

На правах рукописи



Мажукин Александр Владимирович

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ
ЯВЛЕНИЙ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ**

Специальность 05.13.18. - Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2011

Работа выполнена в Институте Прикладной Математики им. М.В.Келдыша РАН

Научный руководитель:

профессор, доктор физико-математических наук
Гасилов Владимир.Анатольевич.

Официальные оппоненты:

профессор, доктор физико-математических наук
Савельев-Трофимов Андрей Борисович

профессор, доктор физико-математических наук
Мажорова Ольга Семеновна

Ведущая организация:

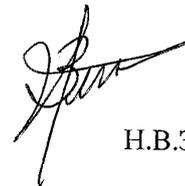
Вычислительный центр им. А.А.Дордницына РАН

Защита состоится «_____» _____ 2011 г. в _____ час. _____ мин. на заседании
Диссертационного совета Д 002.024.03 при Институте Прикладной Математики им. М.В.Келдыша
РАН по адресу: 125 047, Москва, Миусская пл. д.4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИПМ им. М.В.Келдыша РАН.

Автореферат разослан «_____» _____ 2011 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.024.03
доктор физико-математических наук



Н.В.Змитренко

Общая характеристика работы

Диссертационная работа посвящена математическому моделированию коротко и ультракороткого лазерного воздействия на металлы и анализу результатов моделирования. Успешное решение данной проблемы потребовало развития метода динамической адаптации применительно к уравнениям параболического типа, модификации задачи Стефана для двухтемпературной модели и определения термодинамических и теплофизических свойств для фононного и вырожденного электронного газа.

Актуальность темы

Быстрое развитие импульсной лазерной техники и лазерных технологий стимулировало появление новых физико-математических постановок и способствовало дальнейшему усилению роли математического моделирования. Наметившаяся в последние годы тенденция использования сверхмощных ультракоротких импульсов привела к реализации совершенно уникальных физических условий, при которых продолжительность воздействия оказывается сравнимой или меньшей характерных времён термализации, релаксации и фазовых трансформаций в веществе. Это приводит к необходимости рассмотрения сложнейших фундаментальных проблем, связанных с принципиальной возможностью описания и исследования сильно неравновесных явлений и метастабильных состояний в газовых и конденсированных средах. Одной из закономерностей импульсного воздействия является то, что чем короче длительность и выше интенсивность излучения, тем больше наблюдается аномалий и отклонений в поведении процессов, тем ограниченнее возможности экспериментальных подходов и выше их стоимость. В этих ситуациях особую значимость приобретают теоретические представления на основе анализа и прогноза, осуществляемых методами математического моделирования.

Феноменологическая двухтемпературная модель параболического типа, предложенная в 50-е годы Каганом, Лифшицем и Танатаровым по-прежнему остается основным средством для математического описания неравновесного нагрева металлов короткоимпульсным лазерным излучением. В теоретических исследованиях, связанных с построением различных вариантов двухтемпературной модели, наиболее важным аспектом является определение в широком температурном диапазоне термодинамических и теплофизических характеристик, а также количественная характеристика электрон-фононного взаимодействия, контролирующая обмен энергии между электронами и решеткой.

С математической точки зрения классический вариант двухтемпературной модели представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений параболического типа, точность решения которых в сильной степени зависит от того, насколько хорошо распределение узлов сетки согласуется с особенностями искомого решения. Поэтому построение расчётных сеток являются важнейшим элементом численного решения дифференциальных уравнений в частных производных. В настоящее время широкое распространение получили расчетные сетки, адаптирующиеся к искомому решению.

В методах динамической адаптации для управляемого распределения узлов используется информация о динамике искомого решения в областях с постоянными и подвижными границами, что позволяет концентрировать большое количество узлов в зонах резкого изменения решения и явным образом выделять подвижные границы.

Из всего вышесказанного следует актуальность темы, обусловленная необходимостью развития основных аспектов математического моделирования, как одного из основных способов теоретического исследования коротко и ультракороткого лазерного воздействия на металлы.

Цель исследования

Основной целью диссертационной работы является проведение и анализ математического моделирования коротко- и ультракороткого лазерного воздействия на металлы. Первым этапом являлась разработка вычислительного алгоритма, позволяющего с помощью искомого решения производить управляемое перераспределение узлов сетки в областях с подвижными межфазными

границами. Следующей задачей было построение аналитических выражений для термодинамических и теплофизических характеристик для фононного и вырожденного электронного газа в произвольном температурном диапазоне. Заключительный этап - построение математической модели, на основе модифицированной задачи Стефана для двухтемпературного приближения, описывающей неравновесный лазерный нагрев и быстрые фазовые переходы и анализ результатов моделирования.

В работе решены следующие задачи

Выполнено дальнейшее развитие метода динамической адаптации и его применение к решению задач нелинейной теплопроводности и конвекции – диффузии. Определены оптимальные функции преобразования координат в классе задач, описываемых уравнениями параболического типа. Для оценки эффективности и точности вычислительных алгоритмов используются тестовые задачи и аналитические решения.

Предложен подход к определению термодинамических и теплофизических характеристик металлов в неравновесных состояниях. С использованием техники интегралов Ферми построены простые аналитические выражения для уравнений состояния, теплоёмкости, теплопроводности и коэффициента обмена энергией вырожденного электронного Ферми-газа, а также для теплоёмкости и теплопроводности фононного газа в произвольном диапазоне температур.

Классическая двухтемпературная модель обобщена на случай неравновесного лазерного нагрева с фазовыми превращениями: плавлением и испарением. С использованием динамической адаптации проведено математическое моделирование импульсного лазерного нагрева алюминия и меди.

Научная новизна

Предложены и исследованы оптимальные функции преобразования для метода динамической адаптации в параболических уравнениях.

Предложен подход к определению термодинамических и теплофизических характеристик металлов в неравновесных состояниях.

Построена математическая модель неравновесного лазерного нагрева с учетом фазовых превращений вещества с явным выделением фазовых фронтов.

Практическая ценность

Разработанные модели и вычислительные алгоритмы предназначены для использования в исследованиях различных неравновесных процессов и состояний, сопровождающих импульсное лазерное воздействие на конденсированные среды.

Личный вклад автора

Все изложенные в диссертационной работе оригинальные результаты получены автором лично, либо при его непосредственном участии.

Апробация работы и публикации

Основные результаты диссертации изложены в 20 научных публикациях (из них 1 статья в Энциклопедии низкотемпературной плазмы, Серия Б, Том УП – 1, Математическое моделирование в низкотемпературной плазме, 4 статей в научных рецензируемых журналах из списка ВАК, 4 статьи в реферируемых зарубежных научных журналах и трудах Международных конференций, 10 тезисов конференций).

Результаты диссертационной работы обсуждались и докладывались на следующих 15-ти конференциях: 3 - European Summer School, (Saint – Etienne, France, 2006), IV - VII - Международный научный семинар “Математические модели и моделирование в лазерно-плазменных процессах” (Москва, 2007, 2008 Будва, Петровац, Черногория, 2009), Third International Conference Computational methods in applied mathematics (Minsk, 2007), III International Conference on Adaptive Modeling and Simulation ADMOS 2007, (Göteborg, Sweden, 2007), E-MRS 2008 Spring Meeting, (E-MRS 2008), (Strasbourg, France), 6th International Conference on Photo-Excited

Processes and Applications, ICPEPA 2008, (Sapporo, Hokkaido, Japan, 2008). International Conference "Advanced Laser Technologies" (ALT'08) (Siofok, Hungary, 2008), International Conference on Adaptive Modeling and Simulation. ADMOS 2009, (Brussels, Belgium, 2009).

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка использованных источников. Общий объем диссертации – 126 страниц.

Содержание диссертации

Во **введении** освещается современное состояние рассматриваемой темы, обосновывается тема диссертации, ее актуальность, формулируются цели и задачи исследования, излагаются полученные результаты и их практическая ценность.

Первая глава посвящена определению общих закономерностей построения динамически адаптирующихся к решению сеток, характерных для параболических уравнений типа конвекции – диффузии (уравнения Бакли – Леверетта и Бюргерса) и нелинейной теплопроводности (квазилинейное уравнение теплопроводности). В рассматриваемых задачах оптимальное распределение узлов сетки связано как с перемещением границ, так и с особенностями решения внутри области определения.

С сильно нелинейной теплопроводностью связано появление крутых неподвижных и распространяющихся температурных фронтов.

К задачам конвекции - диффузии сводится ряд математических моделей, составляющих основу задач механики жидкости и газа. Эти модели описывают два основных механизма переноса энергии и вещества: диффузионный и конвективный. В зависимости от внешних условий каждый из механизмов может иметь доминирующее влияние. В случае сильного доминирования конвективного механизма переноса получают класс сингулярно возмущённых нелинейных математических моделей с малым параметром при старшей производной. Нестационарные сингулярно возмущённые модели допускают возникновение областей сильного изменения решения, распространяющихся в виде различных фронтов и переходных слоёв.

С вычислительной точки зрения сингулярно возмущённые задачи относятся к трудно решаемым проблемам. В частности, разностные схемы, использующиеся для аппроксимации уравнений конвекции – диффузии, как правило, обладают сильной дисперсией, для подавления которой применяются специальные меры.

Постановка задачи. Основным объектом исследований служит класс нестационарных краевых задач математической физики, имеющих вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial P(u)}{\partial x} = F^{(n)}(u), \quad x_0 < x < x_r, \quad t > 0, \quad (1.1)$$

$$t = 0: \quad u(x, 0) = u^0(x), \quad (1.2)$$

$$x = x_0: \quad g_0\left(t, x_0, u(x), \frac{\partial u(x)}{\partial x}, \dots\right) = 0, \quad x = x_r: \quad g_r\left(t, x_r, u(x), \frac{\partial u(x)}{\partial x}, \dots\right) = 0, \quad (1.3)$$

где $P(u) \geq 0$ – сложная линейная или нелинейная функция. $F^{(n)}(u) \geq 0$ – линейный или нелинейный оператор порядка не выше второго, $n = 0, 1, 2$. Предполагается, что решение $u(x, t)$, как и функция $u^0(x)$, обладают необходимой гладкостью.

В зависимости от конкретного вида операторов $P(u)$ и $F^{(n)}(u)$ уравнение (1.1) может описывать те или иные физические процессы и соответственно являться линейным или нелинейным уравнением параболического типа:

$$\text{нелинейной теплопроводности } P(u) = 0, \quad F^{(2)}(u) = \frac{\partial}{\partial x} k(u) \frac{\partial u}{\partial x}; \quad (1.4)$$

нелинейных уравнений Бюргера $P(u) = u^2 / 2$, $F^{(2)}(u) = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, (1.5)

и Бакли – Леверетта $P(u) = \frac{u^2}{u^2 + \alpha \cdot (1-u)^2}$ и $F^{(2)}(u) = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$. (1.6)

Произвольная нестационарная система координат. В основу метода динамической адаптации положена процедура перехода к произвольной нестационарной системе координат. Использование произвольной нестационарной системы координат позволяет проблему построения и адаптации расчетных сеток формулировать на дифференциальном уровне, т.е. в получаемой математической модели часть дифференциальных уравнений описывает физические процессы, а другая – поведение узлов сетки. Неизвестными в получаемой системе уравнений являются не только сеточные функции u_i^j , но и координаты узлов сетки x_i^j . Взаимно-однозначное отображение физического и расчетного пространств осуществляется посредством автоматического преобразования координат с помощью искомого решения. Переход из физического пространства $\Omega_{x,t}$ с эйлеровыми переменными (x,t) в некоторое расчетное пространство с произвольной нестационарной системой координат $\Omega_{q,\tau}$ и переменными (q,τ) осуществляется с помощью замены переменных общего вида, согласно которой дифференциальная модель (1.1) - (1.3) в переменных (q,τ) представляется в виде:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + \frac{Q}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} + \frac{1}{\psi} \frac{\partial P(u)}{\partial q} = \frac{1}{\psi} F^{(n)}(u), \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\frac{\partial Q}{\partial q}, \quad \frac{\partial x}{\partial q} = \psi, \quad q_0 < q < q_1, \quad \tau > 0 \quad (1.8)$$

где (1.7) параболическое уравнение общего вида, (1.8) – уравнение обратного преобразования с функцией преобразования Q , Функция Q характеризует скорость движения нестационарной системы координат, заранее неизвестна и подлежит определению. После её определения уравнение (1.8) используется для построения адаптирующейся к решению сетки.

Принцип квазистационарности. Функция преобразования Q определяется из принципа квазистационарности, согласно которого необходимо выбрать такую нестационарную систему координат, в которой временные производные решения обращаются в нуль или будут достаточно малы. Малость временных производных равносильна требованию режима квазистационарности для процессов в новой системе.

Принцип квазистационарности использовался для определения функции Q в ряде модельных задач. В задачах нелинейной теплопроводности (1.4) с $k(u) = u^\alpha$ и $\alpha > 1$ функция Q имеет вид:

$$Q = -\left(\frac{\partial W}{\partial q}\right) \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial q}\right)^{-1} = \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{k(u)}{\psi}\right) + \frac{k(u)}{\psi} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial q^2}\right) \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial q} + \text{Re}\right)^{-1} = \\ = \frac{\alpha u^{\alpha-1}}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} + u^\alpha \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{\psi}\right) + \frac{u^\alpha}{\psi} \ln \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial q} + \text{Re}\right). \quad (1.10)$$

В нелинейных задачах конвекции – диффузии (1.5), (1.6) функция Q равняется

$$Q = -\left(\frac{\partial P(u)}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{\mu}{\psi}\right) - \frac{\mu}{\psi} \frac{\partial^2 u}{\partial q^2} \Big/ \left(\frac{\partial u}{\partial q} + \text{Re}\right)\right) = -\left(\frac{\partial P(u)}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{\mu}{\psi}\right) - \frac{\mu}{\psi} \ln \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial q} + \text{Re}\right)\right), \quad (1.11)$$

$\frac{\partial P(u)}{\partial u}$ для уравнений Бакли – Леверетта и Бюргерса соответственно имеют вид:

$$\frac{\partial P(u)}{\partial u} = \frac{2\alpha u(1-u)}{[u^2 + \alpha \cdot (1-u)^2]^2}, \quad \frac{\partial P(u)}{\partial u} = u.$$

где $Re \ll 1$ - регуляризующая константа, ограничивающая снизу значение производной du/dq в случае её обращения в нуль.

В полученных выражениях (1.10), (1.11) 1-е и 3-е слагаемые оказывают на узлы сетки сжимающее воздействие, а 2-е – расталкивающее и эффективно предотвращает возникновение сингулярных ситуаций, проявляющихся в пересечении траекторий движения узлов. Отметим, что третье слагаемое является медленно меняющейся функцией, принципиальной роли не играет, и в ряде случаев им можно пренебречь.

Эффективность метода динамической адаптации, с учётом полученных выражений для функции преобразования Q , исследовались аналитически и численно. С их помощью было показано, что предлагаемые выражения функции Q являются оптимальными в смысле качества решения при минимальном числе узлов сетки.

Дифференциальное приближение разностных схем

Аналитические исследования базировались на исследовании дифференциальных приближений разностных схем. Их исследование позволяет установить преобладающий вклад в погрешность аппроксимации старших производных и, связанных с ними таких свойств разностных схем, как диссипация и дисперсия. Известно, что разностные схемы, используемые для решения уравнений конвекции - диффузии, при конвективном преобладании обладают сильной дисперсией, приводящей к паразитным осцилляциям при скачкообразном изменении решения. В нестационарных системах координат правые части дифференциальных приближений зависят от скорости движения системы координат, что позволяет соответствующим выбором функции преобразования влиять на качество разностных схем.

Введя в дискретном пространстве $\Omega_{q,\tau}$ расчётную сетку $\omega_h^{4\tau}$ и записав с её помощью семейство из трёх конечно-разностных схем, аппроксимирующих уравнения (1.7), (1.8) центральными разностями, конечными разностями вперед и назад, получим для них дифференциальные приближения

$$Q \frac{\partial u}{\partial q} + \frac{\partial P(u)}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{f}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} \right) = \delta_n \frac{\partial u}{\partial q} + \alpha_n \frac{\partial^2 u}{\partial q^2} + \beta_n \frac{\partial^3 u}{\partial q^3} + \gamma_n \frac{\partial^4 u}{\partial q^4}, \quad n = 1, 2, 3.$$

Индекс $n=1$ соответствует схеме с центральными разностями, $n=2$ для схем с разностями вперед и $n=3$ - назад.

$$\alpha_{2,3} = \alpha_0 + \alpha_1, \quad \delta_{2,3} = \delta_1 + \delta_0, \quad \beta_{2,3} = \beta_1, \quad \gamma_{2,3} = \gamma_1,$$

$$\alpha_0 = \mp \frac{h}{2} \left(Q + \frac{\partial P}{\partial u} \right), \quad \delta_0 = \mp \frac{h}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial u^2} \frac{\partial u}{\partial q}.$$

$$\alpha_1 = -\frac{h^2}{8} \left(4 \frac{\partial^2 P}{\partial u^2} \frac{\partial u}{\partial q} - \frac{\partial^2}{\partial q^2} \left(\frac{\mu}{\psi} \right) \right), \quad \delta_1 = -\frac{h^2}{24} \left(\left(4 \frac{\partial^3 P}{\partial u^3} \right) \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial q} \right)^2 - \frac{\partial^3}{\partial q^3} \left(\frac{\mu}{\psi} \right) \right),$$

$$\beta_1 = -\frac{h^2}{6} \left(Q + \frac{\partial P}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{f}{\psi} \right) \right), \quad \gamma_1 = \frac{h^2}{12} \frac{\mu}{\psi}.$$

Наиболее существенную роль из рассматриваемых коэффициентов играет коэффициент β стоящий перед третьей производной и, определяющий величину дисперсии соответствующей разностной схемы. Для всего семейства разностных схем коэффициент β имеет один и тот же вид. Его можно легко обратить в нуль, задав функцию Q в одном из соответствующих видов. Для нелинейных уравнений:

теплопроводности	$Q = \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{k(u)}{\psi} \right) = \frac{\alpha u^{\alpha-1}}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} + u^\alpha \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{\psi} \right),$
Бюргерса	$Q = - \left(u - \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{\mu}{\psi} \right) \right),$
Бакли-Левверрета	$Q(u) = - \left\{ \frac{2\alpha u(1-u)}{[u^2 + \alpha \cdot (1-u)^2]^2} - \frac{\mu}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} \right\}.$

Стремление коэффициента к нулю позволяет полностью избавиться от внутренней дисперсии разностных схем и тем самым существенно повысить качество разностных схем в областях сильного изменения решения. Отметим, что полученные выражения для Q содержат на одно слагаемое меньше, чем выражения (1.10), полученные из принципа квазистационарности.

Численный анализ. На примере численного решения ряда модельных задач, описывающих процессы нелинейной теплопроводности и конвекции – диффузии, показано, что в параболических задачах принцип квазистационарности позволят определять функции преобразования Q , обеспечивающих полную согласованность механизма адаптации сетки с искомым решением.

Отметим, что трансформация исходного уравнения (1.1) в расширенную дифференциальную систему (1.7) - (1.8) требует соответствующих дополнений в граничных и начальных условиях.

Задача нелинейной теплопроводности. Рассмотрим формирование двух неподвижных температурных фронтов на примере модельной задачи теплопроводности с краевыми условиями I-го рода. В переменных (x, t) задача имеет вид:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = - \frac{\partial W}{\partial x}, \quad W = -k(u) \frac{\partial u}{\partial x}, \quad k(u) = u^\alpha, \quad \alpha > 1.$$

$$t > 0, \quad 0 < x < 1$$

$$t = 0: \quad u^0(x, 0) = \text{Sin}(\pi x), \quad x = 0, 1: \quad u(0, t) = u(1, t) = 0,$$

В переменных (q, τ) задача нелинейной теплопроводности приобретает вид:

$$\frac{\partial(\psi u)}{\partial \tau} + \frac{\partial(Q u)}{\partial q} = - \frac{\partial W}{\partial q}, \quad W = - \frac{k(u)}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q}, \quad Q = \frac{\alpha u^{\alpha-1}}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} + u^\alpha \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{\psi} \right), \quad (1.12)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = - \frac{\partial Q}{\partial q}, \quad \frac{\partial x}{\partial q} = \psi, \quad 0 < q < 1, \quad \tau > 0, \quad (1.13)$$

$$\tau = 0: \quad u^0(q, 0) = \text{Sin}(\pi q), \quad \psi(q, 0) = 1, \quad (1.14)$$

$$\begin{aligned} q = 0: \quad & u(0, \tau) = 0, \quad Q(0, \tau) = 0; \\ q = 1: \quad & u(1, \tau) = 0, \quad Q(1, \tau) = 0; \end{aligned} \quad (1.15)$$

В расчетном пространстве $\Omega_{q,\tau}$ вводилась расчетная сетка $\omega_h^{\Delta\tau}$, и выписывалась семейство консервативных разностных схем, аппроксимирующее дифференциальную систему с порядком $O(\tau^2 + h^2)$. Система нелинейных разностных уравнений решалась итерационным методом Ньютона.

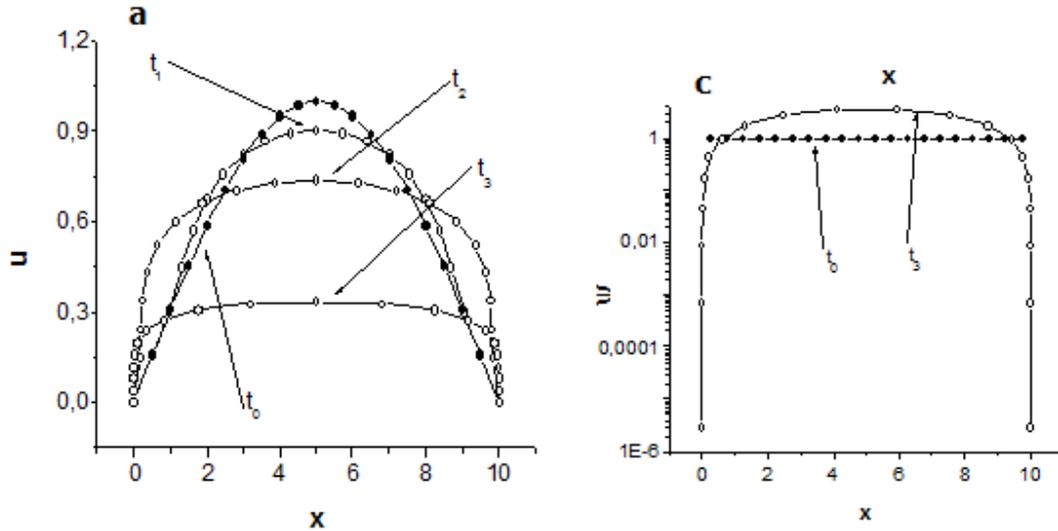


Рис. 1.1.а,с. пространственно-временное распределение безразмерных температуры и пространственного шага сетки

Решение дифференциальной задачи (1.12) – (1.15) на сетке с $N = 20$ и $\alpha = 5$, представлены на рис. 1.1а,б в виде кривых $u(t, x)$, $\psi(t, x)$, характеризующих пространственно-временное распределение безразмерных температуры и пространственного шага сетки. Количество и положение узлов на всех рисунках отмечены маркерами – темными начальными распределения $u(t_0, x)$, $\psi(t_0, x)$ при $t = t_0$, светлыми кружками все остальные кривые, рассчитанные на различные моменты времени t_1, t_2, t_3 .

Кривые на рис. 1.1а,б, характеризуют динамику формирования неподвижных температурных фронтов вблизи левой и правой границ и, связанное с ними, перераспределение узлов сетки. Сетка реагирует на появление градиентов сгущением узлов в области их наибольших значений и увеличением безразмерного шага $\psi(t, x)$ в центре области, где градиенты решения невелики, на рис.1.1б.

Были также рассмотрены и проанализированы численные решения нелинейных задач о распространение температурных волн, Бакли – Леверетта и Бюргерса. Анализ результатов решения нелинейных уравнений теплопроводности и конвекции – диффузии показал, что идея использования искомого решения для построения адаптирующихся сеток делает метод динамической адаптации универсальным, эффективным и алгоритмически простым.

Вторая глава посвящена определению основных теплофизических и термодинамических характеристик металлов в неравновесных состояниях в произвольном температурном диапазоне. Металлы в неравновесных состояниях обычно представляются в виде двух взаимодействующих подсистем - фононной и вырожденной электронной, характеризующихся соответственно фононной T_{ph} и электронной T_e температурами. Под произвольным температурным диапазоном для электронного Ферми-газа подразумевается температура T_e удовлетворяющая соотношению: $273^\circ K \leq T_e \leq 10\varepsilon_F$. Для фононного газа определение теплофизических и термодинамических

характеристик ограничивалось интервалом температур $273^{\circ} K \leq T_{ph} < T_{cr}$, где ε_F и T_{cr} - энергия Ферми и критическая температура соответственно.

Вырожденный электронный Ферми-газ. К важнейшим теплофизическим и термодинамическим характеристикам электронного Ферми-газа в рамках теплопроводного механизма переноса энергии относятся: теплоемкость C_{ve} , температуропроводность χ_e и теплопроводность λ_e . В условиях нарушения термодинамического равновесия эти характеристики определяются через фундаментальные физические величины, к которым относятся длины свободных пробегов электронов l_{ee} , l_{ep} и времена (частоты) релаксации τ_{ee} и τ_{ep} характерные для двух механизмов рассеяния электрон-электронного и электрон-фононного.

Для определения характеристик вырожденного электронного газа использовалась техника интегралов Ферми $F_{k+1/2}$.

$$F_{k+1/2}(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{z^{k+1/2} dz}{\exp(z - \eta) + 1}, \quad (2.1)$$

где $z = \varepsilon_e / T_e$, $\eta(T_e) = \mu(T_e) / T_e$ - безразмерные энергия и химический потенциал электронов.

Аппроксимация интегралов Ферми (2.1), позволяющая выражать функции $F_{k+1/2}(\xi)$ через трансцендентные Гамма-функции $\Gamma(k + 1/2)$ и безразмерную температуру $\xi = \frac{T_e}{\varepsilon_F}$ с

погрешностью, не превышающей 8%, позволила все характеристики электронного газа представить в виде простых аналитических выражений при произвольных температурах. Так средняя энергия электронов и давление могут быть представлены в виде:

$$\langle \varepsilon_e \rangle = T_e \frac{F_{3/2}}{F_{1/2}} = \frac{3}{2} \varepsilon_F (\xi^2 + 0.16)^{1/2},$$

$$P = \frac{2}{3} N_e \langle \varepsilon_e \rangle = \frac{2}{3} N_e T_e \frac{F_{3/2}}{F_{1/2}} = N_e \varepsilon_F (\xi^2 + 0.16)^{1/2}$$

Выражение для теплоемкости электронного газа при постоянном объеме C_{ve}

$$C_{ve} \cong \frac{3}{2} \frac{N_e k_B^2 T_e}{\left[T_e^2 + \left(\frac{3\varepsilon_F}{\pi^2} \right)^2 \right]^{1/2}}, \quad (2.2)$$

где N_e , - плотность электронов, k_B - постоянная Больцмана.

Зависимости $C_{ve}(T_e)$ для меди и алюминия представлены на рис. 2.1.

Теплопроводность электронного газа $\lambda_e(T_e, T_{ph})$ согласно элементарной кинетической теории газа определяется как

$$(\lambda_e)_k = \left(\frac{1}{3} C_{ve} l_e \langle v_e \rangle \right)_k = (C_{ve} \chi_e)_k, \quad k=s,l \quad (2.3)$$

Т.е. коэффициент теплопроводности λ_e можно определить через теплоемкость C_{ve} и осредненную температуропроводность $\chi_e(T_e, T_{ph})$ электронного газа.

Температуропроводность электронного газа χ_e определяется парными электрон-электронными столкновениями, преобладающими в области высоких температур, сравнимых с энергией Ферми $T_e / \varepsilon_F \sim 1$ и электрон-фононным взаимодействием, доминирующим в области низких температур, $T_e / \varepsilon_F \ll 1$.

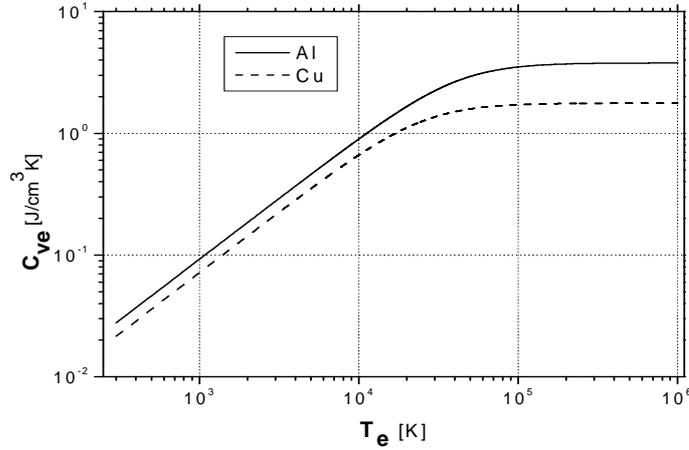


Рис.2.1 Температурная зависимость электронной теплоемкости $C_{ve}(T_e)$.

Длина свободного пробега электрона при парных электрон-электронных столкновениях l_{ee} определяется по известной газодинамической формуле $l_{ee} = \frac{1}{N_e \sigma_{ee}}$, где σ_{ee} - сечение рассеяния с передачей энергии $\Delta\mathcal{E}$ для электронов с энергиями $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$, определяемое в борновском приближении. В окончательном виде длина свободного пробега электрона для парных электрон-электронных столкновений l_{ee} записывается как

$$l_{ee}(T_e) = \frac{1}{N_e \sigma_{ee}} = \left[N_e \cdot \frac{2\pi}{9} \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{4/3} z^{-4/3} \frac{r^4}{r_B^2} \frac{\xi^2 \left[\ln(4t+1) - \frac{4t}{(4t+1)} \right]}{\left(\xi^2 + \frac{4}{9} \right) \left(\xi^2 + 0.16 \right)} \right]^{-1} \quad (2.4)$$

где $t = 4\langle k \rangle^2 d^2 = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{4/3} z^{1/3} \frac{r_B}{r} \cdot \left[\left(\xi^2 + 0.16 \right) \cdot \left(\xi^2 + \frac{4}{9} \right) \right]^{1/2}$, $r_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$ - борровский радиус,

$r = \left(\frac{3}{4\pi N_a} \right)^{1/3}$ - среднее расстояние между атомами, e - заряд электрона, d - дебаевский радиус.

Длина свободного пробега, определяемая электрон-фононным взаимодействием l_{eph} описывается в предположении упругого рассеяния электронов проводимости металла на колебаниях решетки и имеет вид:

$$\left(l_{eph}(T_{ph}) \right)_k = \left(\frac{E \cdot r}{z N_a k_B T_{ph}} \right)_k \quad \text{где } E = - \text{ модуль Юнга.}$$

Осредняя длины свободного пробега l_{ee} , l_{eph} получим выражение для результирующей температуропроводности $\chi_e(T_e, T_{ph})$ при произвольной температуре

$$\left(\chi_e(T_e, T_{ph}) \right)_k = \left(\frac{1}{3} l_e \langle v_e \rangle \right)_k = \left(\frac{l_{ee}(T_e) l_{eph}(T_{ph})}{3(l_{ee}(T_e) + l_{eph}(T_{ph}))} \right)_k \langle v_e \rangle = \left(\frac{\chi_{ee}(T_e) \chi_{eph}(T_{ph})}{\chi_{ee}(T_e) + \chi_{eph}(T_{ph})} \right)_k, \quad k=s,l$$

Температурные зависимости коэффициента электронной теплопроводности $\lambda_e(T_e, T_{ph})$ для *Al* и *Cu* для равновесного случая $T_e = T_{ph}$, приведены на рис.2.2.

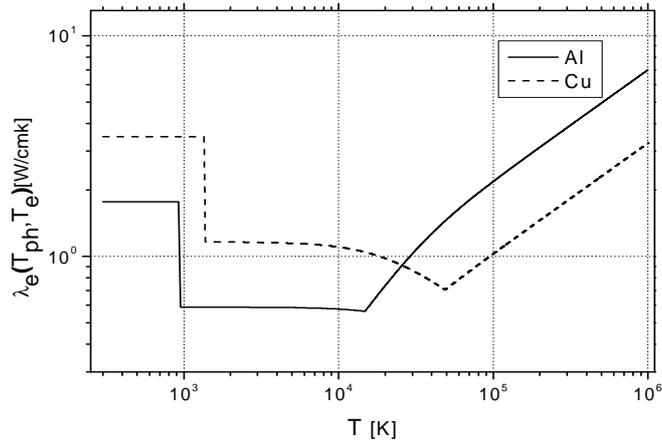


Рис.2.2. Температурная зависимость коэффициента электронной теплопроводности $\lambda_e(T_e, T_{ph})$

Фононный газ. Теплоемкость фононов $C_{v_{ph}}(T_{ph})$. С учетом процесса плавления теплоемкость фоонного газа запишется в виде:

$$C_{v_{ph,k}} = \begin{cases} 3k_B N_{a,k}, & k = s, l, \quad T > T_D \\ \frac{12\pi^4}{5} N_a k_B \left(\frac{T_{ph}}{T_D}\right)^3, & T < T_D \end{cases}$$

где T_D - температура Дебая.

Температуропроводность фоонного газа $\chi_{ph}(T_{ph})$.

Фононы рассматриваются как газ частиц, для которого температуропроводность определяется соотношением $\chi_{ph} = \frac{1}{3} \ell_{ph} v_s$, где ℓ_{ph} - длина свободного пробега фонона, v_s - скорость звука.

Длина свободного пробега ℓ_{ph} определяется через параметры фоонного газа $\ell_{ph} = \frac{M v_s^2}{k_B T_{ph} \gamma^2} r$,

где M - масса атома, γ - постоянная Грюнейзена.

С учетом процесса плавления температуропроводность фоонного газа

$$(\chi_{ph})_k = \left(2.831 \times 10^{-13} \frac{z}{A^{1/2} \gamma^2} \frac{N_a^{2/3}}{T_{ph}} \right)_k \left[\frac{cm^2}{c} \right], \quad k = s, l$$

Теплопроводность фоонного газа $\lambda_{ph}(T_{ph})$ выражается через его теплоемкость $C_{v_{ph}}$ и температуропроводность χ_{ph} :

$$(\lambda_{ph})_k = C_{v_{ph}} \chi_{ph} = \left(\frac{3 \pi^2}{(3m)^{3/2}} \frac{\hbar^3}{M^{1/2}} \frac{z}{\gamma^2} \frac{N_a^{5/3}}{T_{ph}[K]} \right)_k, \quad T_{ph} > T_D,$$

Температурные зависимости полной теплоемкости и теплопроводности металла представленные в виде соответствующих сумм, состоящих из двух компонент - электронной и фоонной, представлены на рис.2.3, 2.4:

$$C_v(T) = C_{v_e}(T) + C_{v_{ph}}(T), \quad \lambda(T) = \lambda_e(T) + \lambda_{ph}(T),$$

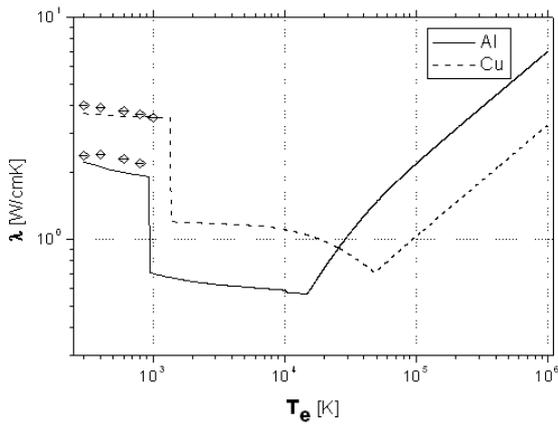


Рис.2.3. Температурные зависимости полной теплопроводности $\lambda(T)$.

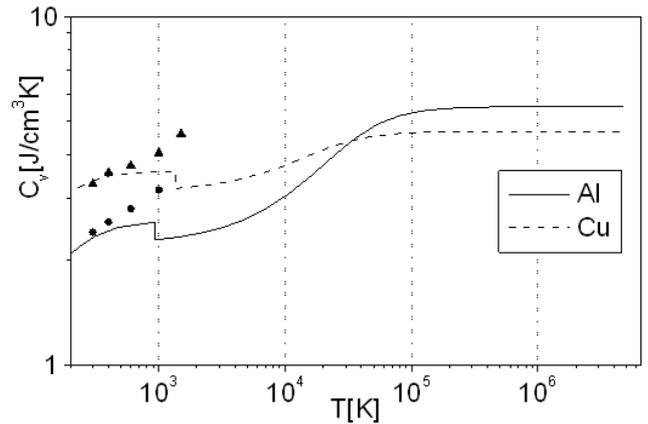


Рис.2.4. Температурные зависимости полной теплоемкости $C_v(T)$. (маркерами отмечены справочные данные).

Электрон-фононное взаимодействие. Средняя частота электрон-фононных столкновений $\langle v_{eph} \rangle$ с передачей энергии электронами кристаллической решетке представляется в виде

$$\langle v_{eph} \rangle = 2N_e \langle v_e \rangle \sigma_{eph} = 2zN_a \langle v_e \rangle \sigma_{eph}$$

где σ_{eph} - сечение электрон-фононного рассеяния, определяемое как:

$$\sigma_{eph} = 4\pi \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{4/3} \frac{m k_B T_{ph}}{\hbar^2} \left(\frac{r}{r_B} \right)^2 \frac{r^4}{z^{4/3}} \cdot \frac{\xi \cdot \left[\ln(t_1 + 1) - \frac{t_1}{(t_1 + 1)} \right]}{(\xi^2 + 0.16)^{1/2} \left(\xi^2 + \frac{4}{9} \right)^{1/2}}$$

Выражение для средней частоты передачи энергии окончательно записывается в виде:

$$\langle v_{eph} \rangle = \left(\frac{3}{2} \right)^{1/2} \frac{8}{3\pi} \left(\frac{r}{r_B} \right)^2 \frac{k_B T_{ph}}{\hbar} \Phi_{eph}(\xi) \cdot \left\{ \begin{array}{l} \Phi_{eph}(\xi) = \frac{\xi \cdot \left[\ln(t_1 + 1) - \frac{t_1}{(t_1 + 1)} \right]}{(\xi^2 + 0.16)^{1/4} \left(\xi^2 + \frac{4}{9} \right)^{1/2}} \quad \text{при } \xi < 1 \\ \Phi_{eph}(\xi) = \frac{\xi \cdot \left[\ln(t_1 + 1) - \frac{t_1}{(t_1 + 1)} \right]}{(\xi^2 + 0.16)^{3/4} \left(\xi^2 + \frac{4}{9} \right)^{1/2}} \quad \text{при } \xi \geq 1 \end{array} \right.$$

где $\Phi_{eph}(\xi)$ - безразмерная функция, характеризующая зависимость частоты передачи энергии $v_{eph}(T_e, T_p)$ от температуры T_e . В области $T_e \sim \varepsilon_F$ функция $\Phi_{eph}(\xi)$ имеет экстремум (максимум). При $\xi \ll 1$ функция $\Phi_{eph}(\xi)$ пропорциональна ξ , а частота передачи энергии пропорциональна температуре T_e , поскольку вследствие принципа Паули с фононами взаимодействует лишь доля электронов $N_e \sim T_e$. Линейную зависимость от ξ функция $\Phi_{eph}(\xi)$ сохраняет почти до $\xi \approx 1$, ($T_e \approx \varepsilon_F$). После снятия вырождения $\xi \gg 1$ функция $\Phi_{eph}(\xi)$ убывает с ростом ξ и при

$\xi \rightarrow \infty$ имеет асимптотику $\Phi_{eph}(\xi) \sim \ln \xi / \varepsilon^{3/2}$, а частота передачи энергии $\langle \nu_{eph} \rangle \sim \ln T_e / T_e^{3/2}$, совпадает с температурной зависимостью частоты передачи энергии от электронов ионам в максвелловской плазме.

Линейная зависимость $\langle \nu_{eph} \rangle$ от температуры T_{ph} подчеркивает факт рассеяния электронов на тепловых колебаниях.

Передача энергии. Средняя энергия, передаваемая фононам электронами в единицу объема в единицу времени, равна произведению средней энергии, передаваемой одним электроном $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle$ на концентрацию электронов, могущих участвовать в передаче энергии фононам

$$\frac{d \varepsilon}{d t} = \begin{cases} \langle \Delta \mathcal{E} \rangle \frac{k_B (T_e - T_{ph})}{\mathcal{E}_F} N_e & T_e < \mathcal{E}_F \\ \langle \Delta \mathcal{E} \rangle z(T_e) N_e & T_e \geq \mathcal{E}_F \end{cases}$$

Средняя энергия $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle$, передаваемая фонону одним электроном в единицу времени равняется

$$\langle \Delta \mathcal{E} \rangle = \left(\frac{9\pi}{2} \right)^{1/3} \left(\frac{3}{2} \right)^{1/2} \frac{4}{3} \frac{z}{mM} \cdot \left(\frac{r}{r_B} \right)^2 \frac{\hbar^3}{r^4} \left[1 - \left(\frac{1}{2^4 z} \right) \right] \Phi_{eph}(\xi),$$

Тогда
$$\frac{d \varepsilon}{d t} = \langle \Delta \mathcal{E} \rangle \frac{k_B (T_e - T_{ph})}{\mathcal{E}_F} N_e = g(\xi) (T_e - T_{ph}),$$

где $g(\xi)$ - коэффициент обмена энергией, равный:

$$g(\xi) = \langle \Delta \mathcal{E} \rangle \frac{k_B N_e}{\mathcal{E}_F} = \left(\frac{3}{2} \right)^{1/2} \left(\frac{8}{9\pi} \right)^{1/3} \frac{8}{3} \cdot \frac{\hbar k_B}{r_B^2} \frac{z^2}{M} N_e \left[1 - \left(\frac{1}{16z} \right) \right] \Phi_{eph}(\xi).$$

Температурная зависимость коэффициента обмена энергией $g(T_e)$ представлена на рис. 2.5.

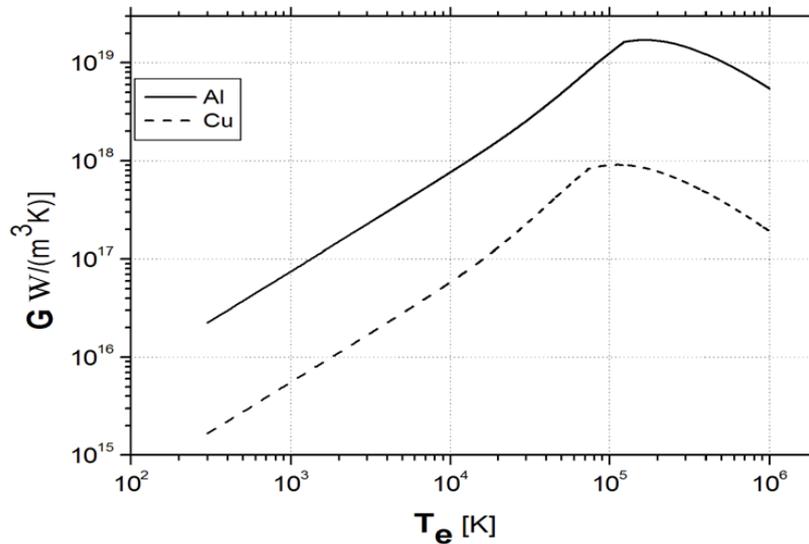


Рис.2.5. Температурная зависимость коэффициента обмена энергией $g(T_e)$

Третья глава посвящена разработке математической модели, описывающей неравновесный нагрев и динамику фазовых переходов. Построенная модель используется для исследования импульсного лазерного воздействия на металлы.

В общем случае лазерное воздействие на металлы сопровождается нагревом, плавлением и испарением. Относительная роль каждого из этих механизмов зависит от интенсивности излучения $G(t)$ и длительности импульса τ_L . В данной работе длительность воздействующего импульса выбиралась из диапазона $10^{-12} \leq \tau_L \leq 10^{-9}$ с, а интенсивность из диапазона $10^8 \leq G \leq 10^{14}$ Вт/см².

При нагреве решетки до температуры выше равновесных температур плавления T_m и испарения T_b простейшее описание фазовых трансформаций (без учёта гидродинамических эффектов) в веществе под воздействием лазерного излучения осуществляется в рамках совмещенного варианта задачи Стефана, включающего в себя классический и однофазный варианты, записанных в двухтемпературном приближении.

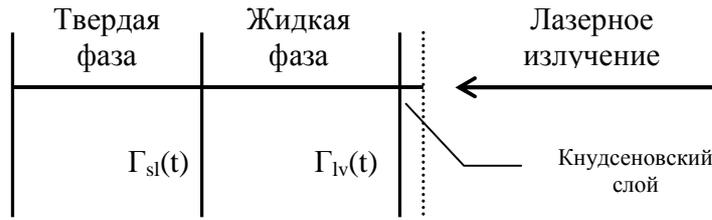


Рис.3.1.Схема лазерного воздействия и положения фазовых фронтов.

Неравновесный лазерный нагрев описывается системой уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon_e}{\partial t} &= -\frac{\partial W_e}{\partial x} - g(T_e - T_{ph}) - \frac{\partial G}{\partial x} \\ \frac{\partial \varepsilon_{ph}}{\partial t} &= -\frac{\partial W_{ph}}{\partial x} + g(T_e - T_{ph}) \\ \frac{\partial G}{\partial x} + \alpha(\hbar\omega, T_e)G &= 0 \end{aligned} \right\}_k \quad k = s, l \quad (3.1)$$

$$t > t_0, \quad 0 < x < \Gamma_{sl} \cup \Gamma_{sl} < x < \Gamma_{lv},$$

где $\lambda_e = \lambda(T_e, T_{ph})$, $\lambda_{ph} = \lambda(T_{ph})$, $W_e = -\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x}$, $W_{ph} = -\lambda_{ph} \frac{\partial T_{ph}}{\partial x}$,

$$\varepsilon_e = C_{ve}(T_e)T_e, \quad \varepsilon_{ph} = C_{vph}(T_{ph})T_{ph}, \quad g = g(T_e), \quad \alpha = \alpha(\hbar\omega, T_e).$$

Начальные и граничные условия для системы уравнений (3.1) формулируются следующим образом:

$$t = t_0 : T_e(t_0, x) = T_{ph}(t_0, x) = T_0 \quad (3.2)$$

$$x = x_0 : -\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} = -\lambda_{ph} \frac{\partial T_{ph}}{\partial x} = 0. \quad (3.3)$$

Процесс поверхностного плавления описывается в рамках классического варианта задачи Стефана, записанного для условий неравновесного нагрева

$$x = \Gamma_{sl}(t) : \left(\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right)_s = \left(\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right)_\ell, \quad T_{e,s} = T_{e,\ell}, \quad (3.4)$$

$$\left(\lambda_{ph} \frac{\partial T_{ph}}{\partial x} \right)_s - \left(\lambda_{ph} \frac{\partial T_{ph}}{\partial x} \right)_\ell = \rho_s L_m v_{sl}, \quad T_{sl} = T_{ph,s} = T_{ph,\ell} = T_m \quad (3.5)$$

Процесс поверхностного испарения описывается в приближении кнудсеновского слоя:

$$x = \Gamma_{kv}(t) : -\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} = \sigma T_e^4, \quad G(t) = A(\hbar\omega, T_e) \cdot G_0 \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau_L}\right)^2\right) \quad (3.6)$$

$$\left(-\lambda_{ph} \frac{\partial T_{ph}}{\partial x} \right)_k = \rho_k L_v v_{kv}, \quad \rho_k v_{kv} = \rho_v (v_{kv} - u), \quad P_k + \rho_k v_{kv}^2 = p_v + \rho_v (v_{kv} - u)^2,$$

$$T_v = \alpha_T(M) T_{ph,k}, \quad \rho_v = \alpha_\rho(M) \rho_H, \quad \alpha_T(M=1) = 0,633, \quad \alpha_\rho(M=1) = 0,328, \quad (3.7)$$

$$\rho_H = \frac{P_H(T_{ph,k})}{RT_{phk}}, \quad P_H(T_{ph,k}) = P_b \exp\left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_{ph,k}} \right) \frac{L_v}{R}.$$

где v_{kv} - скорость фронта испарения (сублимации), u - газодинамическая скорость потока массы на внешней стороне кнудсеновского слоя, P_k - давление в конденсированной среде, L_v , T_v , ρ_v , p_v - удельная энергия испарения, температура, плотность и давление пара, $\alpha_T(M)$, $\alpha_\rho(M)$ - коэффициенты Крута, M - число Маха, ρ_H , P_H - плотность и давление насыщенного пара, P_b , T_b - равновесные давление и температура кипения, R - газовая постоянная, σ - постоянная Стефана-Больцмана.

Для решения системы нелинейных уравнений (3.1) с условиями (3.4) - (3.8) использовался метод динамической адаптации детально изложенный в Главе I. В основу метода динамической адаптации положена процедура перехода к произвольной нестационарной системе координат, в которой легко решаются проблемы с подвижными границами $\Gamma_{sl}(t)$, $\Gamma_{kv}(t)$ и динамическим перераспределением узлов сетки.

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial(\Psi \varepsilon_e)}{\partial \tau} = -\frac{\partial(Q \varepsilon_e)}{\partial q} - \frac{\partial W_e}{\partial q} - \Psi g(T_e - T_{ph}) - \frac{\partial G}{\partial q} \\ \frac{\partial(\Psi \varepsilon_{ph})}{\partial \tau} = -\frac{\partial(Q \varepsilon_{ph})}{\partial q} - \frac{\partial W_{ph}}{\partial q} + \Psi g(T_e - T_{ph}) \\ \frac{\partial G}{\partial q} + \Psi \alpha G = 0 \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = -\frac{\partial Q}{\partial q}, \quad \frac{\partial x}{\partial q} = \frac{\partial \psi}{\rho} \end{array} \right\} k = s, \ell \quad (3.8)$$

$$\tau > \tau_0, \quad 0 < q < \Gamma_{sl} \cup \Gamma_{sl} < q < \Gamma_{kv},$$

Функция преобразования Q определяется из принципа квазистационарности и имеет вид

$$Q = \left(\alpha \Psi G - \frac{\partial W_e}{\partial q} - \frac{\partial W_{ph}}{\partial q} \right) / \left(\frac{\partial \varepsilon_e}{\partial q} + \frac{\partial \varepsilon_{ph}}{\partial q} + re \right) \quad (3.9)$$

$$\text{где - } W_e = -\frac{\lambda_e \rho}{\Psi} \frac{\partial T_e}{\partial q}, \quad W_{ph} = -\frac{\lambda_{ph} \rho}{\Psi} \frac{\partial T_{ph}}{\partial q}.$$

Дифференциальная задача (3.8), (3.9), аппроксимировались семейством консервативных разностных схем записанных в расчётном пространстве с помощью расчётных сеток $(\omega_i^j)_s$ и $(\omega_i^j)_\ell$, введенных в каждой из подобластей $0 < q < \Gamma_{sl} \cup \Gamma_{sl} < q < \Gamma_{lv}$ и численно решалась итерационным методом Ньютона.

Математическое моделирование использовалось для исследования двух режимов импульсного лазерного воздействия: короткое с $\tau_L = 10^{-9}$ с и ультракороткое с $\tau_L = 10^{-12}$ с на две мишени с сильно различающимися теплофизическими свойствами из алюминия и меди. Результаты моделирования должны были определить начало заметного вклада неравновесности в лазерный нагрев мишеней (или установить примерный порог применимости однотемпературного приближения), и оценить роль и влияние теплофизических и кинетических характеристик

металлов в условиях неравновесного нагрева. В расчётах учитывались температурные зависимости оптических характеристик обеих мишеней.

В наносекундном диапазоне использовался лазерный импульс с длительностью $\tau_L=10^{-9}$, плотностью энергии $J=2 \text{ Дж/см}^2$ и длиной волны $\lambda=0.8 \text{ мкм}$. Обычно считается, что лазерное воздействие на металлы в наносекундном диапазоне происходит без отрыва температур, но проведенные расчёты не подтвердили данное предположение.

На Рис. 3.2, 3.3 приведены временные зависимости электронной и фононной температур поверхности алюминиевой и медной мишеней. Из-за больших значений коэффициента энергообмена $g(T_e)$ у алюминия заметный отрыв температур $T_e > T_{ph}$, $\Delta T_{max} = T_{e,max} - T_{ph} \approx 700 \text{ К}$, наблюдается лишь в области за пиковым значением интенсивности импульса, рис.3.2.

Полное выравнивание температур достигается к концу импульса. В меди отрыв температур $T_e > T_{ph}$ реализуется на переднем фронте импульса, Рис. 3.3, и достигает величины $\Delta T_{max} \approx 1500 \text{ К}$. К концу импульса, из-за большой электронной теплопроводности и замедленного энергообмена реализуется обратное неравенство температур, $T_e < T_{ph}$. Таким образом, у меди эффект неравновесности проявляется значительно сильнее, чем у алюминия.

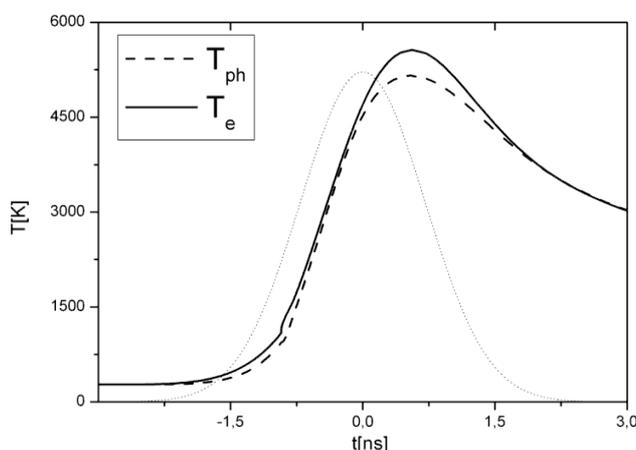


Рис. 3.2. Временные зависимости температуры поверхности алюминия. Сплошная линия соответствует электронной компоненте, пунктирная - фононной.

На Рис. 3.4, 3.5 приведены временные зависимости скоростей плавления и испарения алюминия и меди. Момент плавления у обоих металлов находится на переднем фронте импульса. Максимальные скорости плавления достигают $\sim 425 \text{ м/с}$ в алюминии, и $\sim 550 \text{ м/с}$ в меди. Максимальная скорость испарения у алюминия на 2 порядка, а у меди на 3 меньше максимальной скорости плавления. В обоих металлах максимальные значения скоростей плавления $v_{sl,max}$ и испарения $v_{lv,max}$ существенно разнесены во времени.

Характерной особенностью фазовых переходов (плавление, испарение) в условиях неравновесного нагрева является возникновение перегретых метастабильных состояний в приповерхностных слоях твердой и жидкой фаз, рис.3.6, 3.7. Их формирование определяется объемным нагревом решетки посредством электрон-фононного обмена и выносом энергии через межфазные границы потоками вещества $\rho_s v_{sl}$ и $\rho_l v_{lv}$. Глубина залегания $\Delta T_{Al,Cu}$ составляет примерно 6-16 нм. В жидкой фазе приповерхностные максимумы залегают на глубине $\Delta l \sim 9-20 \text{ нм}$ и

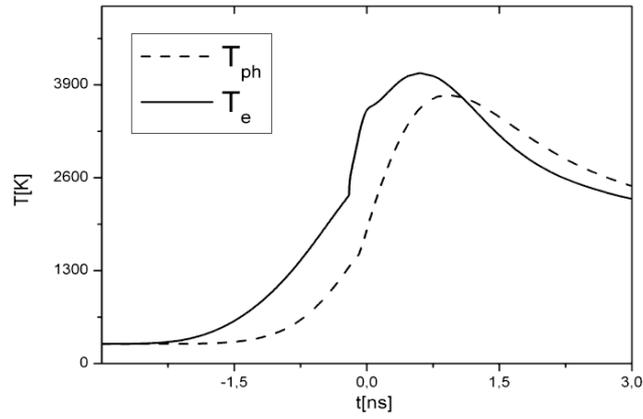


Рис. 3.3. Временные зависимости температуры поверхности меди. Сплошная линия соответствует электронной компоненте, пунктирная - фононной.

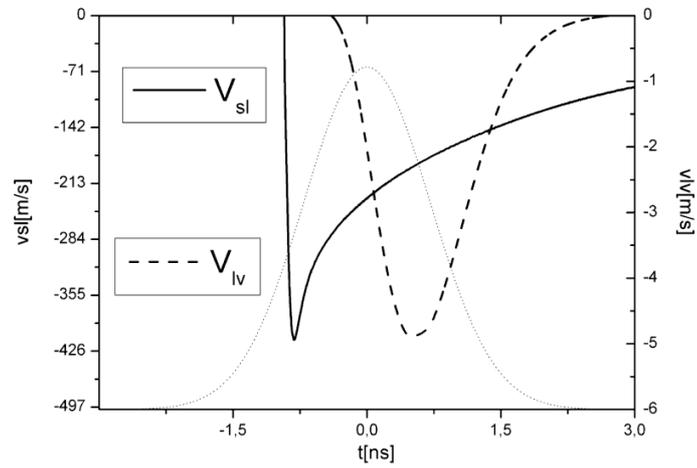


Рис. 3.4 Временные зависимости скоростей плавления и испарения в алюминии.

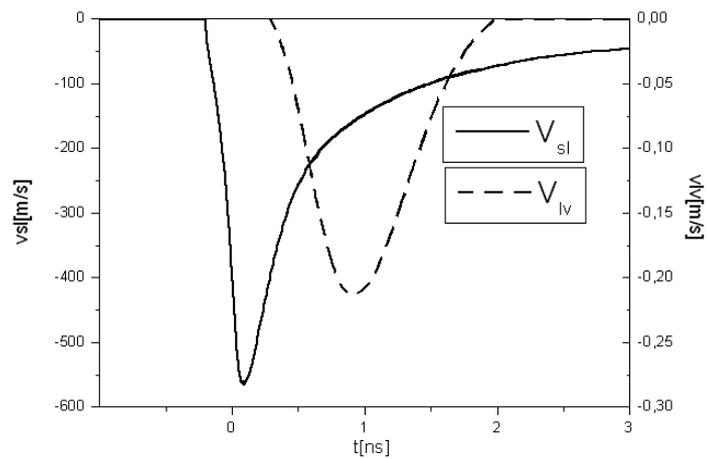


Рис. 3.5. Временная зависимость скорости плавления и скорости испарения у меди.

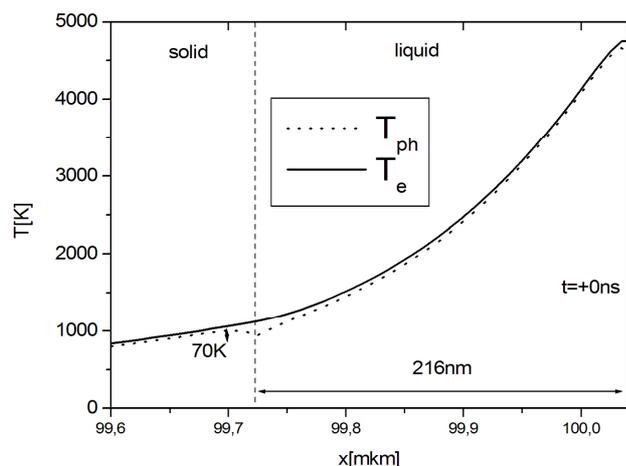


Рис. 3.6 Пространственное распределение электронной и фононной температур в алюминии, в момент времени $t=+0$ нс.

составляют величину $\Delta T_i = T_{ph,max} - T_{sur}$, $\Delta T_{i,Al} \approx 20$ К, $\Delta T_{i,Cu} \approx 0,9$ К.

Более высокие значения перегрева твердой фазы определяются более высокими скоростями распространения фронта плавления.

Термодинамическая неравновесность сказывается на величине коэффициента теплопроводности. Чем больше разрыв между температурами, тем выше коэффициент $\lambda_e(T_e, T_{ph})$ и тем больше вынос энергии из зоны облучения. Линейная оценка глубины зоны

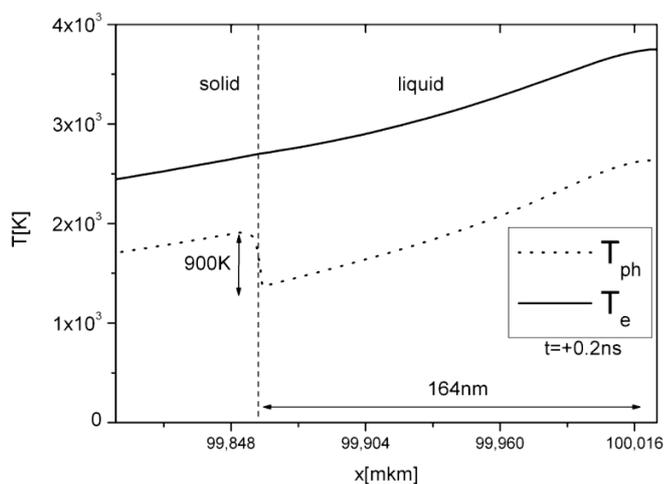


Рис. 3.7. Пространственное распределение электронной и фононной температур в Си.

теплового воздействия, определяемая по линейной оценке $\delta_i(t) = (at)^{0.5}$ для однотемпературной модели составляет $\delta_i(t) = 1.2 \mu m$ для алюминия и $\delta(t) \sim 2 \mu m$ для меди. Двухтемпературная модель дает более высокие значения: $\delta_i(t) = 1.55 \mu m$ для алюминия и $\delta(t) \sim 4.5 \mu m$ для меди.

Пикосекундное воздействие. Уменьшение длительности лазерного импульса до $\tau_L = 10^{-12}$ с и $J = 1$ Дж/см², способствует усилению неравновесных эффектов. На рис. 3.8, 3.9 приведены временные зависимости электронной и фононной температур поверхности алюминиевой и медной мишеней.

Максимальный отрыв температур соответственно достигает $\sim 6.2 \cdot 10^4 \text{ K}$ и $\sim 4.3 \cdot 10^4 \text{ K}$. Полное выравнивание температур $T_e \approx T_{ph}$ у алюминия происходит за $\sim 15 \text{ ps}$, у меди – за $\sim 60 \text{ ps}$. Быстрый нагрев мишеней пикосекундными импульсами предопределяет появление быстрых фазовых переходов. У алюминия максимальные скорости плавления $v_{sl}(t)$ достигают нескольких километров в секунду, а испарения $v_{lv}(t)$ – около сотни метров в секунду. Столь высокие скорости выноса вещества в совокупности с объёмным нагревом конденсированной фазы приводит к чрезвычайно сильному перегреву твёрдой и жидкой фаз. У алюминия, рис.3.10, решетка и жидкая фаза нагреваются до температур ($T_{ph} \sim 10^4 \text{ K}$, $T_l \sim 2 \cdot 10^4 \text{ K}$) превышающих критическую ($T_{cr} \sim 8 \cdot 10^3 \text{ K}$). У меди величина перегрева твёрдой фазы достигает $1.5 \cdot 10^3 \text{ K}$. В жидкой фазе из-за малой скорости перегрев практически отсутствует, рис.3.11.

Возникновение сильнонеравновесных состояний при пикосекундном воздействии вызывает резкое увеличение коэффициентов электронной теплопроводности в обоих материалах в 10 и более раз, превышающих равновесные значения. Высокие значения коэффициентов электронной теплопроводности формируют области термического воздействия с аномально большими размерами, рис. 3.12.

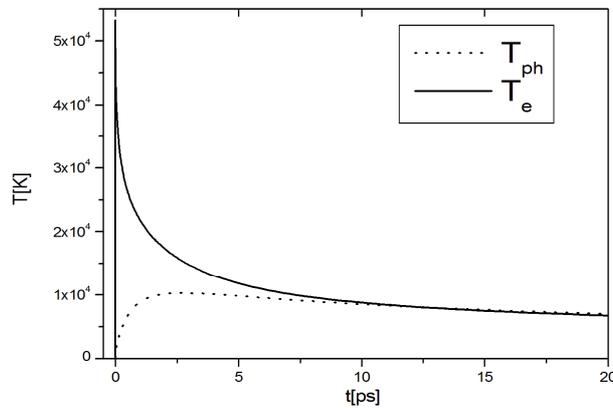


Рис 3.8. Временные зависимости электронной и фононной температуры поверхности алюминия.

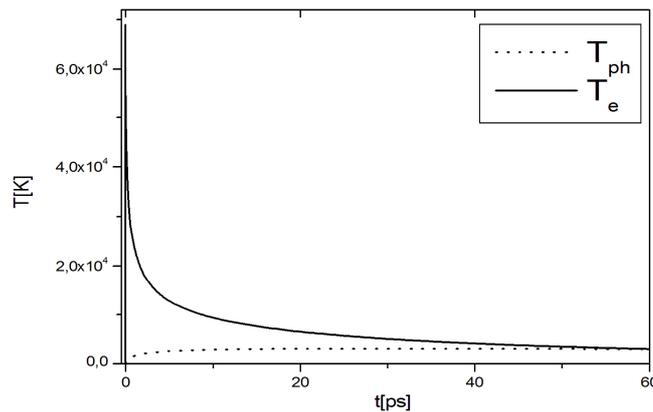


Рис 3.9 Временные зависимости электронной и фононной температуры поверхности меди.

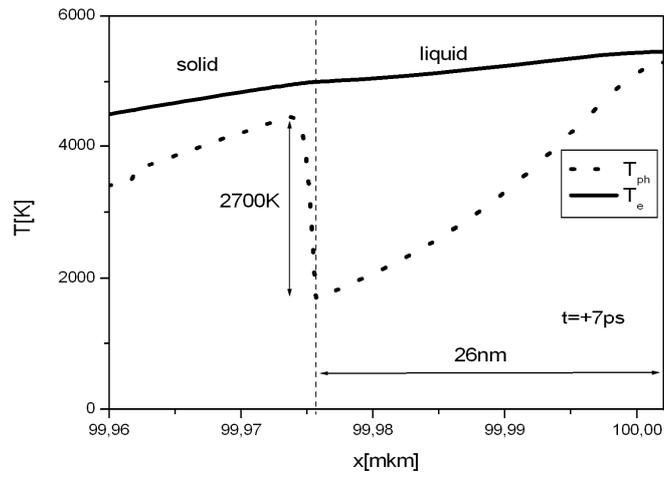


Рис. 3.10. Пространственное распределение электронной и фононной температуры алюминия.

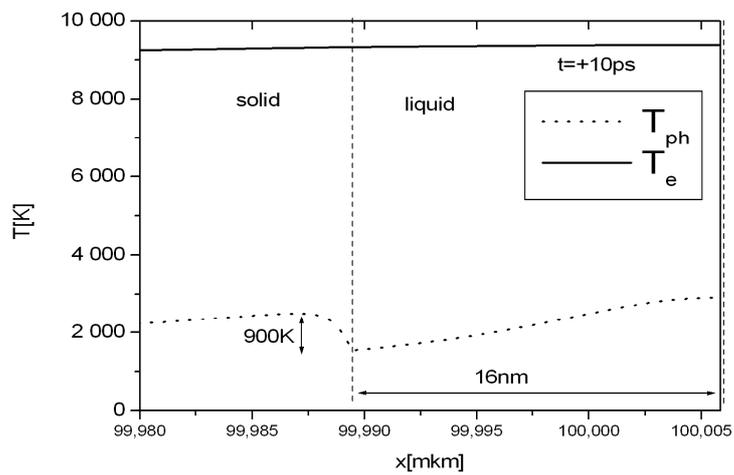


Рис. 3.11. Пространственное распределение электронной и фононной температуры меди.

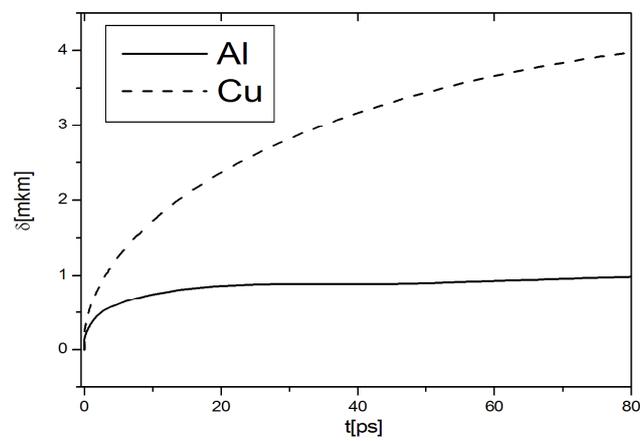


Рис. 3.12. Зона теплового воздействия для пикосекундного излучения.

В **Заключении** формулируются основные результаты работы.

1. Обобщен и применен к решению задач нелинейной теплопроводности и конвекции – диффузии с неподвижными и подвижными границами метод динамической адаптации. Определены оптимальные функции преобразования координат в классе задач, описываемых уравнениями параболического типа.
2. На основе модификации задачи Стефана для двухтемпературного приближения, построена математическая модель, описывающая неравновесный лазерный нагрев и быстрые фазовые переходы в металлах.
3. С помощью интегралов Ферми получены простые аналитические зависимости для термодинамических и теплофизических характеристик фононного и электронного Ферми-газа при произвольной температуре.
4. Математическое моделирование позволило установить, что примерный порог однотемпературного описания лазерного нагрева большинства металлов составляет $\sim 10^8$ с. В пикосекундном диапазоне быстрые фазовые переходы сопровождаются возникновением сильно перегретых (до нескольких тысяч градусов) метастабильных состояний в твердой и жидкой фазах.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. **A.V. Mazhukin.** Electronic and emission properties of metals and semiconductor. 3 - European Summer School 11 - 15 September 2006, pp. 75-76, Saint – Etienne, France.
2. **А.В.Мажукин.** Оптические свойства металлов. Тезисы докладов IV Международного научного семинара “Математические модели и моделирование в лазерно-плазменных процессах”, 30 января – 2 февраля 2007, Москва, Знание. Понимание. Умение. (Научный журнал Московского гуманитарного университета), С.254 -255.
3. **А.В.Мажукин.** Эмиссионные свойства металлов. Тезисы докладов IV Международного научного семинара “Математические модели и моделирование в лазерно-плазменных процессах”, 30 января – 2 февраля 2007, Москва, Знание. Понимание. Умение. (Научный журнал Московского гуманитарного университета), С.255.
4. **A.V. Mazhukin.** Dynamic adaptation in convection-diffusion equations. Third International Conference Computational methods in applied mathematics. СМАМ-3, Abstracts, Minsk, June 25 30, 2007, p.53.
5. **A.Mazhukin.** Dynamic adaptation in parabolic differential equations in partial derivatives. Proceedings of the III International Conference on Adaptive Modeling and Simulation ADMOS 2007, pp. 161 – 165, Edited by: K.Runesson, P.Diez (Eds), 22 – 24 October 2007, held in Göteborg, Sweden.ISBN: 978-84-96736-31-3.
6. **А.В.Мажукин, В.И.Мажукин.** Динамическая адаптация в параболических уравнениях. Журнал вычислительной математики и математической физики, 2007, т. 47, №11, pp. 1911 – 1934.
7. **A.V. Mazhukin, V.I.Mazhukin.** Dynamic Adaptation for Parabolic Equations. Computational Mathematics and Mathematical Physics 2007, vol.47, № 4, pp.
8. **A.V. Mazhukin, B.N.Chichkov.** Kinetics of electron-phonon relaxation in metals irradiated by ultrashort laser pulses. Book of abstracts European Material Research Society 2008 Spring Meeting (E-MRS 2008), May 26-30,- B-P2 45, pp.b-17.
9. **A.V. Mazhukin, M.G.Lobok.** Mathematical modeling of nano- and femtosecond laser ablation of aluminium. Book of abstracts 6th International Conference on photo-excited processes and applications. ICPEPA 2008. September 9-12, 2008, Sapporo, Hokkaido, Japan.- P-55.

10. V.I.Mazhukin **A.V. Mazhukin**, M.G.Lobok. Comparison of Nano- and Femtosecond Laser Ablation of Aluminum. Book of abstracts of International Conference "Advanced Laser Technologies" (ALT'08), September 13-18, 2008 Siofok, Hungary,- p. 202.
11. V.I. Mazhukin, **A.V. Mazhukin**, O.N. Koroleva. Optical properties of electron Fermi-gas of metals at arbitrary temperature and frequency. Book of abstracts of International Conference "Advanced Laser Technologies" (ALT'08), September 13-18, 2008 Siofok, Hungary,- p. 252.
12. **А.В.Мажукин**, О.Н. Королева. Определение температурной и частотной зависимостей оптических характеристик металлов. Тезисы докладов V Международного научного семинара "Математические модели и моделирование в лазерно-плазменных процессах". 29 января – 2 февраля 2008 года.- Из-во Московского гуманитарного университета, – Москва. - С.33.
13. O.N. Koroleva, **A.V. Mazhukin**, A.V. Shapranov. Optical properties of metals in a wide frequency and temperature range. Sixth International seminar. Mathematical models & modeling in laser-plasma processes. Abstracts. May 30-June 6 2009, Budva, Montenegro, стр. 31-32.
14. В.И. Мажукин, **А.В. Мажукин**, А.В.Шапранов. Динамическая адаптация в дифференциальных уравнениях в частных производных параболического типа. Энциклопедия низкотемпературной плазмы, Серия Б, Том УП – 1, Математическое моделирование в низкотемпературной плазме, Часть1, pp.190 – 216, 2008, Москва, Янус-К.
15. V. I. Mazhukin, **A.V. Mazhukin**, M. G. Lobok. Comparison of Nano- and Femtosecond Laser Ablation of Aluminium. *Laser Physics*, 2009, vol. 19, № 5, pp. 1169 – 1178.
16. V.I. Mazhukin, **A.V. Mazhukin**, O.N. Koroleva. Optical properties of electron Fermi-gas of metals at arbitrary temperature and frequency. . *Laser Physics*, 2009, vol. 19, № 5, pp. 1179 – 1186.
17. В.И.Мажукин, **А.В.Мажукин**, М.Г.Лобок. Математическое моделирование динамики фазовых переходов и перегретых метастабильных со стояний при нано – фемтосекундном лазерном воздействии на металлические мишени. Математическое моделирование, 2009, т. 21, № 11, стр. 99-112.
18. V.I.Mazhukin, O.N.Koroleva, **A.V.Mazhukin**. Application of Dynamical Adaptation to the Solution of Multifront Stefan Problem in Multilayered Materials. Proceedings of the IY International Conference on Adaptive Modeling and Simulation. Bruxelles, Belgium, 25-27 May 2009, pp. 137-140.
19. V.I.Mazhukin, P.V.Breslavsky, **A.V.Mazhukin**. Dynamical adaptation for gas dynamics problems. Proceedings of the IY International Conference on Adaptive Modeling and Simulation. Bruxelles, Belgium, 25-27 May 2009, pp. 141-144.
20. O.N. Koroleva, **A.V.Mazhukin**, A.V. Shapranov. Optical properties of metals in wild temperature and frequency range. Book of abstracts of International Seminar on Mathematical Models and Modeling in Laser-Plasma Processes (LpPM³ 2009).

Подписано в печать _____. Формат 60 x 84 1/16. Бумага офсетная.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 1,0. Тираж 100 экз. Заказ № _____

Москва