

Шепелев Вадим Владимирович

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ С
МЕТАЛЛАМИ**

Специальность 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2011

Работа выполнена в Институте Автоматизации Проектирования РАН

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Олег Валентинович Трошкин

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Владимир Иванович Мажукин

кандидат физико-математических наук,
Андрей Викторович Конюхов

Ведущая организация: Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН

Защита состоится «___» _____ 2011 г. в ___ часов на заседании
Диссертационного совета Д 002.024.03 при Институте Прикладной математики
им. М.В. Келдыша РАН по адресу: 125047, г. Москва, Миусская пл. д 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института Прикладной математики
им. М.В. Келдыша РАН.

Автореферат разослан «___» _____ 2011 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.024.03
доктор физико-математических наук

Н.В. Змитренко

I. Общая характеристика работы

Диссертация посвящена численному моделированию взаимодействия единичных фемтосекундных лазерных импульсов с металлами.

I.1. Актуальность темы

Лазеры с ультракоротким импульсом – это важнейший инструмент научных исследований и современных технологий. В числе технологических областей применения лазеров с ультракоротким импульсом могут быть названы, создание наноструктур на поверхности вещества, в том числе, создание микрорельефов на поверхности полупроводников, напыление тонких пленок, производство оптических метаматериалов, микрохирургия клеток биологических тканей в медицине. Рынок одних только медицинских лазеров в США составляет миллиарды долларов в год.

Помимо технологических приложений, отдельной и сравнительно молодой является физика взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с веществом. Эта область науки находится сейчас на стадии быстрого роста и развития.

Ультракороткие лазерные импульсы – новый и перспективный инструмент. Воздействие ультракоротких лазерных импульсов на вещество весьма специфично. В результате воздействия тонкий поверхностный слой вещества облученной мишени переходит в двухтемпературное состояние. В этом состоянии электронная подсистема металла сильно перегрета относительно кристаллической решетки. Продолжительность этого состояния ограничена во времени и определяется временем двухтемпературной релаксации, которая продолжается от 2 до 20 пс в зависимости от конкретного металла.

Ультракороткие лазерные импульсы с успехом используются как способ генерации мощных ударных волн в материале. Это позволяет определять уравнения термодинамического состояния вещества.

Обозначенным вопросам посвящаются международные научные конференции, например, конференция COLA (Conference on Laser Ablation), посвященная фундаментальным и прикладным вопросам взаимодействия лазерного излучения с веществом.

I.2. Цели и задачи работы

Целью работы является создание, описание и реализация математической модели, позволяющей осуществлять численные эксперименты в задачах по исследованию

взаимодействия единичных фемтосекундных лазерных импульсов с металлами при различных начальных данных.

Программный код, созданный на основе описываемой модели используется для проведения численных экспериментов по моделированию процессов, происходящих при облучении алюминиевых пленок фемтосекундными лазерными импульсами.

Результаты численных экспериментов, основанных на настоящей модели, сравниваются в работе с экспериментальными данными.

Программный код, созданный на основе описываемой модели, может также эффективно использоваться для измерения и уточнения значений малоизвестных параметров облучаемых металлов: коэффициента электронно-ионной релаксации α_{ei} и коэффициента двухтемпературной теплопроводности K_{2T} .

I.3. Научная новизна

Научная новизна настоящей работы состоит в следующем:

1. Впервые проведен систематический анализ акустического сигнала, возникающего в результате воздействия ультракороткого лазерного импульса на металл. Выделены стадии формирования и распространения акустического сигнала:

- рост давления под действием быстрого нагрева лазерным импульсом;
- распространение волны вглубь вещества одновременно с отражением от границы мишени;
- опрокидывание нелинейной волны с образованием ударной волны.

Удивительно, что в изучаемом нами эффекте имеет место именно этот классический, хорошо изученный и многократно описанный в классических трудах по гидродинамике механизм образования ударной волны – в очень маленьких масштабах, всего лишь порядка сотен нанометров.

2. Учитывается влияние процесса плавления твердого тела на форму акустического сигнала, который распространяется в толщу металла из слоя лазерного нагрева. Сигнал в виде волны сжатия, бегущей от нагреваемой границы металла, возникает вследствие акустического распада зоны высокого давления, формирующейся возле облученной границы. В результате распада возникает Римановская волна, распространяющаяся от границы. Повышение давления в этой зоне вызвано ее быстрым нагревом под действием поглощения лазерной энергии и электронного теплопереноса. Профиль распределения температуры после двухтемпературной релаксации имеет плавную форму, складывающуюся в результате электронного

теплопереноса. Тогда как термодинамические функции имеют скачки на линиях на фазовой плоскости, ограничивающих область плавления. Эти линии называются солидус и ликвидус. Внутри этих линий находится двухфазная смесь из зародышей жидкой фазы в матрице твердого тела. Из-за этих скачков появляются особенности на профиле Римановской волны сжатия. Проведенные в диссертации расчеты показывают, что эти особенности ускоряют опрокидывание Римановской волны. Как известно, опрокидывание приводит к появлению ударной волны. Таким образом, плавление влияет на профиль Римановской волны и на процесс опрокидывания.

3. Расчеты, проведенные в диссертации на основе разработанного алгоритма, позволили впервые промоделировать важный физической эксперимент, в котором фемтосекундный лазерный импульс направляется на отражающую и поглощающую поверхность металла через стеклянную пластинку. С помощью фемтосекундной диагностики характера движения тыльной границы алюминиевой пленки, напыленной на стекло, удалось измерить откольную прочность металла при чрезвычайно высоких темпах деформации (тыльной является граница пленки обратная к облучаемой греющим лазерным импульсом фронтальной границе пленки).
4. В представленной модели используется многофазное широкодиапазонное полуэмпирическое уравнение состояния, что позволяет автоматически учитывать в численном эксперименте фазовые переходы «твердое тело – жидкость» и «испарение – конденсированная фаза» без выделения фронтов плавления и испарения в численном алгоритме сквозного счета.
5. В разработанный алгоритм адаптирована современная модель двухтемпературной электронной теплопроводности. Модель пригодна в интересующем нас диапазоне температур.
6. Произведены расчеты в широком диапазоне энергий: от порога плавления металла и до больших энергий, при которых образуется быстро разлетающаяся плазменная корона.

I.4. Научная и практическая ценность

В настоящей работе представлена физическо-математическая модель и созданный на ее основе гидродинамический код для проведения вычислительных экспериментов в

области численного моделирования взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с металлами.

Как было отмечено выше, физика ультракоротких лазерных импульсов является важной и востребованной в современном мире областью знания. Однако при этом средства, предоставляемые лучшими имеющимися способами экспериментальной диагностики очень скудны. Ни одна из двух наиболее известных в настоящее время методик диагностики процессов, «pump-probe» и масс-спектрометрии, не дает полной информации о быстропротекающих процессах, возникающих в экспериментах с фемтосекундными лазерами. «Pump-probe» – высокоточный метод, но он позволяет получить значения лишь оптических параметров, не давая информации о «кухне» процесса – профилей температуры, давления, плотности, а также требует наличия резкой отражающей границы. Изучение же ионного состава лазерного факела с помощью масс-спектроанализатора позволяет измерить интегральные характеристики абляционного облака, но не дает представления о процессе в динамике.

Таким образом, при изучении такого тонкого и быстропротекающего процесса, каким является взаимодействие ультракороткого лазерного импульса с веществом, исследователь получает на выходе только небольшой набор параметров, по которым невозможно сделать окончательных выводов. Возникает проблема интерпретации, и аналитические подходы позволяют получать лишь грубые оценки.

Поэтому необходимыми являются вычислительные модели и коды, дающие возможность смоделировать процесс под заданные условия в широком диапазоне начальных данных и действовать совместно с экспериментальными измерениями. Представленная в настоящей работе модель и код решают эту сложную и востребованную задачу.

I.5. Апробация работы

Материалы настоящей работы докладывались на семинарах и конференциях:

- Семинар ИММ РАН 20.10.2009 г.;
- Japan-Russia Symposium on “Numerical Experiment in Hydrodynamical Instability and Turbulence with High-Performance Computing”, Москва, 2009 г.
- 7th International Seminar on Mathematical Models and Modeling in Laser-Plasma Processes.

I.6. Объем и структура диссертации

Диссертация состоит из трех глав, вводной части, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет ___ страниц, включая ___ рисунков.

I.7. Публикации

Основные результаты по теме диссертации опубликованы в 12 работах, размещенных в конце реферата.

II. Содержание работы

Во введении представлено краткое содержание работы и обоснование ее актуальности, сформулированы цели работы. Проводится обзор литературы по методам моделирования взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с веществом за последние десятилетия.

Первая глава диссертации посвящена описанию математической модели, используемой для численного моделирования взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с металлами.

Интересующие нас процессы происходят в масштабах сотен нанометров в глубину вещества, при этом порядок размера лазерного пятна на поверхности пленки значительно больше, он составляет десятки микрон. Вследствие такого соотношения величин мы можем при рассмотрении пользоваться квазиодномерным приближением.

Рассматривается одномерная система уравнений гидродинамики [1], основанная на двухтемпературной модели [2]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\rho} \right) - \frac{\partial v}{\partial m} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial m} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_e}{\partial t} + P_e \frac{\partial v}{\partial m} = \frac{\partial}{\partial m} \left(\kappa \rho \frac{\partial T_e}{\partial m} \right) - \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i) + J_L \quad (3)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} + P_i \frac{\partial v}{\partial m} = \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i) \quad (4)$$

где ρ – массовая плотность вещества, $\rho_0 = 2700 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ – плотность алюминия при

нормальных условиях;

v – гидродинамическая скорость вещества;

P_i, P_e, P – ионное, электронное и полное давление смеси, $P = P_i + P_e$;

$\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_e, \mathcal{E}$ – удельная электронная, ионная и полная энергия смеси, $\mathcal{E} = \mathcal{E}_i + \mathcal{E}_e$;

T_i, T_e – ионная и электронная температуры.

m – Лагранжева массовая переменная, $dm = \rho dx$, $m = \int_{x_0}^x \rho dx$;

t – время;

K – коэффициент электронной теплопроводности в двухфазной двухтемпературной среде [3];

$\alpha_{ei} = 36 \cdot 10^{16} \cdot \frac{\rho}{\rho_0} \frac{Дж}{с \cdot К \cdot м^3}$ – коэффициент электронно-ионной релаксации [4].

$J_L = \frac{F_{abs}}{\tau_L \delta \sqrt{\pi} \rho} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau_L^2}\right) \exp\left(-\frac{x(m,t) - x(m_0,t)}{\delta}\right)$ – плотность потока лазерного

излучения, где:

F_{abs} – удельная энергия излучения, поглощенная единицей поверхности вещества (т.н. поглощенный флюенс);

$\delta = 10 нм$ – толщина скин-слоя;

$x(m,t)$ – траектория лагранжевой частицы с значением лагранжевой координаты m ;

τ_L – длительность лазерного импульса.

В модели учитываются процессы двухтемпературной гидродинамики, электронной теплопроводности, электронно-ионной релаксации и поглощения лазерного излучения электронной подсистемой металла. Вязкостью и ионной теплопроводностью пренебрегаем.

В расчетах используются отдельные уравнения состояния для электронной и ионной подсистем металла. Для ионной подсистемы берется табличное полуэмпирическое многофазное уравнение состояния [5]. Для электронной подсистемы используется уравнение состояния Ферми-газа [6].

На рис. 1 показаны три различные физические постановки задачи, соответствующие трем рассматриваемым в настоящей работе классам экспериментов. Начальные условия в каждом случае нормальные, комнатная температура и нормальная плотность:

$$T_{0,AI} = 300K, \rho_0 = 2700 \frac{кг}{см^3}, v_0 = 0.$$

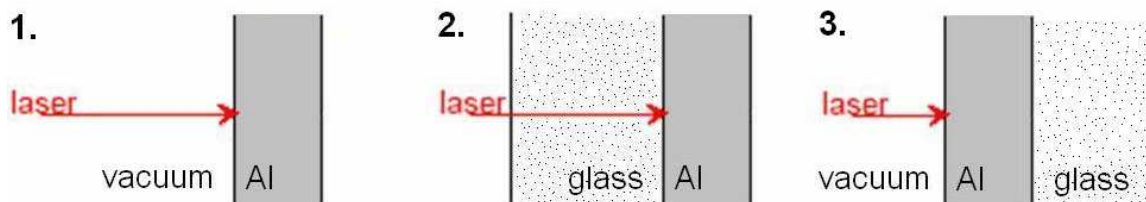


Рис. 1 Три конфигурации облучаемых образцов для трех различных классов экспериментов: 1. Лазерное излучение падает на поверхность пленки в вакууме. 2. Излучение падает на пленку, проходя сначала сквозь толстую стеклянную подложку, пленка закреплена с фронтальной стороны. 3. Излучение падает на пленку, закрепленную на стеклянной подложке с тыльной стороны.

В первом случае «**вакуум-алюминий-вакуум**» рассматривается облучение лазерным импульсом металлической пленки в вакууме и происходящие при этом процессы (лазерная абляция). Луч лазера при этом падает на свободную границу пленки. Экспериментальное наблюдение ведется за фронтальной (левой) границей пленки.

Расчеты в этой постановке производятся для различных конфигураций начальных условий. Ключевые параметры: толщина пленки d_{Al} , поглощенный флюенс F_{abs} , длительность лазерной вспышки τ_L . Слева и справа ставятся граничные условия на давление

$$P_L = P_R = 0,$$

а также условия на нулевой теплоток через границы:

$$\left. \frac{\partial T_e}{\partial m} \right|_L = \left. \frac{\partial T_e}{\partial m} \right|_R = 0.$$

Во втором случае «**стекло-алюминий-вакуум**» рассматривается задача о расширении в вакуум алюминиевой пленки, напыленной на стеклянную подложку. Ключевым отличием этой постановки от первой является то, что лазерный луч перед тем, как попасть на пленку, проходит сквозь стекло.

Вычислительная область разбивается на две подобласти: алюминий и стекло. Для стекла используется то же уравнение состояния, что и для алюминия, отражением от границы «стекло- алюминий» пренебрегаем. Отличие расчетов в подобластях с алюминием и стеклом состоит в том, что в стекле отсутствует электронная теплопроводность. Экспериментальными методами ведется наблюдение за правой границей.

Расчеты производились для конфигураций в диапазоне толщин алюминиевой пленки d_{Al} от 350 до 1200 нм, точно такими же, как и в реальных экспериментах. Толщина же стеклянной подложки d_{glass} на практике достаточно велика, порядка нескольких микрон.

Для численного моделирования достаточно взять d_{glass} в 2-3 раза больше, чем d_{Al} , чтобы за интересующий нас в численном эксперименте промежуток времени возмущение, вызванное поглощением импульса на границе «стекло-алюминий», не успело отразиться

от другой границы стекла и вернуться. Флюенс $F_{abs} = 1300 \frac{Дж}{м^2}$, длительность

вспышки $\tau_L = 150 \text{ фс}$ для всех толщин облучаемых пленок. Слева и справа ставятся граничные условия на давление

$$P_L = P_R = 0,$$

а условия на нулевой теплоток через границы выглядят так:

$$\left. \frac{\partial T_e}{\partial m} \right|_{Al-glass} = \left. \frac{\partial T_e}{\partial m} \right|_R = 0,$$

где $\left. \frac{\partial T_e}{\partial m} \right|_{glass-Al}$ – градиент температуры через границу «стекло-алюминий». Процесс

электронной теплопроводности происходит только в алюминии, т.к. стекло является диэлектриком, поэтому левое граничное условие ставится на границе «алюминий-стекло».

Во третьем случае «**вакуум-алюминий-стекло**» луч также падает на свободную границу пленки. Эта конфигурация отличается тем, что здесь нас интересует траектория границы «алюминий-стекло», и наблюдение ведется именно за ней, как в реальном эксперименте, так и в численном.

Как и в первой постановке, слева и справа ставятся граничные условия на давление

$$P_L = P_R = 0.$$

Теплопроводность в стекле отключать здесь нет необходимости, поскольку нас интересует движение граничной точки в моменты, когда тепловая волна до стекла еще не доходит. Поэтому нам достаточно задать условия на теплоток через границы всей системы

$$\left. \frac{\partial T_e}{\partial m} \right|_L = \left. \frac{\partial T_e}{\partial m} \right|_R = 0.$$

Вторая глава посвящена детальному описанию используемой вычислительной модели и построенного численного алгоритма сквозного счета. Для численного решения системы (1)-(4) используется метод расщепления по физическим процессам, и в результате численный алгоритм разбивается на три этапа.

На первом вычислительном этапе рассматриваются уравнения гидродинамики с учетом поглощения металлом лазерного излучения. Для решения уравнений первого этапа используется метод, представляющий собой модификацию неявной полностью консервативной конечно-разностной схемы Самарского с наивысшим для данного семейства схем (вторым) порядком точности [7], адаптированной для двухтемпературной задачи. Достоинством выбранного метода является то, что он, в отличие от многих современных алгоритмов, не требует гиперболичности уравнений гидродинамики в каждой точке расчетной сетки, и поэтому позволяет вести сквозной счет, не требуя коррекции, в том числе и в метастабильных зонах вещества, где величина $\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_S$ становится отрицательной.

На втором вычислительном этапе решается уравнение электронной теплопроводности с помощью конечно-разностной схемы, построенной хорошо известным интегро-интерполяционным методом, описанным в [7].

На третьем вычислительном этапе решается система обыкновенных дифференциальных уравнений электронно-ионного обмена с помощью простейшей разностной схемы.

В третьей главе представлены результаты численного моделирования облучения алюминия единичными фемтосекундными лазерными импульсами. Исследуются процессы, происходящие при облучении пленки в трех перечисленных выше постановках.

Для случая «**вакуум-алюминий-вакуум**» известно, что при облучении пленки лазерным импульсом субпикосекундного диапазона или более коротким импульсом возникает особый режим лазерной абляции, так называемая откольная абляция. Сам по себе процесс лазерной абляции, т.е., уноса, испарения вещества с поверхности образца благодаря действию лазера, происходит при любой мощности входного импульса. Специфика откольного режима по сравнению с обычным заключается в двух вещах. Во-первых, при отколе уносится гораздо больше вещества: в эксперименте при переходе в соответствующий диапазон поглощенной энергии масса унесенного вещества скачком возрастает на несколько порядков. А во-вторых, при откольной абляции в определенный

момент времени от поверхности мишени отделяются не маленькие порции испаренного вещества, а целое жидкое образование, называемое откольной пластиной.

Явление откольной абляции было впервые открыто в оптических экспериментах с металлами и диэлектриками, описанных в [8], а впоследствии описано и объяснено в [9]-[10].

Откол может существовать при условии на поглощенный флюенс $F_{abs} > F_a$, где флюенс F_a называется порогом абляции. При более низких энергиях абляция происходит в обычном, безоткольном режиме.

В первой задаче, рассматриваемой в настоящей работе, произведены численные эксперименты для данной постановки при различных значениях поглощенного флюенса. Определению подлежат значения порогового флюенса, момента времени, в который происходит откол и глубина кратера, образующегося при абляции. Полученное в расчетах пороговое значение поглощенного флюенса составляет $F_{abs}^{tr} = 915 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}$. При флюенсах, больших порогового, абляция происходит в откольном режиме, а при расчетах с меньшим значением флюенса откол не наблюдается. На Рис.1-2 показаны профили давления и плотности для абляции в откольном режиме с флюенсом, равным пороговому, $915 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}$. Откол происходит в момент времени 41 пс , глубина кратера составляет 33 нм . Согласно [11], молекулярно-динамическое моделирование дает пороговый флюенс $600 - 650 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}$ в зависимости от выбранного потенциала взаимодействия и глубину кратера 48 нм , а эксперимент – флюенс $640 - 700 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}$ и глубину кратера 50 нм , то есть, согласование удовлетворительное.

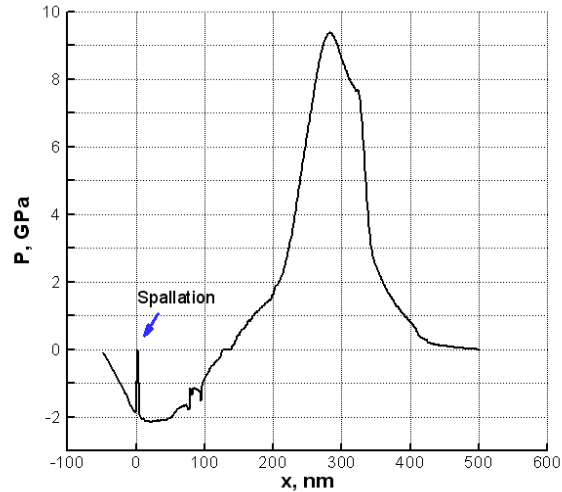


Рис.2 Профиль давления при откольной абляции алюминиевой пленки в момент откола.

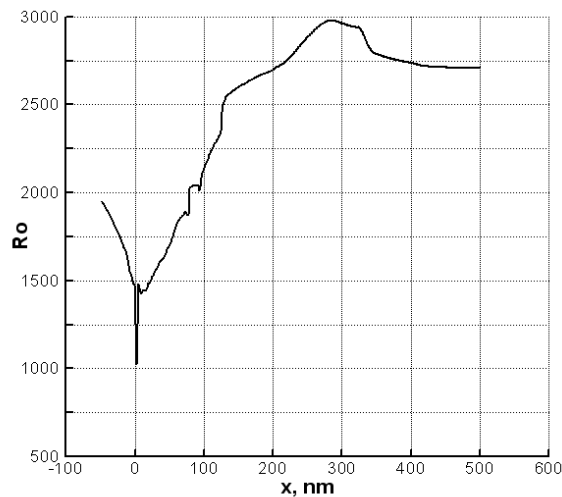


Рис.3 Профиль плотности при откольной абляции алюминиевой пленки в момент откола.

На рисунках мы видим, что, хотя давление в точке откола скачком обращается в нуль, скачок плотности не достает до нуля, останавливаясь на плотности около $1000 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$. Этот эффект вызван тем, что в области малых давлений и плотностей в табличном уравнении состояния «срезана» немонотонность: давление обращается в нуль не при нулевой плотности, а при пороговом значении около $1000 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$. Это сделано авторами табличного уравнения состояния для удобства численных расчетов по методам, которые явно или неявно задействуют скорость звука в веществе – в этом случае квадрат скорости

звука в зоне неустойчивости оказался бы отрицательной величиной. Используемый в настоящей работе численный метод не содержит ни явной, ни неявной зависимости от скорости звука, и специальной коррекции уравнения состояния не требуется. Автор полагает, что точность расчетов можно сильно увеличить, если удастся получить доступ к более точному табличному уравнению состояния. Также по всей видимости именно этой неточностью вызвана относительно большая погрешность в определении момента времени, в который происходит откол, порогового поглощенного флюенса и ширины откольной пластины.

Следующий численный эксперимент в постановке «алюминий-вакуум» проводился для задачи, описанной в [12], в которой поглощенный флюенс существенно превышал порог абляции: $F_{abs} = 25610 \frac{Дж}{м^2}$. Справа от алюминиевой пленки располагалась стеклянная подложка, и экспериментально велось наблюдение за задней (соседней со стеклом) границей пленки с помощью метода рипр-пробе, измерялся сдвиг фазы в луче, отраженном от граничной точки. Толщина пленки составляла 400 нм.

На рис. 4 показана траектория границы пленки со стеклом, рассчитанная с помощью настоящей модели, в сравнении с экспериментальной кривой. Значения сдвига границы пленки со стеклом были получены из данных эксперимента [12] с помощью известной формулы:

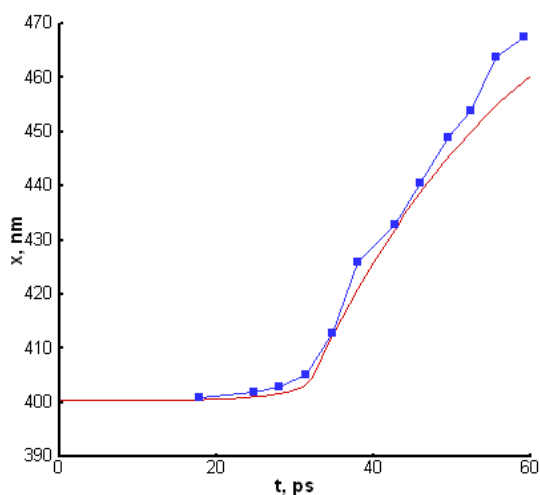


Рис.4 Расчитанная с помощью вычислительного эксперимента (плавная линия) и экспериментальная (точки, соединенные ломаной) траектории граничной точки для пленки толщиной 400 нм.

$$h = \frac{\lambda_{probe} \psi}{4\pi N_{ref}}, \text{ где } \lambda_{probe} = 800 \text{ нм} - \text{длина probe-импульса, } \psi - \text{сдвиг фазы,}$$

$N_{ref} = 1.45332$ – показатель преломления стекла.

Обнаружено хорошее согласование с экспериментом, что подтверждает правильность модели и параметров, заложенных в нее, в том числе, и при больших значениях энергии.

В случае «стекло-алюминий-вакуум» лазерное излучение проходит сквозь стекло и поглощается в поверхностном слое пленки около границы «пленка-стекло».

Процесс, происходящий при облучении пленки, можно условно разделить на две стадии: двухтемпературную (2Т) и следующую за ней однотемпературную (1Т).

В начале 2Т-стадии поглощение ультракороткого лазерного импульса электронной подсистемой алюминиевой пленки приводит к образованию двухтемпературного слоя, в котором вещество находится в состоянии WDM (warm dense matter, «теплое плотное вещество»). Это состояние характеризуется твердотельной плотностью при температурах порядка 1 эВ. На 2Т-этапе в состоянии WDM электронная температура значительно больше ионной, поскольку практически вся энергия импульса поглощена электронами.

Ширина двухтемпературного слоя d_T составляет несколько десятков нанометров. За счет электронной теплопроводности и электронно-ионной релаксации ионы а) разогреваются до температур, превышающих температуру плавления и б) тепловая волна и фронт плавления продвигаются вглубь d_T -слоя со скоростью намного выше звуковой

(порядок звуковой скорости в алюминии $c \approx 6000 \frac{м}{с}$). Об этом явлении говорят как о

«сверхзвуковом нагреве» и неравновесном объемном плавлении алюминия в 2Т-слое.

Плавка происходит за счет образования зародышей жидкой фазы в двухфазной области внутри 2Т-слоя. Весь процесс от начала поглощения импульса пленкой до полного выравнивания электронной и ионной температур в 2Т-слое можно назвать первой, двухтемпературной (2Т) стадией процесса, при которой происходит нагрузка, т.е. вещество в 2Т-слое оказывается в состоянии с большим давлением при плотности, примерно равной плотности вещества при комнатной температуре.

На второй, однотемпературной (1Т) стадии мы имеем дело с медленной равновесной, «дозвуковой» плавкой металла и распространением звуковой волны. Весь гидродинамический процесс на 1Т-стадии происходит в результате разгрузки нагруженного на 2Т-стадии слоя. Ударные волны, распространяющиеся в пленке,

отражаются от ее границ и вызывают движение границ пленки. Движение задней границы измеряется также экспериментально методом «pump-probe».

На рис. 5 кривыми 1 и 2 показаны траектории движения фронтов плавления. В точке t_{ei} (время релаксации 2Т-слоя) скорости фронтов уменьшаются до величин, меньших звуковой скорости в алюминии, в этой точке 2Т-стадия заканчивается и переходит в более медленную и плавную 1Т-стадию.

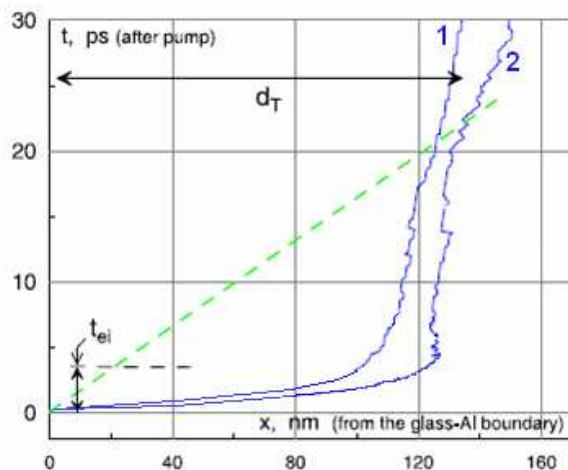


Рис. 5 Движение переднего и заднего фронтов плавления внутри пленки. t_{ei} —, время релаксации 2Т-слоя, штриховой линией показана звуковая характеристика.

На рис. 6-7 показана эволюция профилей давления в пленке. На 2Т-стадии процесса на профиле давления появляются изломы, показанные стрелками на рис. 6. Изломы появляются в связи с наличием зоны плавления в веществе и расположены на границах этой зоны: левый излом соответствует значению относительной массовой доли жидкой фазы $\xi = 1$ (полностью жидкая фаза), правый излом соответствует значению $\xi = 0$ (полностью твердая фаза). На рис. 7 показана изохора алюминия при нормальной

плотности. Именно разрывы в производной $\frac{\partial P_i}{\partial T}$ вызывают изломы на профиле волны сжатия. Происходит как бы «впечатывание» изломов на изохоре плавления в профиль волны сжатия, при этом изломы возникают точно в граничных точках зоны плавления и перемещаются вместе с ними.

Стрелкой «1-2» на рис. 6 показан сдвиг зоны плавления за время с 1 пс до 2 пс, скорость этого сдвига превышает звуковую более чем в 4 раза. Наклон линии между изломами постепенно становится круче, и при большей толщине пленки этот профиль может перейти в ударную волну прежде, чем возмущение дойдет до задней границы пленки.

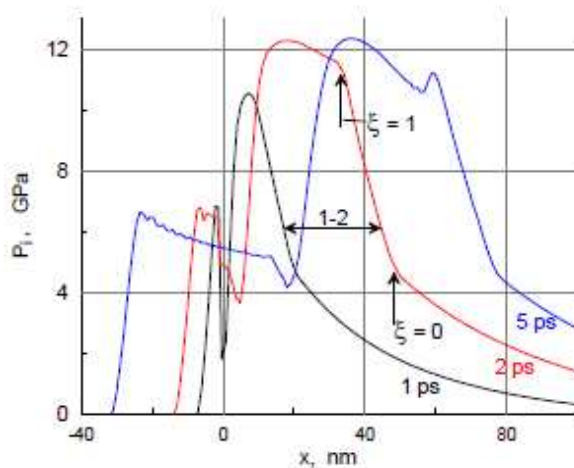


Рис. 6 Профили ионного давления при значениях времени 1 пс, 2 пс, 5 пс.

На 1Т-стадии в веществе волна сжатия разделяется на два возмущения: одно из них распространяется вправо вглубь пленки, а другое движется к левой границе пленки и далее вглубь стекла. На рис. 7 показана эволюция профилей правой и левой волн сжатия при временах, больших времени релаксации 2Т-слоя: 10 пс и 30 пс. Цифрами обозначены основные элементы, выделенные в правой волны сжатия, движущейся вглубь пленки:

- i. Предвестник перед нижней границей зоны плавления. Этот относительно пологий участок передней части профиля Римановской волны относится к следу тепловой волны, вызванной электронной теплопроводностью. Он постепенно поглощается зоной плавления, поскольку из-за разницы в скоростях движения фронтов плавления зона плавления расширяется. Это выглядит как постепенное «наезжание» нижнего излома волны (см. рис.б) на предвестник.
- ii. Зона плавления, граничными точками которой являются изломы (см. рис. б). Наклон этого практически прямого участка профиля становится все круче, пока, наконец, не образуется разрыв вследствие классического процесса опрокидывания Римановской волны на расстояниях порядка десятков нанометров.
- iii. Два максимума давления в волне. Второй отдельный максимум (он справа) – задний фронт плавления, он образуется вследствие расширения зоны плавления, первый максимум «отстает» от него.
- iv. Волна разрежения, давление уменьшается по мере движения назад к границе.
- v. Плато за волной разрежения, которое существует из-за остаточного нагрева пленки.

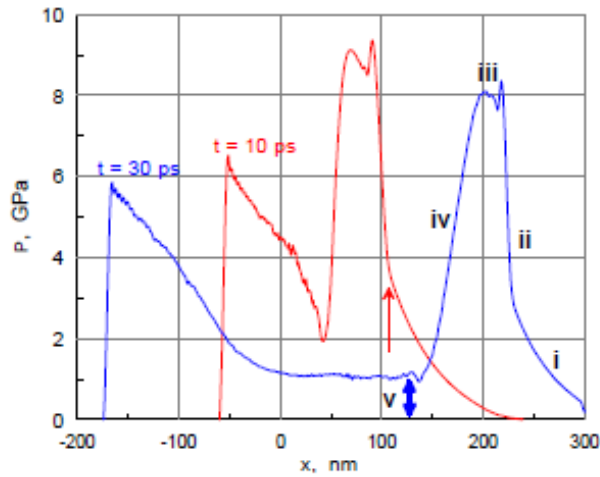


Рис. 7 Профили ионного давления при значениях времени 10 пс и 30 пс.

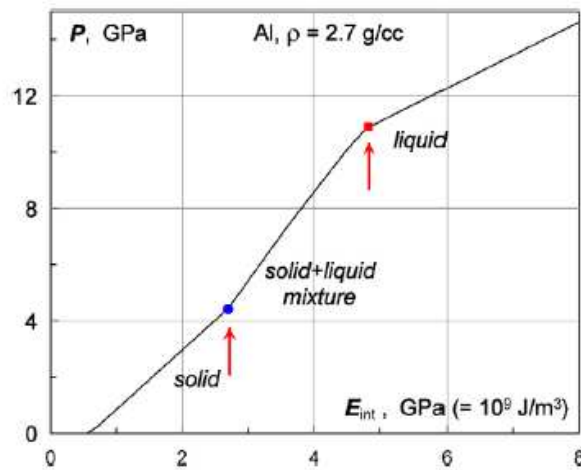


Рис. 8 Изломы на изохоре, вызванные началом и концом плавления на изохоре алюминия.

На рис.9-10 проиллюстрирована динамика движения задней границы пленки. На рис.9 показаны траектории движения задней границы образца, полученные а) с помощью настоящей модели (красная кривая) и экспериментально с помощью наблюдения за задней границей методом «pump-probe». На рис.10 показано изменение скорости задней границы пленки в зависимости от времени. Римскими цифрами отмечены стадии движения задней границы, связанные с частями профиля давления на рис. 7. Каждый этап на рис.10 происходит при отражении от задней стенки пленки соответствующей ему по номеру части сложного профиля давления на рис.7.

- i. Предвестник. Это акустический след тепловой волны, которая возникает на 2Т-стадии. Сначала из-за электронной теплопроводности вглубь пленки движется температурная волна, а затем из-за скачка температуры возникает скачок давления, который доходит до задней границы первым.

Экспериментально этот этап практически неразличим, для его исследования нужны более тонкие пленки.

- ii. Зона между изломами, которая становится круче по мере продвижения вглубь пленки. К моменту достижения задней границы фронт опрокидывается, т.е. на этом этапе от задней границы фактически отражается ударная волна, здесь скорость задней границы максимальна.
- iii. Когда этап ii заканчивается, от задней стенки отражается следующая за ударной волной волна разрежения.
- iv. Скорость задней границы падает на этапе отражения волны разрежения.
- v. На этом этапе скорость становится практически постоянной из-за наличия плато на рис. 7 – слоя в веществе, состоящего из расплавленного алюминия, сжатого до фиксированного давления. Поэтому движение на этом этапе близко к равномерному.

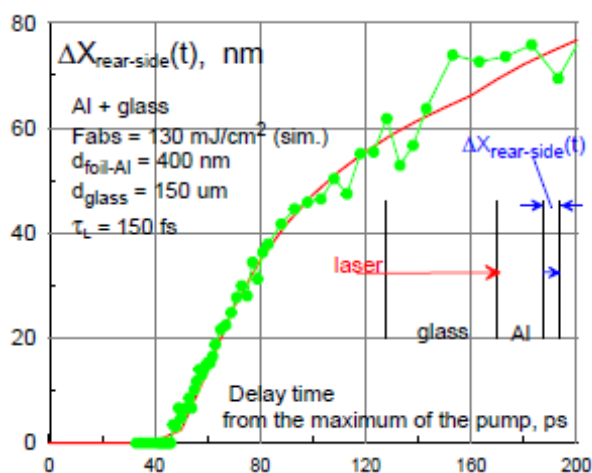


Рис. 9 Траектория задней границы пленки. Красная кривая получена на основе расчета по настоящей модели, зеленые точки взяты из эксперимента.

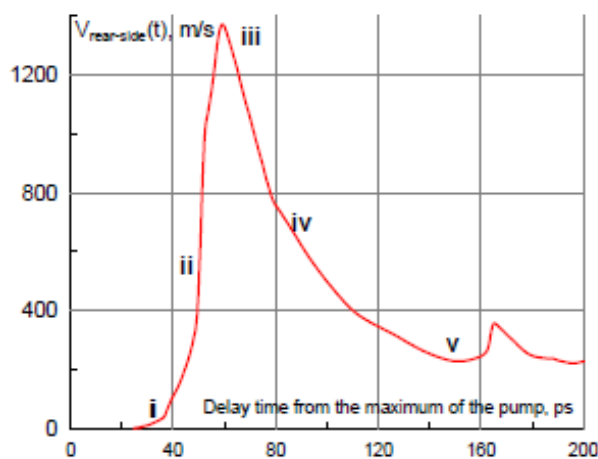


Рис. 10 Скорость задней границы пленки в зависимости от времени. Римскими цифрами на графике отмечены этапы отражения от задней границы пленки соответствующих частей профиля давления на рис.5.

Хорошее согласие между расчетами и экспериментальными данными дает возможность утверждать, что модель прекрасно подходит для проведения численных экспериментов в выбранной области. Аналогичные расчеты могут быть проведены для ряда других металлов или полупроводников при наличии достаточно точных уравнений состояния. Кроме того, полученные результаты подтверждают правильность выбора коэффициентов двухтемпературной теплопроводности и электронно-ионного обмена и возможность использования предложенной модели для проверки и уточнения значений этих коэффициентов.

Заключение

1. Впервые проведен систематический анализ акустического сигнала, возникающего в результате воздействия ультракороткого лазерного импульса на металл. Выделены стадии формирования и распространения акустического сигнала: рост давления под действием быстрого нагрева, распространение волны вглубь вещества одновременно с отражением от границы мишени, опрокидывание нелинейной волны с образованием ударной волны.
2. На основании произведенных расчетов показаны механизмы влияния процесса плавления металла, нагреваемого ультракоротким лазерным импульсом, на форму распространяющегося в мишени акустического сигнала.
3. Расчеты, проведенные в диссертации на основе разработанного алгоритма, позволили впервые промоделировать важный физической эксперимент, в котором фемтосекундный лазерный импульс направляется на отражающую и поглощающую поверхность металла через стеклянную пластинку.
4. В представленной модели используется многофазное широкодиапазонное полуэмпирическое уравнение состояния, что позволяет автоматически учитывать в численном эксперименте фазовые переходы «твердое тело – жидкость» и «испарение – конденсированная фаза» без выделения фронтов плавления и испарения в численном алгоритме сквозного счета.
5. В разработанный алгоритм адаптирована современная модель двухтемпературной электронной теплопроводности. Модель пригодна в интересующем нас диапазоне температур.

6. Произведены расчеты в широком диапазоне энергий: от порога плавления металла и до больших энергий, при которых образуется быстро разлетающаяся плазменная корона.

Результаты, полученные с помощью настоящей модели и разработанного на ее основе кода, позволяют считать модель и код надежными и качественными инструментами для численного моделирования в реальных исследовательских задачах, связанных с облучением металлов ультракороткими лазерными импульсами. Модель корректно работает в широком диапазоне начальных данных.

Библиография

1. С.И. Анисимов, Б.Л. Капелиович, Т.Л. Перельман, Электронная эмиссия с поверхности металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов, ЖЭТФ, том 66, вып. 2 (1974), с. 776-781.
2. М.И. Каганов, И.М. Лифшиц, Л.В. Танатаров, Релаксация между электронами и решеткой, ЖЭТФ, том 31, вып. 2(8) (1956), с. 232-237.
3. Н.А. Иногамов, Ю.В. Петров, Теплопроводность металлов с горячими электронами, ЖЭТФ, т. 137, вып. 3 (2010), с. 505-529.
4. Zh. Lin, L.V. Zhigilei, and V. Celli, Phys. Rev. B 77, 075133 (2008).
5. Бушман А.В., Ломоносов И.В., Фортов В.Е., Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. Черноголовка: ИХФЧ РАН, 1992.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Теоретическая физика: учеб. пособие – в 10 т., Т. V, Статистическая физика, Москва, Наука, 1988 г.
7. Самарский А.А., Попов Ю.П., Разностные методы решения задач газовой динамики, Наука, Москва, 1980.
8. Sokolowski-Tinten K., Bialkowski J., Cavalleri A., Von der Linde D., Oparin A., Meyerter-Vehn J., Anisimov S.I., Transient States of Matter during Short Pulse Laser Ablation, Phys. Rev. Lett., 1998, V. 81. P. 224-227.
9. Н.А. Иногамов, А.М. Опарин, Ю.В. Петров, Н.В. Шапошников, С.И. Анисимов, Д. фон дер Линде, Ю. Майер-тер-Фен, Разлет вещества, нагретого ультракоротким лазерным импульсом, Письма в ЖЭТФ, том 69, вып. 4, стр. 284-289.
10. S.I. Anisimov, N.A. Inogamov, Y.V. Petrov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovskii, K. Nishihara, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, Thresholds for front-side ablation

and rear-side spallation of metal foil irradiated by femtosecond laser pulse, *Appl. Phys. A.* (2008), v.92, pp. 797-801.

11. V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, S.I. Ashitkov, K. Nishihara, Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials, *Appl. Surf. Sci.* (2009), DOI: 10.1016/j.apsusc.2009.04.082.
12. R. Evans, A.D. Badger, F. Fallies, M. Mahdih, T.A. Hall, P. Audebert, J.-P. Geindre, J.-C. Gauthier, A. Mysyrowicz, G. Grillon, A. Antonetti, Time- and Space-Resolved Optical Probing of Femtosecond-Laser-Driven Shock Waves in Aluminum, *Phys. Rev. Lett.* (1996), V. 77, N. 16, P.3359-3362.

Публикации по теме диссертации

1. N.A. Inogamov, A.Ya. Faenov, V.V. 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. Nagasono, H. Ohashi, M. Yabashi, K. Tono, Y. Senda, T. Togashi, and T. Ishikawa, Two-Temperature Warm Dense Matter Produced by Ultrashort Extreme Vacuum Ultraviolet-Free Electron Laser (EUV-FEL) Pulse, *Contrib. Plasma Phys.* 51, No. 5, 419 – 426 (2011).
2. Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, В.А. Хохлов, В.В. Шепелев, Сверхупругость и распространение ударных волн в кристаллах, *Письма в ЖЭТФ*, т. 93, вып. 4, с. 245-251, (2011).
3. Агранат М.Б., Анисимов С.И., Ашитков С.И., Жаховский В.В., Иногамов Н.А., Комаров П.С., Овчинников А.В., Фортвов В.Е., Хохлов В.А., Шепелев В.В., Прочностные свойства расплава алюминия в условиях экстремально высоких темпов растяжения при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов, *Письма в ЖЭТФ*, том 91, вып. 9, с. 517-523, (2010).
4. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, S.I. Ashitkov, V.A. Khokhlov, V.V. Shepelev, P.S. Komarov, A.V. Ovchinnikov, D.S. Sitnikov, Yu.V. Petrov, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Laser acoustic probing of two-temperature zone created by femtosecond pulse, *Contrib. Plasma Phys.* (2010), DOI: 10.1002/ctpp.201010111.
5. N. A. Inogamov, S. I. Ashitkov, V. V. Zhakhovsky, V. V. Shepelev, V. A. Khokhlov, P. S. Komarov, M. B. Agranat, S. I. Anisimov and V. E. Fortov, Acoustic probing of two-temperature relaxation initiated by action of ultrashort laser pulse, *Applied Physics A*, 2010, DOI: 10.1007/s00339-010-5765-2.

6. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, A.Y. Faenov, V.A. Khokhlov, V.V. Shepelev, I.Y. Skobelev, Y. Kato, M. Tanaka, T.A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, Y.V. Petrov, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Spallative ablation of dielectrics by X-ray laser, *Applied Physics A*, 2010, DOI: 10.1007/s00339-010-5764-3.
7. S.I. Anisimov, N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Yu.V. Petrov, A.Ya. Faenov, V.V. Zhakhovsky, I.Yu. Skobelev, T.A. Pikuz, V.E. Fortov, M. Tanaka, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, K. Nishihara, Y. Kato, V.V. Shepelev, Spallative ablation of metals and dielectrics by ultrashort X-ray lasers, *Book of abstracts, International Symposium of High Power Laser Ablation, Eldorado Hotel, Santa Fe, 19 April – 22 April 2010*, p. 57.
8. S.I. Anisimov, N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Yu.V. Petrov, V. E. Fortov, M. B. Agranat, V.V. Zhakhovsky, S.I. Ashitkov, V.P. Komarov, V.V. Shepelev, Pump-probe Exploration of Ultrafast Electron Processes in Metal Irradiated by a Femtosecond Laser Pulse, *Book of abstracts, International Symposium of High Power Laser Ablation, Eldorado Hotel, Santa Fe, 19 April – 22 April 2010*, p. 58.
9. S.I. Anisimov, N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Yu.V. Petrov, V.E. Fortov, M.B. Agranat, V.V. Zhakhovskii, S.I. Ashitkov, V.P. Komarov, V.V. Shepelev, Acoustic probing of two-temperature relaxation initiated by action of ultrashort laser pulse, *COLA 2009, 10th International Conference on Laser Ablation, Singapore, 22-27 November 2009*, Chairs: Boris Luk`yanchuk, Hong MingHui, Co-Chairs (International): Richard F. Haglund, Mikio Takai, Alfred Vogel, *Book of Abstracts*, p.122.
10. S.I. Anisimov, N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Yu.V. Petrov, A.Ya. Faenov, V.V. Zhakhovskii, I.Yu. Skobelev, T.A. Pikuz, V.E. Fortov, M. Tanaka, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, K. Nishihara, Y. Kato, V.V. Shepelev, Spallative ablation of dielectrics by X-ray laser, *COLA 2009, 10th International Conference on Laser Ablation, Singapore, 22-27 November 2009*, Chairs: Boris Luk`yanchuk, Hong MingHui, Co-Chairs (International): Richard F. Haglund, Mikio Takai, Alfred Vogel, *Book of Abstracts*, p.174.
11. S.I. Anisimov, N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Yu.V. Petrov, V.E. Fortov, M.B. Agranat, V.V. Zhakhovskii, S.I. Ashitkov, V.P. Komarov, V.V. Shepelev. Pump-probe «seismology» of ultrafast two-temperature processes inside a film irradiated by a femtosecond laser pulse, *XIII International Conference on Physics of Non-Ideal Plasmas, September 13 – 18, 2009, Chernogolovka, Russia, Books of Abstracts*, p.76-77.

12. Inogamov N.A., Anisimov S.I., Petrov Yu.V., Khokhlov V.A., Zhakhovskii V.V., Agranat M.B., Ashitkov S.I., Sitnikov D.S., Ovchinnikov A.V., Nishihara K., Oparin A.M., Shepelev V.V., Femtosecond ablation (FSA): calculated and measured ablation thresholds agree for a first time, in: 8-th International workshop on Subsecond Thermophysics, Moscow, Russia, September 26-28, 2007, Book of Abstracts, p. 30-31 (2007).

Подписано в печать _____. Формат 60x84 1/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1,0. Тираж 100 экз. Заказ №_____.

Москва