. 38–41.
- 112. I. I. Sobelman, L. A. Vainshtein, E. A. Yukov / Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines. Springer Series on Atoms and Plasma. — Springer, 2007.

- 113. J. H. Rose, J. R. Smith, F. Guinea, J. Ferrante / Universal features of the equation of state of metals // Phys. Rev. B. - 1984. - Mar. - Vol. 29. -P. 2963-2969.
- 114. V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov et al. / Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // Appl. Surf. Sci. - 2009. - Vol. 255, no. 24. - P. 9592-9596.
- 115. М. Б. Агранат, С. И. Анисимов, С. И. Ашитков и др. / Прочностные свойства расплава алюминия в условиях экстремально высоких темпов растяжения при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов // Письма в ЖЭТФ. — 2010. — Vol. 91, по. 9. — Р. 517–523. — [Agranat, M. B.; Anisimov, S. I.; Ashitkov, S. I.; et. al., JETP Lett., 2010, 91, 471-477].

М. Б. Агранат, С. И. Анисимов, С. И. Ашитков и др. / Прочностные свойства расплава алюминия в условиях экстремально высоких темпов растяжения при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов // Письма в ЖЭТФ. — 2010. — Vol. 91, по. 9. — Р. 517–523. — [Agranat, M. B.; Anisimov, S. I.; Ashitkov, S. I.; et. al., JETP Lett., 2010, 91, 471-477].

- 116. В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов / Упруго-пластические явления в ультракоротких ударных волнах // Письма в ЖЭТФ. — 2010. — Vol. 92, no. 8. — Р. 574–579. — [Zhakhovskii, V. V. & Inogamov, N. A., JETP Lett., 2010, 92, 521-526].
- 117. N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, V. V. Zhakhovsky / Elastic-plastic phenomena and propagation of strong shock waves under the action of femtosecond laser pulses // Physics of Extreme States of Matter - 2011 / Ed. by V. E. Fortov, et al. - Chernogolovka, 2011. - P. 11-14.
- 118. V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, S. I. Anisimov / Elastic-plastic phenomena in shock waves caused by short laser pulses. comparison of hydrodynamic and molecular dynamics simulations. // Physics of Extreme States of Matter - 2013. / Ed. by Fortov V. E. et al.; JIHT. — Moscow, 2013. — P. 61-64.
- 119. V. S. Krasnikov, A. E. Mayer, A. P. Yalovets / Dislocation based high-rate plasticity model and its application to plate-impact and ultra short electron irradiation simulations // Int. J. Plast. - 2011. - Vol. 27, no. 8. - P. 1294-1308.

- 120. A. E. Mayer, K. V. Khishchenko, P. R. Levashov, P. N. Mayer / Modeling of plasticity and fracture of metals at shock loading // J. Appl. Phys. - 2013. -Vol. 113. - P. 193508 (7p.).
- 121. D. K. Ilnitsky, V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov et al. / Two-temperature hydrodynamics of laser-generated ultrashort shock waves in elasto-plastic solids // J. Phys.: Conf. Ser. - 2014. - Vol. 500. - P. 032021.
- 122. С. И. Ашитков, Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский и др. / Образование нанополостей в поверхностном слое алюминиевой мишени при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов // Письма в ЖЭТФ. — 2012. — Vol. 95, по. 4. — Р. 192–197. — [Ashitkov, S. I.; Inogamov, N. A.; Zhakhovskii, V. V.; et. al., JETP Lett., 2012, 95, 176–181].
- 123. С. И. Ашитков, М.Б. Агранат, Г. И. Канель и др. / Поведение алюминия вблизи предельной теоретической прочности в экспериментах с фемтосекундным лазерным воздействием // Письма в ЖЭТФ. — 2010. — Vol. 92, no. 8. — Р. 568-573. — [Agranat, M. B.; Anisimov, S. I.; Ashitkov, S. I.; et. al., JETP Lett., 2010, 91, 471-477].
- 124. V. V. Zhakhovsky, M. M. Budzevich, Nail A. Inogamov et al. / Two-Zone Elastic-Plastic Single Shock Waves in Solids // Phys. Rev. Lett. - 2011. --Vol. 107, no. 13. - P. 135502.
- 125. В. А. Хохлов, Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский и др. / Составная сверхупругая и пластическая ударная волна, вызванная коротким лазерным импульсом // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. — 2014. — Vol. 4(1). — Р. 53–59.
- 126. R. Evans, A. D. Badger, F. Fallies, et al. / Time- and Space-Resolved Optical Probing of Femtosecond-Laser-Driven Shock Waves in Aluminum // Phys. Rev. Lett. - 1996. - Vol. 77. - P. 3359-3362.
- 127. V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky et al. / Thin 10-100 nm film in contact with substrate: Dynamics after femtosecond laser irradiation // J. Phys.: Conf. Ser. - 2015. - Vol. 653. - P. 012003.

- 128. V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky et al. / Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation // AIP Conf. proc. - 2017. - Vol. 1793. - P. 100038 - 1-8.
- 129. J. Wang, C. Guo / Non-equilibrium electronic Grüneisen parameter // Appl. Phys. A. - 2013. - Vol. 111. - P. 273-277.
- 130. V. A. Khokhlov, S. I. Ashitkov, N. A. Inogamov et al. / Laser ablation of a multilayer target with layers of nanometer thickness // J. Phys.: Conf. Ser. – 2021. – Vol. 1787. – P. 012022.
- 131. С. А. Ромашевский, В. А. Хохлов, С. И. Ашитков и др. / Фемтосекундное лазерное воздействие на многослойную наноструктуру металл-металл // Писъма в ЖЭТФ. – 2021. – Vol. 113, по. 3. – Р. 311–319. – [Romashevskiy, S. A.; Khokhlov, V. A.; Ashitkov, et. al., JETP Letters, 2021, 113, 308-316].
- 132. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, С. И. Ашитков и др. / О наноотколе после воздействия ультракороткого лазерного импульса // ЖЭТФ. – 2008. – Vol. 134, по. 1. – Р. 5–28. – [Inogamov, N. A.; Zhakhovskii, V. V.; Ashitkov, S. I.; et. al., JETP, 2008, 107, 1-19].
- 133. L. V. Zhigilei, Zh, Lin, D. S. Ivanov / Atomistic Modeling of Short Pulse Laser Ablation of Metals: Connections between Melting, Spallation, and Phase Explosion // J. Phys. Chem. C. - 2009. - Vol. 113, no. 27. - P. 11892-11906.
- 134. B. Gaković, G. D. Tsibidis, E. Skoulas et al. / Partial ablation of Ti/Al nano-layer thin film by single femtosecond laser pulse // J. Appl. Phys. – 2017. – Vol. 122. – P. 223106.
- 135. S. A. Romashevskiy, P. A. Tsygankov, S. I. Ashitkov, M. B. Agranat / Layer-by-layer modification of thin-film metal-semiconductor multilayers with ultrashort laser pulses // Appl. Phys. A. - 2018. - Vol. 124. - P. 376.
- 136. S. I. Kudryashov, B. Gakovic, P. A. Danilov et al. / Single-shot selective femtosecond laser ablation of multi-layered Ti/Al and Ni/Ti films: "Cascaded" heat conduction and interfacial thermal effects // Appl. Phys. Lett. - 2018. - Vol. 112, no. 2. - P. 023103.

- 137. D. S. Ivanov, L. V. Zhigilei / Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68. – P. 064114.
- 138. B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, I. I. Oleynik / Ablation and spallation of gold films irradiated by ultrashort laser pulses // Phys. Rev. B. - 2010. - Vol. 82. - P. 064113.
- 139. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов / Струеобразование при отрыве металлической пленки от подложки в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса // ЖЭТФ. — 2015. — Vol. 147. — P. 20-56. [Inogamov, N. A.; Zhakhovskii, V. V. & Khokhlov, V. A., JETP, 2015, 120, 15-48]
- 140. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, В. В. Шепелев / Сверхупругость и распространение ударных волн в кристаллах // Письма в ЖЭТФ. 2011. Vol. 93, по. 4. Р. 245–251. [Inogamov, N. A.; Zhakhovskii, V. V.; Khokhlov, V. A. & Shepelev, V. V., JETP Lett., 2011, 93, 226–232].
- 141. D. Zhang, B. Gokce, S. Barcikowski / Laser Synthesis and Processing of Colloids: Fundamentals and Applications // Chem, Rev. 2017. Vol. 117. P. 3990-4103. -
- 142. J. Xiao, P. Liu, C. X. Wang, G. W. Yang et. al. / External field-assisted laser ablation in liquid: An efficient strategy for nanocrystal synthesis and nanostructure assembly // Progress in Materials Science. - 2017. - Vol. 87. -P. 140 - 220.
- 143. S. Kudryashov, A. Samokhvalov, A. Nastulyavichus, et. al. / Nanosecond-Laser Generation of Nanoparticles in Liquids: From Ablation through Bubble Dynamics to Nanoparticle Yield // Materials. — 2019. — Vol. 12. — P. 562.
- 144. А. А.Настулявичус, С. И. Кудряшов, А. М. Емельяненко, Л. Б. Бойнович. / Лазерная генерация коллоидных наночастиц в жидкостях: ключевые процессы лазерного диспергирования и основные характеристики наночастиц // Коллоидный журнал. — 2023. — Vol. 85, по. 2. — Р. 200–218. — [A. A. Nastulyavichus, S. I. Kudryashov, A. M. Emelyanenko & L. B. Boinovich. Colloid J 85, 233–250 (2023)].

- 145. D. Karthik, S. Swaroop / Laser peening without coating-an advanced surface treatment: A review // Mater. Manuf. Processes. — 2017. — Vol. 32, no. 14. — P. 1565.
- 146. S. V. Starinskiy, Yu. G. Shukhov, A. V.Bulgakov / Laser-induced damage thresholds of gold, silver and their alloys in air and water // Appl. Surf. Sci. – 2017. – Vol. 396. – P. 1765–1774.
- 147. S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov et al. / Physical processes in laser ablation into liquid and laser shock wave pinning // J. Phys.: Conf. Ser. - 2020. - Vol. 1556. - P. 012004.
- 148. R. Fabbro, J. Fournier, P. Ballard et al. / *Physical study of laser-produced plasma in confined geometry* // J. Appl. Phys. 1990. Vol. 68, no. 2. P. 775-84.
- 149. Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov / Hydrodynamic phenomena induced by laser ablation of metal into liquid // Appl. Surf. Sci. - 2019. - Vol. 492. - P. 285-297.
- 150. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов / Динамика абляции золота в воду // ЖЭТФ. — 2018. — Vol. 154, по. 1(7). — Р. 92–123. — [N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, V.A. Khokhlov, JETP 127(1), 79-106 (2018)].
- 151. J. Lam, J. Lombard, C. Dujardin et al. / Dynamical study of bubble expansion following laser ablation in liquids // Appl. Phys. Lett. - 2016. - Vol. 108, no. 7. - P. 074104.
- 152. A. Nastulyavichus, N. Smirnov, & S.Kudryashov / Quantitative evaluation of LAL productivity of colloidalnanomaterials: Which laser pulse width is moreproductive, ergonomic, and economic? // Chin. Phys. B, - 2022. - Vol. 31. -P. 077803.
- 153. M. E. Povarnitsyn, T. E. Itina, P. R. Levashov, K. V. Khishchenko / Mechanisms of nanoparticle formation by ultra-short laser ablation of metals in liquid environment // Phys. Chem. Chem. Phys. - 2013. - Vol. 15. - P. 3108-3114.
- 154. M. E. Povarnitsyn, T. E. Itina / Hydrodynamic modeling of femtosecond laser ablation of metals in vacuum and in liquid // Appl. Phys. A. - 2014. - Vol. 117, no. 1. - P. 175-178.
- 155. C.-Yu Shih, M. V. Shugaev, C. Wu, L. V. Zhigilei / Generation of Subsurface Voids, Incubation Effect, and Formation of Nanoparticles in Short Pulse Laser Interactions with Bulk Metal Targets in Liquid: Molecular Dynamics Study // J. Phys. Chem. C. - 2017. - Vol. 121, no. 30. - P. 16549-16567.
- 156. C.-Yu Shih, R. Streubel, J. Heberle et al. / Two mechanisms of nanoparticle generation in picosecond laser ablation in liquids: the origin of the bimodal size distribution // Nanoscale. - 2018. - Vol. 10. - P. 6900-6910.
- 157. N. Inogamov, V. Zhakhovsky, V. Khokhlov / Laser ablation of metal into liquid: Near critical point phenomena and hydrodynamic instability // AIP Conf. Proc. - 2018. - Vol. 1979. - P. 190001 - 1-6.
- 158. D. S. Ivanov, A. Blumenstein, J. Ihlemann et. al. / Molecular dynamics modeling of periodic nanostructuring of metals with a short UV laser pulse under spatial confinement by a water layer // Appl. Phys. A. 2017. Vol. 123. P. 744.
- 159. N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, V. V. Zhakhovsky / Hydrodynamic and molecular-dynamics modeling of laser ablation in liquid: from surface melting till bubble formation // Opt Quant Electron. - 2020. --Vol. 52. - P. 63.
- 160. C.-Yu Shih, M. V. Shugaev, C. Wu, L. V. Zhigilei / The effect of pulse duration on nanoparticle generation in pulsed laser ablation in liquids: insights from large-scale atomistic simulations // Phys. Chem. Chem. Phys. - 2020. --Vol. 22. - P. 7077-7099.
- 161. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов / Физические процессы при лазерной абляции в жидкость // Письма в ЖЭТФ. 2022. Vol. 115, по. 1. Р. 20–27. Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V. & Khokhlov, V. A. JETP Lett., 2022, 115, 16-22.
- 162. R. I. Nigmatulin, R. K. Bolotnova / Wide-range equation of state of water and steam: Simplified form // High Temperature. - 2011. - Vol. 49. - P. 303-306.
- 163. S. I. Kudryashov, I. N. Saraeva, V. N. Lednev, et. al. / Single-shot femtosecond laser ablation of gold surface in air and isopropyl alcohol // Appl. Phys. Lett., - 2018. - Vol. 112. - P. 203101.

- 164. I. Saraeva, S. Kudryashov, A. Rudenko, et. al. / Effect of fs/ps laser pulsewidth on ablation of metals and silicon in air and liquids, and on their nanoparticle yields // Appl. Surf. Sci. - 2019. - Vol. 470. - P. 1018-1034.
- 165. K. P. Migdal, Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov / Kinetic coefficients for d-band metals in two-temperature states created by femtosecond laser irradiation // Proc. SPIE. - 2013. - Vol. 9065. - P. 906503,1-20.
- 166. B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, I. I. Oleynik / Ultrashort shock waves in nickel induced by femtosecond laser pulses // Phys. Rev. B. – 2013. – Vol. 87, no. 5. – P. 054109.
- 167. J. Arons, S. M. Lea / Accretion onto Magnetized Neutron Stars: Structure and Inter- change Instability of a Model Magnetosphere // Astrophys. J. 207, Pt. 1, 914. - 1976.
- 168. N. A. Inogamov / The role of Rayleigh-Taylor and Richtmyer-Meshkov Instabilities in Astrophysics: an Introduction // Astrophys. and Space Phys. Rev. – 1999. – Vol. 10 (Pt.2), no. 4-6. – P. 1–335.
- 169. M. J. Church, N. A. Inogamov, M. Balucińska-Church / A comparison of neutron star blackbody luminosities in LMXB with the theory of accretion flow spreading on the stellar surface // Astron. Astrophys. - 2002. - Vol. 390, no. 1. - P. 139-146.
- 170. Н. А. Иногамов, Р. А. Сюняев / Сверхмассивная черная дыра в эллиптической галактике: аккреция горячего газа с малым, но конечным угловым моментом // Письма в Астрон. Ж. 2010. Vol. 36(12). Р. 883–895. [Inogamov, N. & Sunyaev, R., Astronomy Lett., 2010, 36, 835-847].
- 171. F. Fraschetti, R. Teyssier, J. Ballet, A. Decourchelle / Simulation of the growth of the 3D Rayleigh-Taylor instability in supernova remnants using an expanding reference frame // Astron. Astrophys. - 2010. - Vol. 515. - P. A104.
- 172. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц *ГИДРОДИНАМИКА.* М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1986. — *ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА*, Т. VI

- 173. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, А. Ю. Демьянов и др. / О стохастическом перемешивании, вызванном неустойчивостью Рэлея-Тейлора // ЖЭТФ. 2001. Vol. 119(4), по. 4. Р. 822–852. [Inogamov, N. А.; Oparin, A. M.; Dem'yanov, A. Y.; et. al., J Exp Theor Phys, 2001, 92(4), 715-743].
- 174. G. Dimonte, D. L. Youngs, A. Dimits et al. / A comparative study of the turbulent Rayleigh-Taylor instability using high-resolution three-dimensional numerical simulations: the Alpha-Group collaboration // Physics of Fluids. – 2004. – Vol. 16 (5). – P. 1668–1693.
- 175. K. O.Mikaelian / Rayleigh-Taylor instability in finite-thickness fluids with viscosity and surface tension // Phys. Rev. E. 1996. Oct. Vol. 54. P. 3676-3680.
- 176. E. B. Webb, III, G. S. Grest / Liquid/Vapor Surface Tension of Metals: Embedded Atom Method with Charge Gradient Corrections // Phys. Rev. Lett. – 2001. – Vol. 86, no. 10. – P. 2066–2069.
- 177. А. А. Ионин, С. И. Кудряшов, А. О. Левченко и др. / Гидродинамическая неустойчивость и самоорганизация субмикронного рельефа поверхности металлов при фемтосскундном лазерном облучении в жидкости // Письма в ЖЭТФ. — 2017. — Vol. 106, по. 4. — Р. 247–251. — [Ionin, A. A.; Kudryashov, S. I.; Levchenko, A. O; et. al., Jetp Lett., 2017, 106, 268-271].
- 178. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин / О трехмерных сетчатых структурах, связанных с неустойчивостями Рихтмайера-Мешкова и Рэлея-Тейлора // ЖЭТФ. — 1999. — Vol. 116(3). — Р. 908–939.
- 179. V. Zhakhovsky, K. Nishihara, Y. Fukuda et al. / A new dynamical domain decomposition method for parallel molecular dynamics simulation // IEEE Proc 5th Int Symp Clust Comput Grid (CCGrid 2005) - Vol. 2. - 2005. -06. - P. 848-854.
- 180. V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky / Laser ablation in liquid: Heating, diffusion, and condensation // J. Phys.: Conf. Ser. - 2020. - Vol. 1556. - P. 012003.

- 181. M. E. Povarnitsyn, T. E. Itina / Hydrodynamic modeling of femtosecond laser ablation of metals in vacuum and in liquid // Appl. Phys. A. - 2014. - Vol. 117, no. 1. - P. 175-178.
- 182. N. A. Inogamov, S. I. Ashitkov, V. V. Zhakhovskii, et. al. / Acoustic probing of two-temperature relaxation initiated by action of ultrashort laser pulse // Appl. Phys. A. - 2010. - Vol. 101. - P. 1-5.
- 183. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, S. I. Ashitkov et al. / Laser Acoustic Probing of Two-Temperature Zone Created by Femtosecond Pulse // Contrib. Plasma Phys. - 2011. - Vol. 51, no. 4. - P. 367-374.
- 184. Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, V. A. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov / Condensation of laser-produced gold plasma during expansion and cooling in a water environment // Contrib. Plasma Phys. — 2019. — Vol. 59, no. 6. — P. 3e201800180.