

## ДЕЙСТВИЕ УЛЬТРАКОРОТКОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА НА МЕТАЛЛЫ: ДВУХТЕМПЕРАТУРНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ, ВСПЕНИВАНИЕ РАСПЛАВА И ЗАМОРАЖИВАНИЕ РАЗРУШАЮЩЕЙСЯ НАНОПЕНЫ

© 2014 г. Н. А. Иногамов<sup>\*</sup>, доктор физ.-мат. наук; В. В. Жаховский<sup>\*\*</sup>, канд. физ.-мат. наук;  
Ю. В. Петров<sup>\*</sup>, доктор физ.-мат. наук; В. А. Хохлов<sup>\*</sup>, канд. физ.-мат. наук;  
С. И. Ашитков<sup>\*\*</sup>, канд. физ.-мат. наук; К. П. Мигдал<sup>\*\*\*</sup>, аспирант; Д. К. Ильницкий<sup>\*\*\*</sup>;  
Ю. Н. Эмиров<sup>\*\*\*\*</sup>, доктор физ.-мат. наук; П. С. Комаров<sup>\*\*</sup>, канд. физ.-мат. наук;  
М. Б. Агранат<sup>\*\*</sup>, доктор физ.-мат. наук, профессор;  
С. И. Анисимов<sup>\*</sup>, доктор физ.-мат. наук, член-корр. РАН;  
В. Е. Фортвов<sup>\*\*</sup>, доктор физ.-мат. наук, академик РАН

<sup>\*</sup>Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Московская обл., Черноголовка

<sup>\*\*</sup>Объединённый институт высоких температур РАН, Москва

<sup>\*\*\*</sup>Всероссийский НИИ автоматики им. Н.Л. Духова, ГК "Росатом", Москва

<sup>\*\*\*\*</sup>Advance Materials Research Institute, Florida Intern. University, Miami FL, USA

E-mail: nailinogamov@googlemail.com

Ультракоткий нагрев вещества переводит его в двухтемпературное (2Т) состояние с горячими электронами. В этом состоянии происходят быстрое увеличение толщины прогретого слоя в глубь металла (по сравнению с толщиной скин-слоя) и резкий подъем давления в слое прогрева из-за высокого темпа нагрева (инерционное удержание). Разработана методика учета 2Т, термомеханических и многомерных (структурирование мишени) явлений. Она опирается на квантово-механические вычисления с помощью функционала плотности, решения кинетических уравнений, 2Т гидродинамические и молекулярно-динамические расчеты. Изучен механизм формирования сверхупругих ударных волн и образования сложных поверхностных структур. Соответствующие результаты имеют большое значение для разработки перспективных нанометаллургических технологий, связанных с лазерным пиннингом, повышением коррозионной стойкости и изменением оптических характеристик поверхности.

*Ключевые слова:* ультракоткий лазерный импульс, двухтемпературное состояние, лазерная абляция, транспортные коэффициенты.

Коды OCIS: 320.2250, 320.5390, 321.7130, 140.3330, 140.6810, 160.3900.

Поступила в редакцию 09.12.2013.

### 1. Введение

Рассматриваются процессы, происходящие в металлах под действием ультракотких лазерных импульсов (УКЛИ), таких, что длительность импульса  $\tau_L$  лежит в пределах от фемтосекунд до пикосекунд. Период световых колебаний составляет величину порядка нескольких фемтосекунд. Если длительность  $\tau_L$  меньше, чем время установления теплового равновесия между электронами и ионами  $t_{eq}$ , то поглощение лазерного излучения электронами приводит к возникновению в металле двухтемпературного (2Т) состояния [1, 2]. В этом состоянии температура электронов  $T_e$  на 1–2 порядка превышает температуру ионов  $T_i$

в диапазоне рассматриваемых здесь поглощенных флюенсов  $F_{abs} \approx 0.01\text{--}1$  Дж/см<sup>2</sup>. Важно то, что время релаксации  $t_{eq} = 2\text{--}10$  пс меньше гидродинамического временного масштаба  $t_s = d_T / c_s \approx 15\text{--}30$  пс (для разных металлов), где  $d_T \approx 50\text{--}150$  нм – толщина прогретого поверхностного слоя, а  $c_s \approx 3\text{--}6$  км/с – скорость звука. Именно вследствие высокого темпа нагрева возникают изучаемые здесь явления.

Для анализа 2Т состояния мы используем 2Т уравнение состояния [3], коэффициент теплопроводности  $\kappa$  [3–7] и коэффициент электрон-ионного теплообмена  $\alpha$  [6, 8–10] для простых металлов [8], для диэлектриков [9, 10] и для благородных и переходных металлов [6], в которых ситуация осложняется влиянием

электронных  $d$ -зон (см. также работы [11–15]). Это позволяет описать возникновение 2Т состояния после поглощения света и переход от 2Т состояния к гидродинамическому движению.

Имеются две группы гидродинамических явлений. К первой группе относятся генерация, распространение и эволюция волны сжатия, а ко второй – процессы, связанные с кавитацией у поверхности. Эти группы разделены в пространстве и времени  $x, t$  в относительно небольшой области  $d_T, t_s$  (см. следующий раздел). Показано, что формирование гидродинамической волны сопровождается образованием более крутого участка на профилях давления, плотности и скорости и что упругопластические превращения происходят при необычно высоких напряжениях (явление сверхупругости). Крутой участок профиля появляется вследствие плавления, распространяющегося на 2Т стадии со сверхзвуковой скоростью. Такой гомогенный режим плавления с широким слоем смеси твердой и жидкой фаз противоположен гетерогенному режиму, когда имеется узкий фронт плавления. В гомогенном случае рост массы расплава идет за счет увеличения доли жидкой фазы в смеси, тогда как в гетерогенном случае количество расплава растет за счет вещества, пересекающего фронт плавления.

Слой высокого давления у поверхности распадается на две акустические волны. Одна из них бежит от поверхности. Соответствующие процессы относятся к первой группе. Другая волна бежит к поверхности, отражается от нее и меняет знак – волна сжатия превращается в волну растяжения. Это приводит к возникновению растягивающих напряжений в веществе. Если растяжение достигает критических значений (прочности вещества на разрыв), то в конденсированной мишени возникают зародыши паровой фазы (нуклеация). Процессы, связанные с кавитацией, относятся ко второй группе явлений. Эти явления локализованы у поверхности.

Расчеты показывают, что для всех металлов критическое значение растягивающих напряжений соответствует флюенсам  $F_{abl}$  (порог термомеханической абляции), которые в 2–3 раза превышают порог плавления  $F_m$ . Следовательно, нуклеация происходит в жидкой фазе. Инерционное расширение двухфазной смеси пар-жидкость приводит к снижению объемной доли жидкости в смеси. Поэтому пузырьки в жидкости трансформируются в пену, в кото-

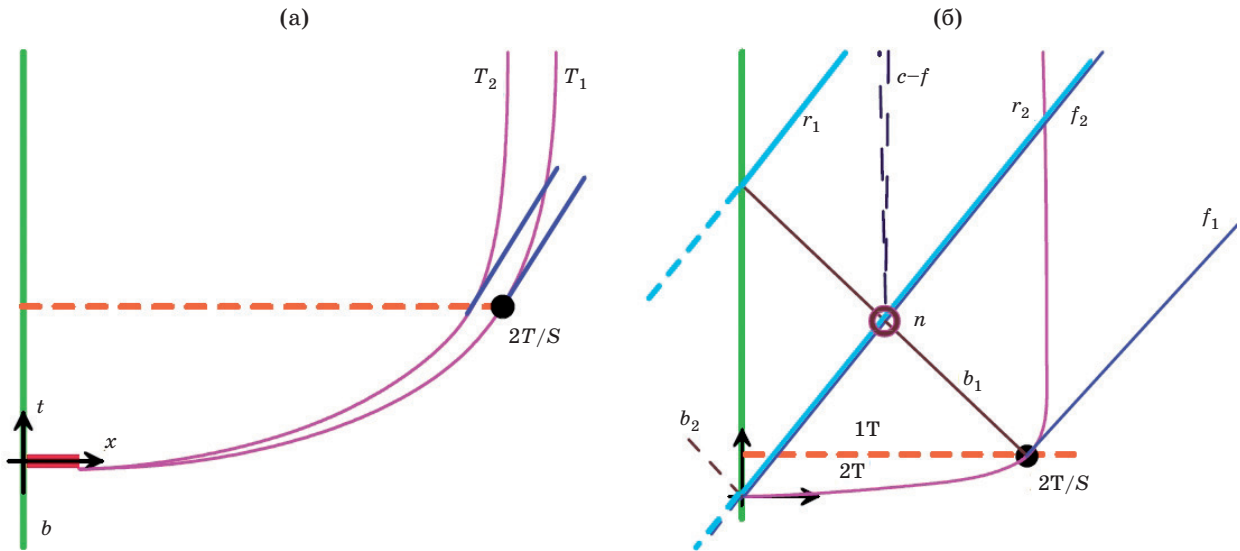
рой доля жидкости мала. Пузырьки в жидкости имеют вид многогранников Вороного. Это обеспечивает минимизацию поверхностной энергии. Пузырьки в виде многогранников разделены плоскими жидкими мембранами. Растяжение мембран до толщины в 2–3 атомных слоя приводит к их разрыву. Разрывы случаются не одновременно. Разрывы инициируют колебания, связанные с поверхностным натяжением. Расчеты показывают, что периоды колебаний составляют порядка наносекунды. На том же временном масштабе имеет место кристаллизация расплава. Поэтому поверхностное натяжение не успевает полностью разгладить возмущения поверхности. Отвердевание разорванных мембран приводит к формированию поверхностных структур. В соответствии с механизмом формирования этих структур, они в данной работе называются «замороженными разорванными нанопенами».

## 2. Общая картина рассматриваемых явлений

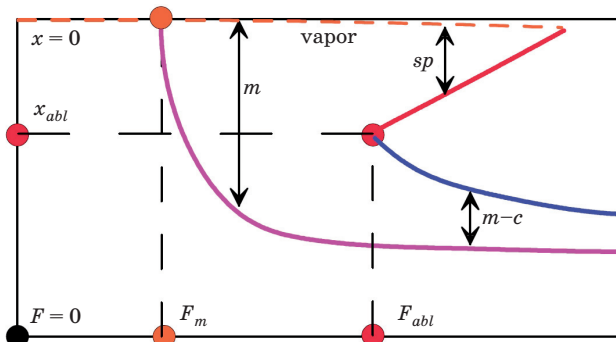
Последовательность процессов, инициированных УКЛИ, охватывает широкий спектр пространственно-временных масштабов:

- (1) поглощение излучения в скин-слое ( $\delta \approx 15$  нм,  $\tau_L \approx 0.1$  пс),
- (2) 2Т стадия ( $d_T \approx 100$  нм,  $t_{eq} \approx 2$ – $10$  пс),
- (3) гидродинамика смеси пар-жидкость ( $d_T \approx 100$  нм,  $t \approx 0.1$ – $1$  нс),
- (4) отвердевание расплава и прекращение движения возле поверхности мишени ( $d_T \approx 100$  нм,  $t \approx 1$  нс).

На рис. 1а показаны области, относящиеся к стадиям (1) и (2), а на рис. 1б представлены стадии (2) и (3). Координата  $x$  на рис. 1 отсчитывается от начального положения границы мишени, а время – от момента максимальной интенсивности лазерного пучка на границе. Поэтому ось  $t$  проходит посередине прямоугольника. Важнейший пространственный параметр  $d_T$  определяет глубину прогрева. Слой  $d_T$  формируется на 2Т стадии. Масштабы  $d_T$  и  $t_{eq}$  превосходят масштабы прямоугольника (1) на рис. 1. Нас интересуют значения флюенса, при которых возникают сильные гидродинамические эффекты. Порог  $F_{abl}$  намного выше порога плавления  $F_m$  (см. рис. 2). Поэтому при  $F > F_{abl}$  перегрев кристалла над кризой плавления велик. В результате происходит быстрое плавление металла на 2Т стадии.



**Рис. 1.** а – поглощение энергии УКЛИ происходит внутри маленького прямоугольника с размерами, которые определяются толщиной скина и длительностью импульса. Это область процесса (1). Кривые, исходящие из прямоугольника (тепловая волна), штриховая горизонтальная прямая (на которой  $t = t_{eq}$ ) и сплошная вертикальная линия (траектория границы мишени) ограничивают область 2Т состояний (2). б – три потока акустических характеристик: волна, идущая в объем мишени  $f_1-f_2$ ; волна, идущая к границе  $b_1-b_2$ , и отраженная от границы волна  $r_1-r_2$ . Волны  $f_1-f_2$  и  $b_1-b_2$  образуются вследствие распада слоя высокого давления толщиной  $d_T$ , созданного быстрым нагревом.



**Рис. 2.** Зависимости максимальной (во времени) толщины расплава  $x_{Lagr}(F_{abs})$  (кривая “ $m$ ”) и других характерных толщин от поглощенного флюенса. Лагранжева толщина  $x_{Lagr}$  отсчитывается от лагранжевой частицы, которая соответствует границе мишени с вакуумом до прихода УКЛИ:  $t \rightarrow -\infty$ . На горизонтальной оси отложен поглощенный флюенс  $F_{abs}$ . Выше порога абляции  $F_{abl}$  появляется откольная пластина “ $sp$ ”. Толщина пластины уменьшается с ростом  $F_{abs}$  и обращается в нуль на пороге испарения  $F_{ev}$  [4, 16–20]. Имеются испаренный слой “ $vapor$ ” и слой сплошной жидкости “ $m-c$ ” (melting-cavitation). При  $F_{abl} < F < F_{ev}$  между “ $sp$ ” и “ $m-c$ ” находится двухфазная смесь пар-жидкость. При  $F_{ev} < F$  эта смесь образует единое целое с испаренным слоем “ $vapor$ ”. Доля жидкой фазы в смеси уменьшается со временем. В мгновенном пространственном распределении эта доля растет по направлению к слою “ $m-c$ ”.

Соответственно, сверхзвуковое распространение тепла на 2Т стадии сопровождается сверхзвуковым увеличением толщины слоя расплава (гомогенное плавление). Разумеется, гомогенное плавление невозможно описать в приближении задачи Стефана. Наклон кривых  $T_1, T_2$  в области 2Т состояний (2) превышает наклон звуковых характеристик  $s$  (см. рис. 1а). В одно-температурной (1Т) области темп распространения тепла резко уменьшается. Звуковая волна  $s$  отделяется от тепловой волны при переходе от сверхзвукового к дозвуковому режиму распространения тепла. Так формируется волна сжатия  $f_1-f_2$ , показанная на рис. 1б.

Акустическая волна, которая бежит внутрь образца, состоит из потоков прямых  $f$ - и отраженных  $r$ -характеристик (рис. 1 и 3). Поток  $f$ -характеристик создает положительное давление. Поток  $r$ -характеристик возникает как результат отражения от границы с вакуумом. Это отражение меняет знак у давления, так что  $r$ -характеристики создают отрицательные давления. Они отвечают за растяжение в распространяющейся волне [21–24]. При условии  $F > F_{abl}$  амплитуда растягивающих напряжений в отраженной волне превышает предел прочности – начинается кавитация. Отметим, что прочность расплава в условиях со сверхбыстрым темпом деформации  $\dot{V}/V \approx 10^9 \text{ с}^{-1}$

выше, чем в условиях малых или средних темпов деформации [25–27]. В условиях облучения УКЛИ эти прочностные характеристики сравнимы с теоретическим пределом прочности, который определяется межзатомным взаимодействием.

Волна, образованная  $f$ - и  $r$ -характеристиками ( $f$ ,  $r$ -волна), нелинейна. На пороге абляции  $F_{abl}$  отношение максимума амплитуды положительного давления  $p_+$  в волне к объемному упругому модулю равно  $p_+ / K \approx 0.2$ . Это отношение увеличивается с ростом флюенса.  $f$ ,  $r$ -волна состоит из передней, средней и задней частей. Передняя часть образована  $f$ -характеристиками, задняя –  $r$ -характеристиками, переход между  $f$ - и  $r$ -характеристиками составляет среднюю часть (рис. 16). На ранней стадии ( $t \approx t_s$ ) передняя и задняя части имеют пологие профили с умеренными градиентами и их длины порядка  $d_T$ . В то же время средняя часть короткая и крутая (см. [9, 18, 21, 28]). На начальной стадии профили давления повторяют температурный профиль и далеки от профиля с ударной волной (УВ). Передняя часть есть прямое повторение температурного профиля, а задняя часть – перевернутое. Именно этот переворот профиля приводит к появлению крутой средней части бегущей  $f$ ,  $r$ -волны.

Как следствие нелинейности,  $f$ - и  $r$ -характеристики не параллельны друг другу, так как они отвечают разным значениям давления. Эти характеристики фокусируются на передней и задней сторонах волны и дефокусируются в средней части. Поэтому плавная часть волны становится более крутой, в то время как крутая часть – более пологой [9, 18, 21, 28]. Фокусировка характеристик и рост крутизны волны на ее передней стороне приводят к образованию УВ в точке перегиба профиля давления. Далее амплитуда УВ увеличивается и образуется УВ с треугольным профилем давления. Такая форма профиля совсем не похожа на начальный профиль, который повторял распределение температуры. Процесс эволюции нелинейных волн, изученный с помощью молекулярной динамики (МД), описан в работах [23, 29–33]. Ниже представлено сравнение результатов МД-моделирования нелинейных волн с результатами новых 2Т гидродинамических расчетов, в которых наряду с 2Т эффектами впервые учтены эффекты упругости.

Нуклеация при флюенсе, слегка превышающем порог абляции  $F_{abl}$ , создает медленно расширяющуюся зону кавитации (см. рис. 16).

Ниже порога абляции характеристика  $b_1$  распространяется налево до свободной поверхности. Она отражается от свободной поверхности как отраженная характеристика  $r_1$ . Поэтому задняя часть  $f$ ,  $r$ -волны формируется ниже  $F_{abl}$ . Если  $F > F_{abl}$ , ситуация качественно меняется – выше точки нуклеации характеристика  $b_1$  исчезает. Вместо характеристик  $b_1$  и  $r_2$  появляются два откольных импульса – один бежит налево от точки нуклеации на рис. 16, другой – направо. Задняя часть  $f$ ,  $r$ -волны при  $F > F_{abl}$  исчезает. Эта часть состоит из  $r$ -характеристик.

В то же время передняя сторона  $f$ ,  $r$ -волны сохраняется после нуклеации, так как она движется впереди правого откольного импульса. Вплоть до момента образования треугольной УВ эволюция передней части  $f$ ,  $r$ -волны не зависит от того, произошла нуклеация или нет. В треугольной УВ максимум давления достигается сразу за скачком. Опрокидывание профиля и образование скачка в точке перегиба происходят вдоль потока  $f$ -характеристик, идущих направо со скоростью звука. Поэтому на этом явлении не сказывается кавитация, происходящая позади. Поток  $f$ -характеристик постепенно исчезает в растущем правом скачке. Последняя  $f$ -характеристика – это характеристика  $f_2$ . Она несет максимальное давление  $p_+$  и исчезает в УВ в момент времени  $t_m$ . После момента  $t_m$  давление за фронтом УВ начинает падать вследствие разрежения.

Левый и правый откольные импульсы возникают как результат интерференции многих УВ вокруг отдельных нанопор, расширяющихся на ранней стадии после их появления со скоростями порядка скорости звука. Левый откольный импульс осциллирует внутри откольной пластины, как показано на рис. 3. Многократные отражения левого откольного импульса от границ откольной пластины вызывают колебания скорости смещения свободной границы [23, 29, 31]. Это явление хорошо известно в физике ударных волн [34–37]. Обычный период таких колебаний составляет  $10^{-6}$  с, что намного превышает периоды порядка  $10^{-11}$  с, характерные для воздействия УКЛИ. Это связано с громадной разницей в пространственных масштабах – миллиметры против микрометров.

Эволюция слоя вспененного расплава металла в случае  $F_{abl} < F < F_{ev}$  представлена на рис. 3. При малом превышении порога  $F = F_{abl} + 0$

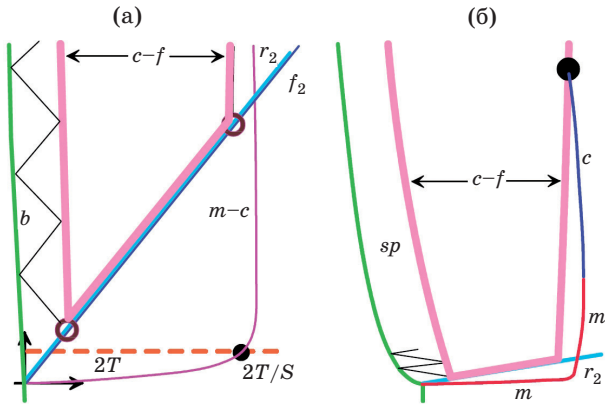


Рис. 3. Динамика кавитационной зоны в случае заметного превышения над порогом  $F_{abs}$ . а – начальная стадия формирования кавитационной пены “c-f” (cavitation-foam). б – выход фронта кристаллизации “c” на правую границу пены “c-f”. Начало замораживания уцелевших и разорванных пузырьковых структур. Кривая “m-m-c” дает границу расплава. На участке “m-m” фронт плавления продвигается в толщу мишени. Участок “c” соответствует фронту кристаллизации.

образуется один слой пузырей. При этом нуклеация происходит в тонком слое возле точки пересечения характеристик  $b_1$  и  $r_2$  (см. рис. 16). С увеличением превышения над порогом  $F - F_{abl}$  толщина слоя с пузырьками растет (ср. рис. 16 и рис. 3). Нуклеация начинается раньше и на меньшей глубине относительно точки пересечения  $b_1 - r_2$  на рис. 16. Далее нуклеация продолжается вдоль конечного отрезка характеристики  $r_2$  (см. рис. 3). Этот отрезок выделен двумя “пустыми” кружками на рис. 3а. Новые и новые слои пузырьков появляются по мере распространения характеристики  $r_2$ . Вследствие расширения пузырьки в жидкости переходят в пену (см. разд. 1). Имеется большая разница в скоростях расширения между стадиями формирования пены (рис. 3). Более горячая часть (а) имеет скорости порядка 1 км/с. Правая часть пены контактирует со сплошной конденсированной фазой остатка мишени, находящегося правее пены на рис. 3. Эта часть движется со скоростями 10–100 м/с, сопоставимыми со скоростью фронта кристаллизации “c” на рис. 3б. В момент, выделенный сплошным кружком на рис. 3б, начинается замораживание пены. В результате образуются хаотические поверхностные структуры, которые называются “замороженными разорванными нанопенами”.

### 3. Система уравнений

УКЛИ переводит металл в состояние с возбужденной электронной подсистемой, так как энергия лазерного излучения поглощается электронами во внутрizonных и межзонных переходах, а обмен энергией между электронами и ионами идет медленно из-за большой разницы масс. При этом возникает много интересных вопросов, касающихся воздействия УКЛИ на фононную подсистему металла. К ним относятся возбуждение когерентных фононов и возникновение глауберговских состояний [38–40]. Эти вопросы находятся за рамками данной работы. Система уравнений одномерной (1D) гидродинамики имеет вид:

$$\rho(x^0, t) \partial_{x^0} x(x^0, t) = \rho^0, \quad (1)$$

$$\rho^0 \partial_t u = -\partial_{x^0} P(x^0, t), \quad \partial_t x(x^0, t) = u(x^0, t),$$

$$\begin{aligned} \rho^0 \partial_t (E_e / \rho) &= -\partial_{x^0} q - \rho^0 \alpha (T_e - T_i) / \rho + \\ &+ \rho^0 Q / \rho - P_e \partial_{x^0} u, \quad q = -\rho \kappa \partial_{x^0} T_e / \rho^0, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\rho^0 \partial_t (E_i / \rho) = \rho^0 \alpha (T_e - T_i) / \rho - P_i \partial_{x^0} u, \quad (3)$$

$$Q = F_{abs} \exp(-t^2 / \tau_L^2) \exp(-x / \delta) \theta(x) / (\sqrt{\pi} \tau_L \delta).$$

Уравнения (1) описывают сохранение массы и импульса, а также траекторию  $x(x_0, t)$  лагранжевой частицы  $x_0$ . Соотношение  $x(x_0, t = -\infty) = x_0$  определяет лагранжеву координату. Уравнения (2) и (3) являются балансами энергии электронной и ионной подсистем. Ось  $x$ , вдоль которой происходит движение (см. рис. 1 и 3), перпендикулярна к плоскости границы;  $Q$  – дает мощность нагрева;  $\theta(x) = 1$ , если  $x > 0$ ,  $\theta(x) = 0$ , если  $x < 0$ . Для решения системы (1)–(3) необходимо знать термодинамические функции  $E_e(\rho, T_e, T_i)$ ,  $E_i(\rho, T_e, T_i)$ ,  $P_e(\rho, T_e, T_i)$ ,  $P_i(\rho, T_e, T_i)$  (уравнение состояния [3]) и электронные кинетические коэффициенты  $\kappa$  (коэффициент теплопроводности) и  $\alpha$  (коэффициент электронного теплообмена [6]) в  $2T$  состоянии. Ниже будет приведен расчет теплопроводности.

### 4. Электронный спектр

Тепловое возбуждение электронов изменяет термодинамические и кинетические характеристики металлов. Мы используем метод функционала плотности (DFT – метод) для нахождения внутренней энергии, электронной теплоемкости и давления (уравнения состояния) подобно тому, как это было сделано в работах

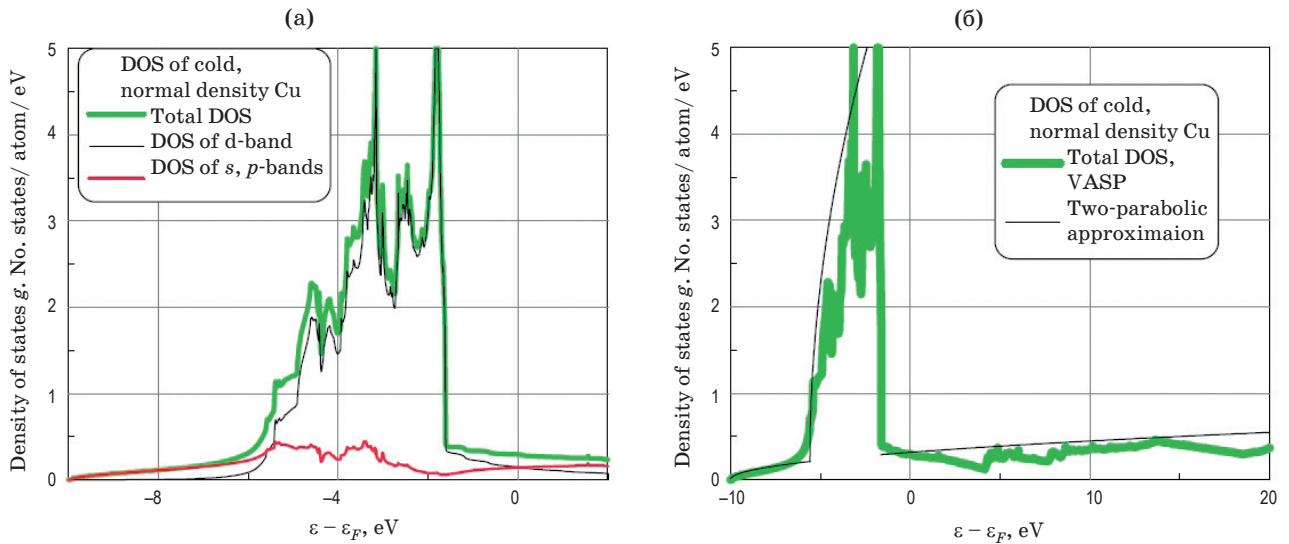


Рис. 4. а – полная  $g$  и парциальные  $g_s, g_d$  плотности состояний холодной меди при нормальной плотности согласно расчету по методу DFT. б – сравнение функций  $g$  согласно DFT и в двухпараболическом приближении  $g = g_s + g_d$ ,  $g_i = (\sqrt{2/\pi^2}) [m_i^{3/2} / n_{at} / \hbar^3] \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_i}$ ;  $i = s$  или  $d$ ,  $n_{at}$  – концентрация атомов,  $\varepsilon_i = \varepsilon_s$  в случае  $s$  зоны,  $\varepsilon_i = \varepsilon_1$  в случае  $d$ -зоны. Нижние границы зон обозначены  $\varepsilon_s$  и  $\varepsilon_1$ . Зона  $s$  существует при  $\varepsilon > \varepsilon_s$ . Зона  $d$  располагается в пределах  $\varepsilon_1 < \varepsilon < \varepsilon_2$ .

[3, 11, 41, 42]. Электронный и ионный вклады в энергию и давление разделены, как в работе [3]. На рис. 4 представлены результаты расчета плотности состояний меди  $[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$ , выполненные с помощью пакета программ VASP [43]. Учитывались электронные энергетические зоны только валентных ( $3d$  и  $4s, p$ ) электронов. Действие внутренних электронов, отделенных от валентных большой запрещенной зоной, учитывалось с помощью псевдопотенциала PAW LDA. Рассматривались 25 электронных энергетических зон в  $21^3$  точках неприводимой части зоны Бриллюэна, с параметром обрезания плоских волн 500 эВ.

Мы используем однопараболическое приближение спектра электронов для простых (однозонных) металлов и двухпараболическое приближение – для благородных и переходных металлов, где присутствуют  $s, p$ -зоны (называемые для краткости  $s$ -зоной) и  $d$ -зона. Это позволяет рассматривать электроны как квазичастицы с эффективными массами  $m^*$ . Мы вернемся к двухпараболическому приближению ниже. Метод DFT, реализованный в пакете программ VASP, был использован для расчета зонной структуры и нахождения масс  $m^*$  и границ зон. На рис. 4б показана аппроксимация плотности состояний меди в параболическом приближении.

## 5. Электрон-ионный теплообмен

Тепловое возбуждение электронов изменяет не только термодинамические, но и электронные кинетические характеристики металла. Для нас особенно важны электронный коэффициент теплопроводности  $\kappa$  и коэффициент  $\alpha$  [6, 11] обмена энергией между электронами и ионами, входящие в систему (1)–(3). При вычислении коэффициента  $\alpha$  электрон-фононное взаимодействие рассчитывалось из экранированного кулоновского взаимодействия электронов и ионов с диэлектрической проницаемостью в приближении Линдхарда (см. статью [6] и ссылки, приведенные в этой статье). Коэффициент  $\alpha$  практически не зависит от ионной температуры  $T_i$ , если эта температура выше температуры Дебая. Для тантала, металла с  $d$ -электронами, значения коэффициента электрон-фононного теплообмена слабо зависят также и от температуры  $T_e$ . Для других металлов эти зависимости ведут себя монотонно. Если правый край  $d$ -зоны  $\varepsilon_2$  выше, чем химический потенциал при нулевой температуре  $\mu(T_e = 0)$ , то  $\alpha(T_e)$  снижается с ростом температуры  $T_e$ . При обратном условии  $\varepsilon_2 < \mu(T_e = 0)$  функция  $\alpha(T_e)$  возрастает с температурой. Коэффициент  $\alpha$  благородных металлов значительно меньше, чем у переходных металлов

с небольшим превышением границы  $d$ -зоны  $\varepsilon_2$  над энергией Ферми. Дело в том, что у последних намного выше плотность состояний на поверхности Ферми.

Перенос энергии к ионной подсистеме через  $s$ -электроны доминирует у благородных металлов при сравнительно небольших электронных температурах. В случае благородных металлов  $d$ -зона вносит основной вклад в электрон-ионную передачу энергии, если температура  $T_e$  такова, что снимается квантовое вырождение  $d$ -электронов.

## 6. Теплопроводность

Для решения системы (1)–(3) необходимо знать коэффициент теплопроводности  $\kappa(\rho, T_e, T_i)$ . В кристалле коэффициент  $\kappa$  определяется частотой  $\nu_{ei}$  рассеяния электронов на ионах (электрон-фононными столкновениями) и частотой  $\nu_{ee}$  электрон-электронных столкновений. Частоты  $\nu_{ee}$  простых, благородных и пере-

ходных металлов в зависимости от температуры электронов рассчитаны в работах [5, 6]. Расчеты [5, 6] выполнены в предположении, что частота  $\nu_{ei}$  не зависит от электронной температуры, а частота  $\nu_{ei}$  находилась по 1Т экспериментальным значениям электропроводности. В следующем разделе построена теория подсчета электрон-ионного вклада в теплопроводность  $\kappa$ . Она освобождает нас, во-первых, от предположения о независимости  $\nu_{ei}$  от температуры  $T_e$  и, во-вторых, от необходимости использовать сопротивления из эксперимента. Оказывается, предположение о независимости  $\nu_{ei}$  от  $T_e$  выполняется в случае простых и благородных металлов и не выполняется в случае переходных металлов с небольшими значениями параметра  $\varepsilon_2 - \mu(T_e = 0) > 0$ .

На рис. 5 показаны зависимости коэффициента  $\kappa(\rho, T_e, T_i)$  меди, золота и алюминия, подсчитанные по методике [5, 6]. На рис. 5а, 5б крутой рост теплопроводности при сравнительно небольших температурах  $T_e$  связан с увели-

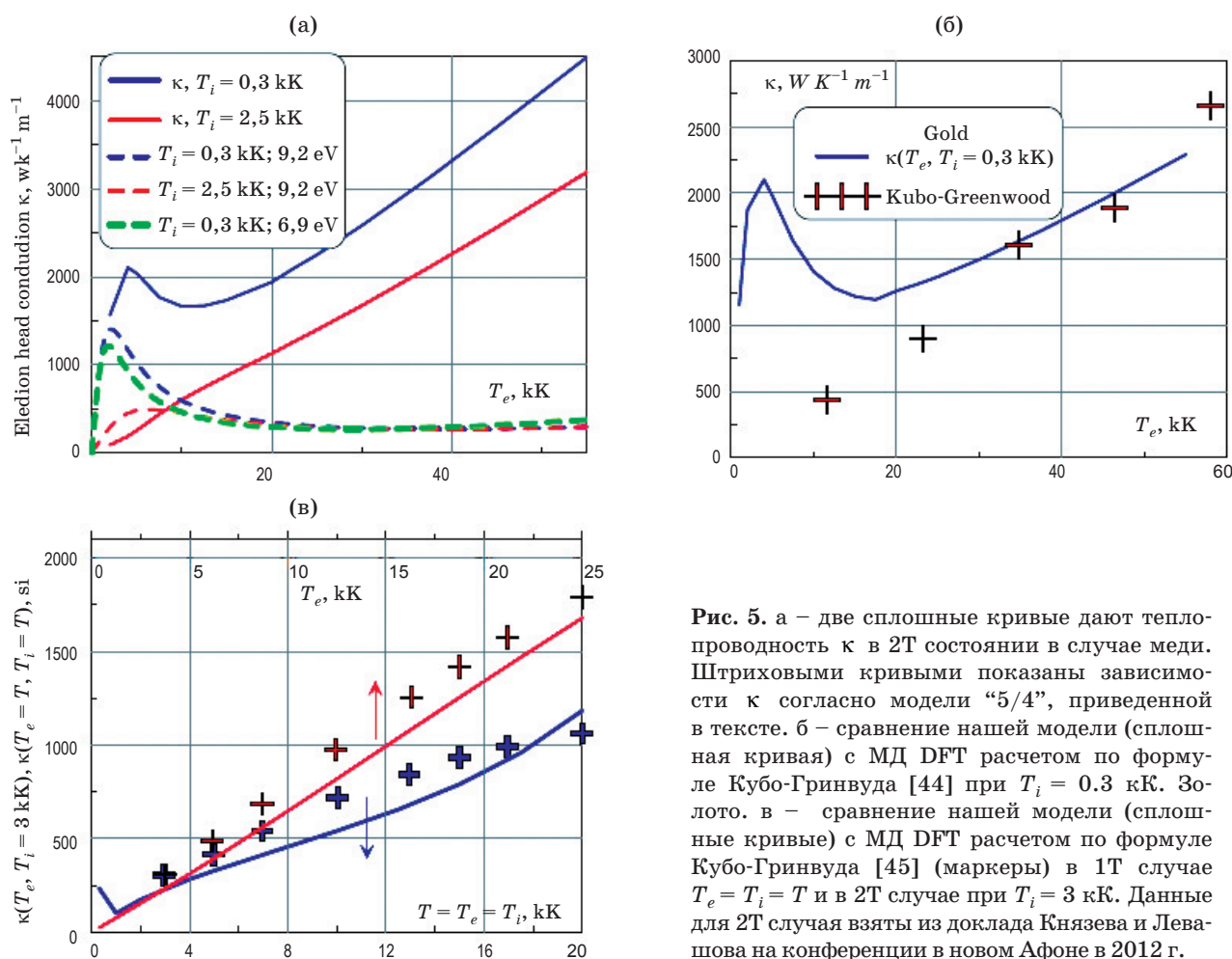


Рис. 5. а – две сплошные кривые дают теплопроводность  $\kappa$  в 2Т состоянии в случае меди. Штриховыми кривыми показаны зависимости  $\kappa$  согласно модели “5/4”, приведенной в тексте. б – сравнение нашей модели (сплошная кривая) с МД DFT расчетом по формуле Кубо-Гринвуда [44] при  $T_i = 0.3$  кК. Золото. в – сравнение нашей модели (сплошные кривые) с МД DFT расчетом по формуле Кубо-Гринвуда [45] (маркеры) в 1Т случае  $T_e = T_i = T$  и в 2Т случае при  $T_i = 3$  кК. Данные для 2Т случая взяты из доклада Князева и Левашова на конференции в новом Афоне в 2012 г.

чением электронной теплоемкости  $C_e$  по мере роста температуры  $T_e$  за счет частичного снятия вырождения. Полагаем, что частота электрон-ионных столкновений  $\nu_{ei}$  является фиксированной для каждой из кривых с заданной температурой ионов  $T_i$ . Частота электрон-электронных столкновений  $\nu_{ee}$  меньше, чем частота  $\nu_{ei}$  до конца этого интервала быстрого роста теплопроводности. Быстрый рост заканчивается, когда частота  $\nu_{ee}$  становится больше частоты  $\nu_{ei}$ . При малых температурах  $T_i$  появляется даже максимум в зависимости коэффициента теплопроводности от  $T_e$ .

При повышенных температурах  $T_i$  крутой рост теплопроводности уменьшается, а максимум расплывается. Темп роста частоты  $\nu_{ee}$  с температурой  $T_e$  не превосходит темпа роста теплоемкости  $C_e$  с температурой  $T_e$ , поэтому рост коэффициента  $\kappa(T_e)$  продолжается, но уже с меньшим наклоном. Мы видим, что при повышенной температуре электронов коэффициент  $\kappa(T_e)$  значительно превышает его значение при комнатной температуре. Это одна из двух причин (другой причиной является достаточно большая длительность 2Т стадии) того, почему глубина нагретого слоя  $d_T$  в несколько раз больше, чем глубина скин-слоя.

На рисунке 5а штриховыми кривыми показаны температурные зависимости коэффициента  $\kappa$  согласно известной формуле “5/4”:

$$\kappa = C(\theta_e^2 + 0.16)^{5/4}(\theta_e^2 + 0.44)/\sqrt{\theta_e^2 + 0.092}(\theta_e^2 + \beta\theta_i),$$

где  $\theta_e$  и  $\theta_i$  – электронная и ионная температуры, нормированные на температуру Ферми  $\theta_e = k_B T_e / \epsilon_F$ ,  $\theta_i = k_B T_i / \epsilon_F$ . Коэффициенты  $C$  и  $\beta$  для меди, используемые при построении штриховых кривых на рис. 5а, взяты из работы [15]. В выражении “5/4” недооценивается теплопроводность при высоких температурах  $T_e$  из-за переоценки частоты  $\nu_{ee}$ , вычисляемой по низкотемпературной асимптотике  $\nu_{ee} \sim T_e^2$  (см. обсуждение этого обстоятельства в статье [5]). Частота  $\nu_{ee}$  в выражении “5/4” сильно превышает частоту электрон-ионных столкновений  $\nu_{ei}$  при повышенных значениях  $T_e$ . Поэтому зависимости “5/4” от  $T_e$  при различных температурах  $T_i$  сливаются в одну кривую. При небольших температурах  $T_e$  выражение “5/4” дает результаты, аналогичные результатам нашей модели.

В настоящее время расчеты методом DFT используются для определения квантовых ки-

нетических свойств жидкостей и твердых тел, в том числе и в 2Т состоянии [44, 45]. В этих расчетах суперячейки в несколько сотен атомов моделировались методом квантовой молекулярной динамики (МД), как правило, только с одной  $k$ -точкой. Периодические краевые условия устанавливаются на гранях суперячейки. Моделирование начиналось с размещения атомов в конфигурации кристаллической решетки. Постепенно температура повышалась до заданного значения. После этого температура  $T_i$  фиксировалась. Таким образом, накапливался достаточно представительный набор ионных конфигураций при заданной температуре. Каждая конфигурация в таком наборе использовалась для вычисления теплопроводности по формуле Кубо-Гринвуда. Результаты для каждой температуры усреднялись по набору конфигураций.

Известно, что в случае кристалла такие расчеты являются более трудными, чем в случае расплава. На рис. 5б, 5в наши результаты сравниваются с расчетами по формуле Кубо-Гринвуда в случае золота и алюминия. Расчет по Кубо-Гринвуду на рис. 5б выполнен для систем из 32 атомов [44]. Была использована сетка с  $2^3$  числом  $k$ -точек. Результаты [44] для золота с  $T_i = 0.3$  кК согласуются с нашими расчетами при повышенных температурах  $T_e$ . При малых температурах  $T_e$  результаты разнятся. При расчетах с помощью DFT не обнаруживается локальный максимум теплопроводности. На рис. 5в приведено сравнение в случае алюминия. Представлены два примера. Первый из них соответствует 1Т случаю:  $T = T_e = T_i$ . Второй пример относится к 2Т случаю с фиксированной температурой  $T_i = 3$  кК. Видно, что наши результаты находятся в удовлетворительном согласии с результатами расчетов по методу DFT в широком диапазоне температур.

## 7. Электрон-фононное взаимодействие в 2Т состоянии

Выше при рассмотрении коэффициента электронной теплопроводности  $\kappa$  мы принимали во внимание рост вклада электрон-электронного взаимодействия с ростом температуры электронов  $T_e$ . При этом частота  $\nu_{ei}$  электрон-ионных столкновений считалась не зависящей от температуры  $T_e$ . Расчеты, приведенные ниже, показывают, что это условие не выполняется в случае переходных металлов с неболь-



шими значениями параметра  $\varepsilon_2 - \mu(T_e = 0)$ . Рассмотрим теперь зависимость частоты  $\nu_{ei}$  электрон-ионных столкновений от температуры электронов и вклад этих столкновений в коэффициенты проводимости и электронной теплопроводности при высоких температурах электронов. Краткая версия нашего подхода была представлена в работе [7]. Мы рассматриваем металлы с  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -электронными зонами энергии, возбуждаемыми лазерным излучением. Электронные спектры в нашем подходе находятся в параболическом приближении, и они отличаются для  $s$ -,  $p$ -электронов (которые мы называем просто  $s$ -электронами) и  $d$ -электронов:  $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_s + p^2/(2m_s)$ , если  $\mathbf{p} \in s$ , и  $\varepsilon(\mathbf{p}') = \varepsilon_1 + p'^2/(2m_d)$ , если  $\mathbf{p}' \in d$ . Электроны в этих зонах имеют эффективные массы  $m_s$  и  $m_d$  соответственно (см. таблицу). Параметры параболического приближения, приведенные в таблице, подбираются так, чтобы приближенная плотность электронных состояний была близка к рассчитываемой методом DFT. Энергия электронов в  $s$ -зоне лежит в интервале  $\varepsilon > \varepsilon_s$ , в то время как в  $d$ -зоне энергия ограничена конечным интервалом  $\varepsilon_1 < \varepsilon < \varepsilon_2$ . Электронные функции распределения Ферми для  $s$ - и  $d$ -зон имеют форму

$$f_s(\mathbf{p}) = [1 + \exp((\varepsilon(p) - \mu)/k_B T_e)]^{-1}, \quad (4)$$

если  $\mathbf{p} \in s$ , и

$$f_s(\mathbf{p}') = [1 + \exp((\varepsilon(p') - \mu)/k_B T_e)]^{-1}, \quad (5)$$

если  $\mathbf{p}' \in d$ , с общим химическим потенциалом  $\mu(T_e)$  и температурой  $T_e$ . Функция распределения фононов при ионной температуре  $T_i$  имеет вид

$$N(q) = [\exp(\hbar\omega_q / k_B T_i) - 1]^{-1}. \quad (6)$$

Параметры двухпараболической аппроксимации электронных спектров

Металл	$\varepsilon_s$ , эВ	$\varepsilon_1$ , эВ	$\varepsilon_2$ , эВ	$z_s$	$z_d$	$m_s, m_e$	$m_d, m_e$
Al	-11,06	-		3	-	1,05	-
Au	-8,33	-7,18	-1,83	1,5	9,5	0,87	4,64
Cu	-10,02	-5,59	-1,65	1,75	9,25	1,02	7,85
Fe	-9,4	-5,5	0,77	1	7	0,75	4,68
Ni	-8,8	-5,0	0,17	1,5	8,5	1,10	6,15
Pt	-10	-7,5	0,2	1,5	8,5	0,78	3,31
Ta	-8	-4,6	1	2	3	1,05	2,39

Зависимость частоты фонона  $\omega_q$  от его квазиимпульса  $q$  выбрана как  $\hbar\omega_q = c_s q (1 - q/q_D (2 - 3\xi) + (q/q_D)^2 (1 - 2\xi))$ , где  $q_D$  – дебаевский импульс, а параметр  $\xi$  отвечает за отклонение спектра акустических фононов от линейной формы при больших фононных квазиимпульсах.

### 7.1. Кинетические уравнения для $s$ - и $d$ -электронов проводимости при их рассеянии на фононах

Число  $s$ -электронов, выходящих за пределы трехмерного объема в импульсном пространстве  $d^3 p$  в единицу времени, может быть записано в виде

$$\dot{N}_-^s = \dot{N}_-^{s,s+ph} + \dot{N}_-^{s,d+ph} + \dot{N}_-^{s+ph,s} + \dot{N}_-^{s+ph,d}.$$

Выражение

$$\dot{N}_-^{s,s+ph} = f_s(p) 2d\mathbf{p} (2\pi\hbar)^{-3} \times \int W^{ss}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') (1 - f_s(p')) (N_q + 1) V (2\pi\hbar)^{-3} d\mathbf{p}' \quad (7)$$

описывает число  $s$ -электронов с энергией  $\varepsilon(\mathbf{p})$ , покидающих элемент  $d\mathbf{p}$  и переходящих в другое состояние  $\mathbf{p}'$  внутри  $s$ -зоны с энергией  $\varepsilon'$  с испусканием фонона (процесс  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}' + \mathbf{q}$ ). Здесь  $V$  – объем системы. Скорость изменения числа электронов

$$\dot{N}_-^{s+ph,s} = f_s(p) 2d\mathbf{p} (2\pi\hbar)^{-3} \times \int W^{ss}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') (1 - f_s(p')) N_q V (2\pi\hbar)^{-3} d\mathbf{p}' \quad (8)$$

задает число  $s$ -электронов, покидающих элемент  $d\mathbf{p}$  и переходящих в другие состояния  $s$ -зоны вследствие поглощения фонона ( $\mathbf{p} + \mathbf{q} \rightarrow \mathbf{p}'$  процесс). Символы  $\dot{N}_-^{s,d+ph}$  и  $\dot{N}_-^{s+ph,d}$  обозначают числа  $s$ -электронов, покидающих элемент  $d\mathbf{p}$ , переходя в состояния  $d$ -зон в силу соответственно испускания и поглощения фонона. Дельта-функция в выражениях (7) и (8) описывает сохранение электронной энергии без учета энергии фононов.

Подобным способом мы можем записать число  $s$ -электронов, входящих в элемент  $d\mathbf{p}$  в единицу времени, –

$$\dot{N}_+^s = \dot{N}_+^{s+ph,s} + \dot{N}_+^{s,s+ph} + \dot{N}_+^{d+ph,s} + \dot{N}_+^{d,s+ph}.$$

Здесь выражения

$$\dot{N}_+^{d+ph,s} = (1 - f_s(p)) 2d\mathbf{p} (2\pi\hbar)^{-3} \times \int W^{ss}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') f_d(p') N_q V (2\pi\hbar)^{-3} d\mathbf{p}' \quad \text{и}$$

$$\dot{N}_+^{d,s+ph} = (1 - f_s(p)) 2d\mathbf{p} (2\pi\hbar)^{-3} \times \int W^{ss}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') f_d(p') (N_q + 1) V (2\pi\hbar)^{-3} d\mathbf{p}'$$

задают количество  $s$ -электронов, входящих в элемент  $d\mathbf{p}$  из  $d$ -зоны из-за поглощения фонона и его испускания соответственно. Слагаемые  $\dot{N}_+^{s,ph,s}$  и  $\dot{N}_+^{s,s+ph}$  дают число  $s$ -электронов, входящих в элемент  $d\mathbf{p}$  из-за поглощения и испускания фонона соответственно, но из  $s$ -зоны. Результирующая скорость изменения количества  $s$ -электронов в единице фазового объема в результате электрон-фононных столкновений определяется как

$$\begin{aligned} \dot{N}_s(\mathbf{p}) &= \dot{N}_+^s - \dot{N}_-^s = \\ &= \int_{\mathbf{p}' \in s} W^{ss}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') [f_s(p') - f_s(p)] \times \\ &\quad \times (2N_q + 1) V (2\pi\hbar)^{-3} d\mathbf{p}' + \\ &+ \int_{\mathbf{p}' \in d} W^{sd}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') [f_d(p') - f_s(p)] \times \\ &\quad \times (2N_q + 1) V (2\pi\hbar)^{-3} d\mathbf{p}'. \end{aligned}$$

С другой стороны, скорость изменения количества  $s$ -электронов на единицу фазового объема равна  $df_s/dt$ , так что обычным способом получаем кинетическое уравнение

$$df_s/dt = (\partial f_s / \partial \mathbf{p}) \mathbf{e} \mathbf{E} = (f_s)'_{\varepsilon} (\mathbf{p} / m_s) \mathbf{e} \mathbf{E} = \dot{N}_s,$$

где  $m_s$  – эффективная масса  $s$ -электронов,  $(f_s)'_{\varepsilon} = df_s/d\varepsilon$ . Аналогично находим скорость изменения числа  $d$ -электронов на единицу фазового объема за счет электрон-фононных столкновений –

$$\begin{aligned} \dot{N}_d(\mathbf{p}') &= \dot{N}_+^d - \dot{N}_-^d = \\ &= \int_{\mathbf{p} \in d} W^{dd}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') [f_d(p) - f_s(p')] \times \\ &\quad \times (2N_q + 1) V (2\pi\hbar)^{-3} d\mathbf{p} + \\ &+ \int_{\mathbf{p} \in s} W^{ds}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') [f_s(p) - f_d(p')] \times \\ &\quad \times (2N_q + 1) V (2\pi\hbar)^{-3} d\mathbf{p}. \end{aligned}$$

Кинетическое уравнение для  $d$ -электронов имеет вид

$$df_d/dt = (\partial f_d / \partial \mathbf{p}) \mathbf{e} \mathbf{E} = (f_d)'_{\varepsilon} (\mathbf{p} / m_d) \mathbf{e} \mathbf{E} = \dot{N}_d.$$

В приближении времени релаксации имеем  $df/dt = -(f - f_0) / \tau(p) = -f_1(\mathbf{p}) / \tau(p) = (e / m^*) f_1'_{\varepsilon} \mathbf{p} \mathbf{E}$ .

Здесь  $f = f_0 + f_1$ , где  $f_0$  – равновесная функция распределения в отсутствие электрического поля, а  $f_1 = (e / m^*) (-f_1'_{\varepsilon}) \mathbf{p} \mathbf{E} \tau(p)$  – поправка, определяемая полем.

При этом

$$f_1^s(\mathbf{p}) = \eta_s(\varepsilon) \mathbf{p} \mathbf{E} \tau_s(\varepsilon), \quad f_1^d(\mathbf{p}') = \eta_d(\varepsilon) \mathbf{p}' \mathbf{E} \tau_d(\varepsilon).$$

Линеаризация кинетического уравнения для  $s$ -электронов приводит к выражению

$$\begin{aligned} -\eta_s(\varepsilon) \mathbf{p} \mathbf{E} = \\ \int_{\mathbf{p}' \in s} W^{ss}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') [\eta_s(\varepsilon) \mathbf{p}' \mathbf{E} \tau_s(\varepsilon) - \eta_s(\varepsilon) \mathbf{p} \mathbf{E} \tau_s(\varepsilon)] \times \\ \times (2N_q + 1) V (2\pi\hbar)^{-3} d\mathbf{p}' + \\ + \int_{\mathbf{p}' \in d} W^{sd}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') [\eta_d(\varepsilon) \mathbf{p}' \mathbf{E} \tau_d(\varepsilon) - \eta_s(\varepsilon) \mathbf{p} \mathbf{E} \tau_s(\varepsilon)] \times \\ \times (2N_q + 1) V (2\pi\hbar)^{-3} d\mathbf{p}'. \end{aligned}$$

Однако мы можем записать

$$\mathbf{p}' \mathbf{E} = p' E \cos \alpha' = p' E (\cos \alpha \cos \theta + \sin \alpha \sin \theta \cos \varphi),$$

где углы  $\alpha$  – между векторами  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{E}$ ,  $\alpha'$  – между векторами  $\mathbf{p}'$  и  $\mathbf{E}$ ,  $\theta$  – между векторами  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}'$ . После интегрирования по углу  $\varphi$  между плоскостями  $\mathbf{p} \mathbf{p}'$  и  $\mathbf{p} \mathbf{E}$  получим

$$\begin{aligned} \mathbf{p}' \mathbf{E} &= p' E \cos \alpha' = p' E \cos \alpha \cos \theta = \\ &= (p' / p) p E \cos \alpha \cos \theta = (p' / p) \mathbf{p} \mathbf{E} \cos \theta. \end{aligned}$$

Вследствие сохранения энергии (здесь мы учитываем квазиупругость электрон-фононных столкновений) при  $s \rightarrow s$  рассеянии имеем  $p' = p$ . Обозначая  $t = -\cos \theta$  и принимая во внимание, что  $q^2 = p^2 + p'^2 + 2pp't$ , получаем

$$d\mathbf{p}' = 2\pi p'^2 dp' dt = 2\pi m^* q d\varepsilon' dq / p.$$

Отсюда для  $s$ -электронов после сокращения общего множителя  $\mathbf{p} \mathbf{E}$  получаем

$$\begin{aligned} -\eta_s(\varepsilon) = \\ = \int_{\mathbf{p}' \in s} W^{ss}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') [\eta_s(\varepsilon) \cos \theta \tau_s(\varepsilon) - \eta_s(\varepsilon) \tau_s(\varepsilon)] \times \\ \times (2N_q + 1) V (2\pi\hbar)^{-3} (2\pi m_s q / p) d\varepsilon' dq + \\ + \int_{\mathbf{p}' \in d} W^{sd}(q) \delta(\varepsilon - \varepsilon') \times \\ \times [\eta_d(\varepsilon) (p' / p) \cos \theta \tau_d(\varepsilon) - \eta_s(\varepsilon) \tau_s(\varepsilon)] \times \\ \times (2N_q + 1) V (2\pi\hbar)^{-3} (2\pi m_d q / p) d\varepsilon' dq. \end{aligned}$$

Интегрирование по  $\varepsilon'$  с учетом наличия  $\delta$ -функции дает

$$\begin{aligned} -\eta_s(\varepsilon) &= \eta_s(\varepsilon) \tau_s(\varepsilon) \int W^{ss}(q) (\cos \theta - 1) \times \\ &\quad \times (2N_q + 1) V (2\pi\hbar)^{-3} (2\pi m_s q / p) dq + \\ &+ \eta_d(\varepsilon) \tau_d(\varepsilon) \int_d W^{sd}(q) (p' / p) \cos \theta (2N_q + 1) \times \\ &\quad \times V (2\pi\hbar)^{-3} (2\pi m_d q / p) dq - \\ &- \eta_s(\varepsilon) \tau_s(\varepsilon) \int_d W^{sd}(q) (2N_q + 1) \times \\ &\quad \times V (2\pi\hbar)^{-3} (2\pi m_d q / p) dq. \end{aligned}$$

Введем обозначения:

$$\int_s W^{ss}(q)(1 - \cos\theta)(2N_q + 1) \times \\ \times V(2\pi\hbar)^{-3}(2\pi m_s q / p) dq = H_{ss}(\epsilon), \\ \int_d W^{sd}(q)(p' / p) \cos\theta(2N_q + 1) \times \\ \times V(2\pi\hbar)^{-3}(2\pi m_d q / p) dq = H_{sd}(\epsilon), \\ \int_d W^{sd}(q)(2N_q + 1) \times \\ \times V(2\pi\hbar)^{-3}(2\pi m_d q / p) dq = G_{sd}(\epsilon). \quad (9)$$

Тогда кинетическое уравнение для  $s$ -электронов принимает форму

$$\eta_s(H_{ss} + G_{sd})\tau_s - \eta_d H_{sd} \tau_d = \eta_s. \quad (10)$$

Аналогично из баланса  $d$ -электронов получаем второе уравнение для  $\tau_s$  и  $\tau_d$ :

$$\eta_s H_{ds} \tau_s - \eta_d (H_{dd} + G_{ds})\tau_d = -\eta_d \quad (11)$$

где

$$\int_d W^{dd}(q)(1 - \cos\theta)(2N_q + 1) \times \\ \times V(2\pi\hbar)^{-3}(2\pi m_d q / p') dq = H_{dd}(\epsilon), \\ \int_s W^{ds}(q)(p / p') \cos\theta(2N_q + 1) \times \\ \times V(2\pi\hbar)^{-3}(2\pi m_s q / p') dq = H_{ds}(\epsilon),$$

$$\int_s W^{ds}(q)(2N_q + 1) \times \\ \times V(2\pi\hbar)^{-3}(2\pi m_s q / p') dq = G_{ds}(\epsilon). \quad (12)$$

Из уравнений (10) и (11) в случае, когда происходит переход электронов между  $s$ - и  $d$ -зонами, учитывая, что  $\eta_s/\eta_d = m_d/m_s$ , находим времена релаксации  $s$ - и  $d$ -электронов через матричные элементы  $H$  и  $G$

$$\tau_s(\epsilon) = \frac{(m_s / m_d)H_{sd} + H_{dd} + G_{ds}}{(H_{ss} + G_{sd})(H_{dd} + G_{ds}) - H_{sd}H_{ds}},$$

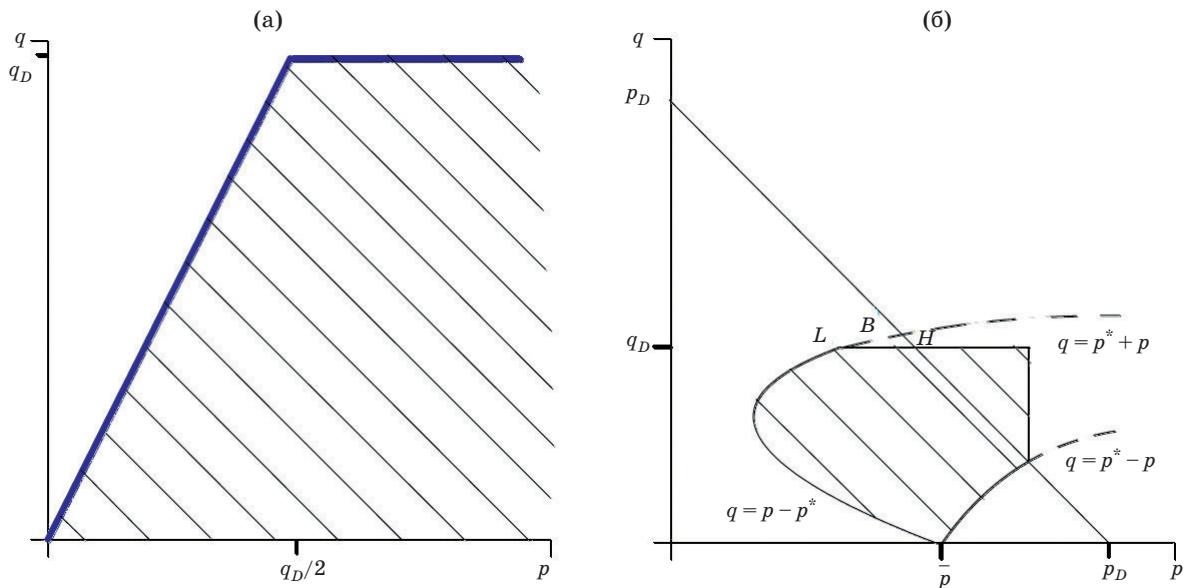
$$\tau_d(\epsilon) = \frac{(m_d / m_s)H_{ds} + H_{ss} + G_{sd}}{(H_{ss} + G_{sd})(H_{dd} + G_{ds}) - H_{sd}H_{ds}}.$$

В случае, когда  $s$ -электрон имеет импульс, допускающий только  $s \rightarrow s$  рассеяние, получаем более простое соотношение –  $\tau_s(\epsilon) = 1 / H_{ss}$ .

## 7.2. Вычисление матричных элементов $H$ и $G$

При расчете времен релаксации  $\tau_s$  и  $\tau_d$  проводится интегрирование по  $\epsilon'$ , позволяющее избавиться от  $\delta$ -функции. Чтобы получить ненулевой результат, нужно учесть ограничения на интервалы интегрирования в плоскостях  $(p, q)$  и  $(p', q)$ .

При рассмотрении  $s \rightarrow s$  рассеяния мы имеем  $\mathbf{p} + \mathbf{q} = \mathbf{p}'$ ,  $q^2 = p^2 + p'^2 - 2\mathbf{p}\mathbf{p}'$ . Здесь  $\mathbf{p}$  – импульс



**Рис. 6.** Области интегрирования по  $q$  и по  $p$  при вычислении электрон-фононных вкладов в  $s$ - $s$  и  $s$ - $d$  столкновения. а – область на плоскости  $(q, p)$ , по которой проводится интегрирование при подсчете электрон-фононного вклада  $s$ - $s$  в электронные транспортные коэффициенты. б – область на плоскости  $(q, p)$  при интегрировании  $s$ - $d$  процессов.

$s$ -электрона до столкновения с фононом,  $\mathbf{p}'$  – после столкновения. После введения угла  $\theta$  между векторами  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}'$  и переменной  $t = -\cos\theta$  элемент объема в  $p'$ -пространстве вычисляем как

$$d\mathbf{p}' = 2\pi p'^2 dp' dt = 2\pi p' q dp' dq / p = \\ = 2\pi m_s q d\varepsilon' dq / p,$$

где  $\varepsilon' = \varepsilon_s + p'^2 / (2m_s)$  – энергия  $s$ -электрона после столкновения. При данном значении  $q$  импульс  $p'$  принимает значения от  $|p - q|$  до  $p + q$ . Наличие функции  $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$  приводит к условиям

$$\varepsilon_s + (p - q)^2 / (2m_s) < \varepsilon_s + p^2 / (2m_s),$$

$$\varepsilon_s + (p + q)^2 / (2m_s) > \varepsilon_s + p^2 / (2m_s).$$

Первое из этих неравенств дает  $q < 2p$ . Вместе с ограничением  $q < q_D$  оно определяет диапазон интегрирования в  $(q, p)$ -плоскости, показанный на рис. 6а заштрихованной областью.

Рассмотрим  $s \rightarrow d$  рассеяние  $\mathbf{p} + \mathbf{q} = \mathbf{p}'$ , где  $\mathbf{p}$  – импульс  $s$ -электрона до столкновения с фононом,  $\mathbf{p}'$  – импульс  $d$ -электрона, возникшего после столкновения. Снова вводим угол  $\theta$  между векторами  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}'$  и переменную  $t = -\cos\theta$ . Элемент объема в  $p'$ -пространстве запишем в виде

$$d\mathbf{p}' = 2\pi p'^2 dp' dt = \\ = 2\pi p' q dp' dq / p = 2\pi m_d q d\varepsilon' dq / p,$$

где  $\varepsilon' = \varepsilon_1 + p'^2 / (2m_d)$  – энергия  $d$ -электрона. Определим граничное значение импульса электрона в  $d$ -зоне  $p_d = (2m_d(\varepsilon_2 - \varepsilon_1))^{1/2}$ . При заданных значениях  $q$  значение  $p'$  лежит в границах от  $|p - q|$  до  $p + q$ . В зависимости от взаимного расположения этих границ и  $p_d$  возможны разные случаи.

*Случай sd-1* ( $|p - q| < p + q < p_d$ )

Энергия  $s$ -электрона  $\varepsilon = \varepsilon_s + p^2 / (2m_s)$ . Функция  $\delta(\varepsilon' - \varepsilon)$  при заданных значениях характерных точек в дополнение к неравенству  $p + q < p_d$  создает ограничения в виде неравенств

$$\varepsilon_1 + (p - q)^2 / (2m_d) < \varepsilon_s + p^2 / (2m_s),$$

$$\varepsilon_1 + (p + q)^2 / (2m_d) > \varepsilon_s + p^2 / (2m_s).$$

Система этих трех неравенств может быть записана в виде

$$(p - q)^2 < 2m_d(\varepsilon - \varepsilon_1),$$

$$(p + q)^2 > 2m_d(\varepsilon - \varepsilon_1), \quad p + q < p_d.$$

После введения обозначения  $p^*(\varepsilon) = (2m_d(\varepsilon - \varepsilon_1))^{1/2}$  и добавления к трем неравенствам, указанным выше, ограничения на величину фононного квазиимпульса  $q < q_D$  получаем систему неравенств

$$p - p^* < q < p + p^*, \quad q > p^* - p,$$

$$q < p_d - p, \quad q < q_D.$$

Область переменных  $(q, p)$ , описанная этими неравенствами, показана на рис. 6б заштрихованной областью ниже линии  $q = p_d - p$ . Введем обозначения  $m_0 = (m_d/m_s)^{1/2}$  и  $p_{1s} = (2m_s(\varepsilon_1 - \varepsilon_s))^{1/2}$ ,  $p_{2s} = (2m_s(\varepsilon_2 - \varepsilon_s))^{1/2}$ . Обозначим символом  $\bar{p}$  импульс  $s$ -электрона, при котором  $p^* - p = 0$  и находим

$$\bar{p} = \sqrt{2\bar{m}(\varepsilon_1 - \varepsilon_s)}, \quad \text{где } 1/\bar{m} = 1/m_s - 1/m_d.$$

Точки А, В, Н, Л, показанные на рис. 6б, имеют следующие  $p$ -координаты:

$$p(A) = p_{2s},$$

$$p(B) = \left( \left( 4p_d^2 + m_0^2(m_0^2 - 1)p_{2s}^2 \right)^{1/2} - 2p_d \right) / (m_0^2 - 4)$$

$$p(H) = p_d - q_D,$$

$$p(L) = \left( m_0 \left( q_d^2 + (m_0^2 - 1)p_{1s}^2 \right)^{1/2} - q_d \right) / (m_0^2 - 1)$$

Аналогично области интегрирования в плоскости  $(q, p)$  могут быть получены и в других случаях относительных положений значений  $|p - q|$ ,  $p + q$  и  $p_d$ , рассмотренных далее.

*Случай sd-2*

Теперь  $p - p_d < q < p + p_d$ ,  $q > p_d - p$ . С учетом  $\delta$ -функции получаем условия

$$\varepsilon_1 + (p - q)^2 / (2m_d) < \varepsilon_s + p^2 / (2m_s),$$

$$\varepsilon_1 + p_d^2 / (2m_d) > \varepsilon_s + p^2 / (2m_s).$$

При использовании введенных выше обозначений они могут быть записаны как  $(p - q)^2 < p^{*2}$ ,  $p < p_{2s}$ . В результате получаем систему неравенств:

$$p - p_d < q < p + p_d, \quad q > p_d - p,$$

$$p - p^* < q < p + p^*, \quad p < p_{2s}, \quad q < q_D.$$

Область, определяемая этими неравенствами (имеющая треугольную форму), показана на рис. 6б как заштрихованная выше линии  $q = p_d - p$ .

Теперь рассмотрим  $d-s$  рассеяние. Электрон в  $d$ -зоне, имеющий импульс  $\mathbf{p}'$ , рассеивается

в  $s$ -зону, приобретая импульс  $\mathbf{p}$  с переданным импульсом  $\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$ . Интегрирование по конечным состояниям является интегрированием по состояниям  $\mathbf{p}$   $s$ -электрона. Элемент объема в  $p$ -пространстве конечных состояний электрона после рассеяния может быть записан в виде

$$d\mathbf{p} = 2\pi p^2 dp dt = 2\pi p q dp dq / p' = 2\pi m_s q d\varepsilon dq / p'.$$

При данном  $q$  импульс  $s$ -электрона изменяется от  $|p' - q|$  до  $p' + q$ . Наличие  $\delta$ -функции в дополнение к неравенству  $p' < p_d$  приводит к системе неравенств  $\varepsilon_s + (p' - q)^2 / (2m_s) < \varepsilon'$ ,  $\varepsilon_s + (p' + q)^2 / (2m_s) > \varepsilon'$  или

$$(p' - q)^2 < 2m_s(\varepsilon' - \varepsilon_s),$$

$$(p' + q)^2 > 2m_s(\varepsilon' - \varepsilon_s), \quad p' < p_d.$$

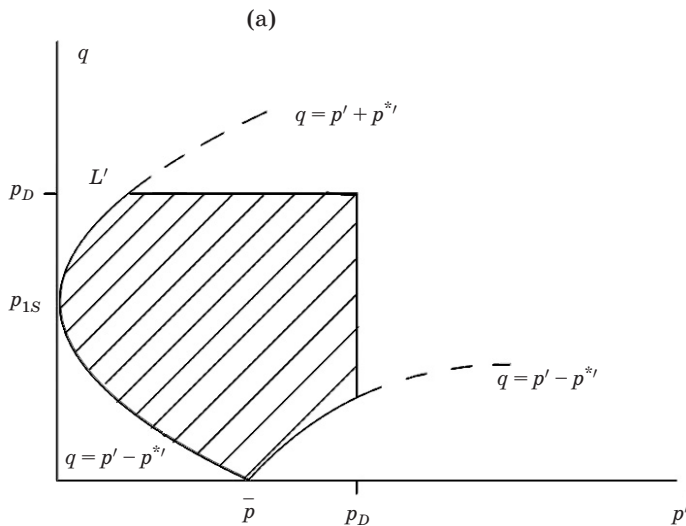
Обозначим  $p^*(\varepsilon') = (2m_s(\varepsilon' - \varepsilon_s))^{1/2}$ .

Тогда эта система неравенств для величин  $p'$  и  $q$  может быть записана в виде

$$p' - p^* < q < p' + p^*, \quad q > p^* - p',$$

$$p' < p_d, \quad q < q_D.$$

Область переменных  $(q, p')$ , определенная системой этих неравенств, представлена на рис. 7а. Точка  $L'$  на рис. 7а имеет  $p'$ -координату  $p'(L') = m_0(m_0 q_d - (q_d^2 + (m_0^2 - 1)p_{1s})^{1/2}) / (m_0^2 - 1)$ .



Рассмотрим  $d$ - $d$ -рассеяние. В этом процессе  $d$ -электрон с импульсом  $\mathbf{p}'$  рассеивается в  $d$ -зону, приобретая импульс  $\mathbf{p}''$  с переданным значением импульса  $\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}''$ . Теперь интегрирование по состояниям электрона после рассеяния подразумевает интегрирование по состояниям  $d$ -электронов  $p''$ . Тогда

$$d\mathbf{p}'' = 2\pi p'' q dp'' dq / p' = 2\pi m_d q d\varepsilon'' dq / p'.$$

При данном значении  $q$  импульс рассеянного в  $d$ -зону  $d$ -электрона изменяется от  $p''_{\min} = |p' - q|$  до  $p''_{\max} = p' + q$ . В зависимости от положения величин  $p''_{\min}$ ,  $p''_{\max}$ ,  $p_d$  относительно друга друга можно выделить два случая:  $dd-1$  и  $dd-2$

*Случай dd-1* ( $|p' - q| < p' + q < p_d$ )

Наличие  $\delta$ -функции в дополнение к условию  $p' < p_d$  приводит к системе неравенств:

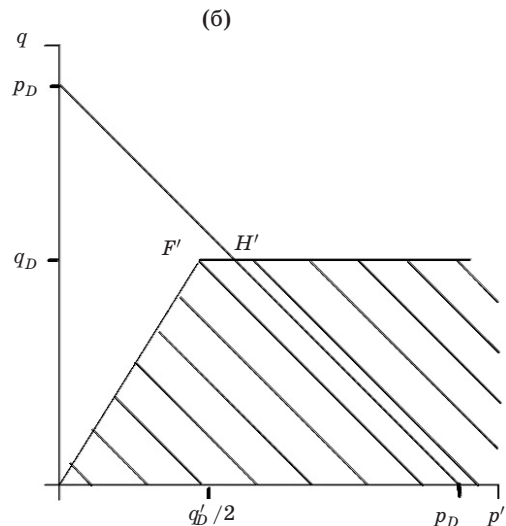
$$\varepsilon_1 + (p' - q)^2 / (2m_d) < \varepsilon_1 + p'^2 / (2m_d),$$

$$\varepsilon_1 + (p' + q)^2 / (2m_d) > \varepsilon_1 + p'^2 / (2m_d).$$

В результате получаем условия:

$$q < 2p', \quad q < p_d - p', \quad p' < p_d, \quad q < q_D.$$

Область на  $(q, p')$ -плоскости, определяемая этими неравенствами, показана на рис. 7б под линией  $q = p_d - p'$ . Характерные точки на данной плоскости имеют  $p'$ -координаты:  $p'(F') = q_D/2$ ,  $p'(H') = p_d - q_D$ .



**Рис. 7.** Область интегрирования по  $q$  и по  $p'$  при вычислении электронных транспортных коэффициентов, связанных с переходами  $d$ - $s$  и  $d$ - $d$  вследствие электрон-фононного взаимодействия. а – область интегрирования на плоскости  $(q, p')$  при вычислении электрической проводимости и электронной теплопроводности, связанных с переходом  $d$ - $s$ . б – область интегрирования на плоскости  $(q, p')$  при вычислении вклада  $d$ - $d$ .

Случай  $dd-2$

В этом случае неравенство  $|p' - q| < p_d < p' + q$  дополняется следующими условиями:

$$\varepsilon_1 + (p' - q)^2 / (2m_d) < \varepsilon_1 + p'^2 / (2m_d),$$

$$\varepsilon_1 + p_d^2 / (2m_d) > \varepsilon_1 + p'^2 / (2m_d).$$

В результате получаем

$$q < 2p', \quad q > p_d - p', \quad p' < p_d,$$

$$q < q_D, \quad p' - p_d < q < p' + p_d.$$

Соответствующая область  $(q, p')$  переменных также показана на рис. 7б в виде треугольника над линией  $q = p_d - p'$ .

Теперь рассмотрим матричные элементы  $H$  и  $G$  (см. (9) и (12)). При  $s \rightarrow s$  рассеянии угол  $\theta$  между начальным и конечным импульсами электрона удовлетворяет соотношению  $\cos \theta = 1 - q^2 / (2p^2)$ ; в случае  $s \rightarrow d$  и  $d \rightarrow s$ -рассеяния  $\cos \theta = (p^2 + p'^2 - q^2) / (2pp')$ ; в случае  $d-d$ -рассеяния  $\cos \theta = 1 - q^2 / (2p'^2)$ . Поэтому матричные элементы можно записать в виде

$$H_{ss}(\varepsilon) = \int Z_{ss}^2 W(q) \frac{q^2}{2p^2} (2N_q + 1) \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2\pi m_s}{p} q dq,$$

$$H_{sd}(\varepsilon) = \int Z_{sd}^2 W(q) \frac{p'}{p} \frac{p^2 + p'^2 - q^2}{2pp'} (2N_q + 1) \times \\ \times \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2\pi m_d}{p} q dq,$$

$$G_{sd}(\varepsilon) = \int Z_{sd}^2 W(q) (2N_q + 1) \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2\pi m_d}{p} q dq,$$

$$H_{dd}(\varepsilon) = \int Z_{dd}^2 W(q) \frac{q^2}{2p'^2} (2N_q + 1) \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2\pi m_d}{p} q dq, \quad (13)$$

$$H_{ds}(\varepsilon) = \int Z_{ds}^2 W(q) \frac{p'}{p'} \frac{p^2 + p'^2 - q^2}{2pp'} (2N_q + 1) \times \\ \times \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2\pi m_s}{p'} q dq,$$

$$G_{ds}(\varepsilon) = \int Z_{ds}^2 W(q) (2N_q + 1) \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2\pi m_s}{p'} q dq.$$

Здесь мы ввели функцию

$$W(q) = \frac{\pi q^2}{\rho V \omega} \left( \frac{4\pi n e^2 \hbar^2}{q^2 \beta(q)} \right)^2,$$

где  $n, \rho, \beta(q)$  – концентрация атомов, их массовая плотность и электронная диэлектрическая проницаемость соответственно. Тогда, например,

$W^{ss}$  из (9) переписывается как  $W^{ss} = Z_{ss}^2 W(q)$ . Аналогичные выражения можно записать и для других процессов рассеяния с эффективными зарядами  $Z_{ss}, Z_{sd}, Z_{ds}, Z_{dd}$  для соответствующих процессов. Матричные элементы  $H$  и  $G$  определяются энергией электрона, которая остаётся постоянной после рассеяния в силу квазиупругого характера электрон-фононного взаимодействия. При переходе между  $s$ - и  $d$ -зонами мы имеем  $\varepsilon = \varepsilon_s + p^2 / (2m_s) = \varepsilon_1 + p'^2 / (2m_d)$ .

Тогда импульс электрона в  $d$ -зоне

$$p' = m_0 \sqrt{p^2 - p_{1s}^2} \quad (14)$$

является однозначной функцией импульса  $p$  электрона в  $s$ -зоне. Мы будем использовать импульс  $p$  в качестве переменной. При этом для перехода между  $s$ - и  $d$ -зонами необходимо выполнение условия  $p > p_{1s}$ . Для малых значений импульса  $s$ -электроны могут быть рассеяны только в  $s$ -зону. Если принять  $p$ -импульс  $s$ -электрона в качестве параметра, мы получаем для различных интервалов  $p$  следующие пределы интегрирования по  $q$  для вычисления матричных элементов  $H$  и  $G$ :

1)  $0 < p < q_D / 2$

$$\int_0^{2p} dq[ss],$$

2)  $q_D / 2 < p < p_{1s}$

$$\int_0^{q_D} dq[ss],$$

3)  $p_{1s} < p < p(p'(L'))$

$$\int_0^{q_D} dq[ss] + \int_{p-p^*}^{p+p^*} dq[sd] + \int_{p^*-p'}^{p'+p^*} dq[ds] + \int_0^{2p'} dq[dd],$$

4)  $p(p'(L')) < p < p(p'(F'))$

$$\int_0^{q_D} dq[ss] + \int_{p-p^*}^{q_D} dq[sd] + \int_{p^*-p'}^{q_D} dq[ds] + \int_0^{2p'} dq[dd],$$

5)  $p(p'(F')) < p < \bar{p}$

$$\int_0^{q_D} dq[ss] + \int_{p-p^*}^{q_D} dq[sd] + \int_{p^*-p'}^{q_D} dq[ds] + \int_0^{q_D} dq[dd],$$

6)  $\bar{p} < p < p_{2s}$

$$\int_0^{q_D} dq[ss] + \int_{p^*-p}^{q_D} dq[sd] + \int_{p'-p^*}^{q_D} dq[ds] + \int_0^{q_D} dq[dd],$$

7)  $p > p_{2s}$

$$\int_0^{q_D} dq[ss].$$

Здесь символами  $[ss]$ ,  $[sd]$ ,  $[ds]$ ,  $[dd]$  обозначены типы рассеяния для матричных элементов  $H$  и  $G$ , которые определяют их значения в соответствии с уравнениями (13).

### 7.3. Электронный транспорт при высоких температурах

Времена релаксации в электрон-фононных столкновениях, как функция от импульса  $s$ -электрона, подставленные в выражения для проводимости  $s$ - и  $d$ -электронов, в рамках приближения времени релаксации, позволяют вычислить удельное сопротивление и теплопроводность за счет электрон-фононных столкновений в зависимости от температуры электронов. Вклад  $s$ -электронов в электропроводность определяется уравнением

$$\sigma_s = \frac{2}{3} \left( \frac{e}{m_s} \right)^2 4\pi \int \left( -\frac{\partial f_{0s}}{\partial \epsilon} \right) \tau_s(p) \frac{p^4 dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

где

$$\frac{\partial f_{0s}}{\partial \epsilon} = \frac{\exp[(\epsilon - \mu) / k_B T_e] / k_B T_e}{(\exp[(\epsilon - \mu) / k_B T_e] + 1)^2}$$

и  $\epsilon = \epsilon_s + p^2 / (2m_s)$ . Аналогично электропроводность вследствие наличия  $d$ -электронов

при  $\epsilon' = \epsilon_1 + p'^2 / (2m_d)$  может быть записана в виде

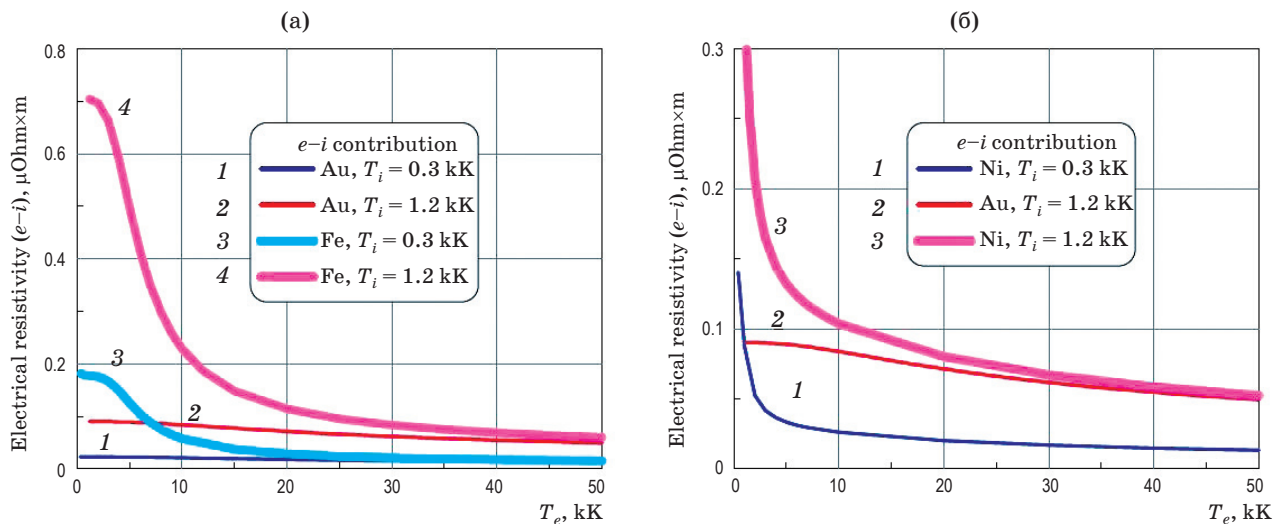
$$\sigma_d = \frac{2}{3} \left( \frac{e}{m_d} \right)^2 4\pi \int \left( -\frac{\partial f_{0d}}{\partial \epsilon'} \right) \tau_d(p') \frac{p'^4 dp'}{(2\pi\hbar)^3}.$$

В интеграле для  $\sigma_d$  оказывается удобным перейти от интегрирования по  $p'$  к интегрированию по импульсу  $s$ -электрона  $p$  с помощью соотношения (16). Тогда  $p' dp' = m_0^2 p dp$ ,  $\epsilon' = \epsilon = \epsilon_s + p^2 / 2m_s$  и диапазон интегрирования по  $p$  делится на семь интервалов, показанных выше. Только четыре из этих интервалов содержат значения импульса, необходимые, чтобы сделать возможным рассеяние  $d$ -электронов в силу условия квазиупругости электрон-фононных столкновений.

Времена релаксации, рассчитываемые как функции импульса электрона, позволяют вычислить коэффициент электронной теплопроводности. Он может быть записан отдельно для  $s$ - и  $d$ -электронов. Электронный коэффициент теплопроводности определяется выражением

$$\kappa = \frac{1}{3} k_B \int \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \left( \frac{\partial \mu}{\partial T_e} + \frac{\epsilon - \mu}{T_e} \right) \times \\ \times (\epsilon - \mu) \left( \frac{p}{m^*} \right)^2 \tau(\epsilon) 2 \frac{8\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Коэффициент электронной теплопроводности за счет электрон-фононного взаимодействия – это сумма парциального  $s$ -электронного



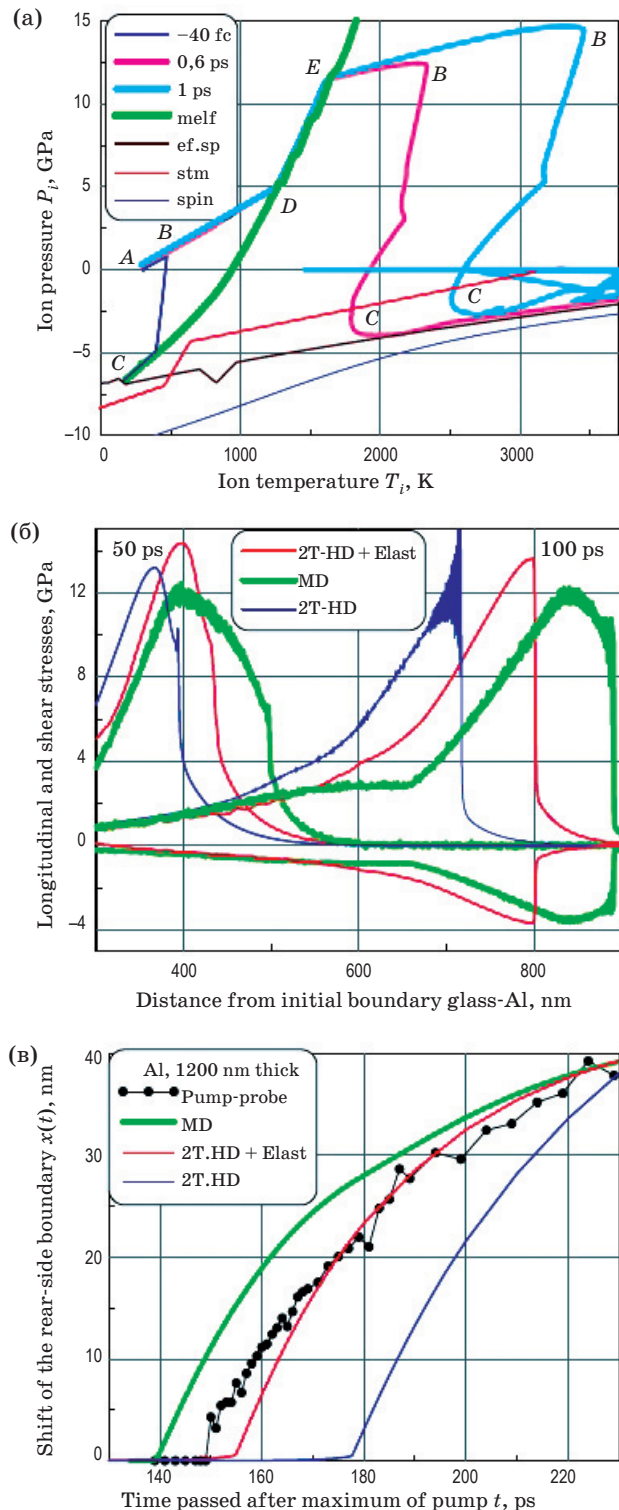
**Рис. 8.** Электрическое сопротивление благородных (Au) и переходных металлов (Fe, Ni) в 2Т состоянии. а – сравнение сопротивлений золота и железа при двух значениях  $T_i = 0.3$  и  $1.2$  кК. При низких температурах фоновые вклады в сопротивление отличаются сильно. При высоких температурах  $T_e$  эта разница сходится на нет. б – сравнение фоновых сопротивлений никеля и золота.

коэффициента теплопроводности  $\kappa_s$  и парциального коэффициента  $d$ -электронной теплопроводности  $\kappa_d$ :  $\kappa = \kappa_s + \kappa_d$ , как и общая электрическая проводимость  $\sigma = \sigma_s + \sigma_d$ . Удельное сопротивление как функция температуры электронов при двух значениях ионной температуры  $T_i = 0.3$  кК и  $T_i = 1.2$  кК показана на рис. 8 для благородного металла (золота) и двух переходных металлов (железа и никеля). Видна сравнительно небольшая зависимость сопротивления золота от электронной температуры, в то время как у переходных металлов сопротивление значительно снижается с ростом температуры электронов. Электросопротивление никеля, с близким к верхнему краю  $d$ -зоны уровнем Ферми, падает быстрее, чем у железа с уровнем Ферми, лежащим глубже внутри зоны  $d$ -электронов.

### 8. Генерация ударных волн

Отметим новые явления, связанные с лазерной генерацией ударных волн (УВ) с помощью УКЛИ. Во-первых, это сверхупругость. Кристалл, одноосно сжатый в УВ, продолжает существовать при необычно высоких напряжениях [25–27, 46–56]. Во-вторых, имеет место образование двухзонной (упругой и пластической) одиночной ударной волны [33, 53, 54]. В такой волне акустическое излучение с пластического фронта поддерживает упругую УВ, не позволяя ей затухать. Таким образом, сохраняется постоянное расстояние между пластической и упругой УВ. В-третьих, выявлено существование сложного взаимодействия между быстрым плавлением и образованием упруго-пластических УВ. Волна сжатия отделяется от тепловой волны при ее резком замедлении (см. разделы 1 и 2 и рис. 1 и 3). Найдено, что изменение сжимаемости в зоне плавления при изохорическом нагревании деформирует профиль давления (см. рис. 3 [57, 58]).

На рис. 9а показана эволюция мгновенных профилей на 2Т стадии на фоне термодинамических кривых плавления и спинодали. В качестве спинодалей приведены спинодаль “spin” согласно уравнению состояния (УРС) [34], эффективная спинодаль “ef.sp”, используемая в гидродинамическом расчете, и прочность расплава “strn” по данным МД [25]. На ранней стадии  $t = -40$  фс профиль А–В–С состоит из тепловой волны А–В и волны разрежения В–С. Длительность УКЛИ  $\tau_L = 100$  фс,  $t = 0$  – это



**Рис. 9.** а – показаны термодинамические зависимости (кривая плавления и спинодаль) и мгновенные профили на три момента времени для задачи о разлете мишени из алюминия в вакуум,  $F_{abs} = 130$  мДж/см<sup>2</sup>. б – рассматривается задача о нагреве пленки из алюминия через стекло,  $F_{abs} = 130$  мДж/см<sup>2</sup> [25]. Показано распространение УВ. Сравняются три кода: МД, 2Т гидродинамика с пластическим УРС (2Т-НД) и 2Т гидродинамика учетом упругости (2Т-НА+Elast). в – сравнение эксперимента [25] с данными, полученными тремя кодами.



максимум УКЛИ. Точка А на рис. 9а находится далеко от слоя нагрева. Температура в ней равна комнатной, давление равно нулю. На момент  $t = -40$  фс температура на участке А–В невысокая, плавления нет. В момент  $t = 0.6$  пс профиль А–D–E–B–C имеет участки твердой фазы А–D, смеси кристалла и расплава D–E и чистого расплава E–B–C. Крутой участок D–E идет вдоль кривых плавления и начальной изохоры. Именно этот участок после отделения волны сжатия от волны плавления трансформируется в упругую УВ большой амплитуды.

2Т гидродинамический (2Т–HD) код был модифицирован с целью учета не только изотропных, но и сдвиговых упругих напряжений в твердой фазе мишени. Модифицированный вариант называется 2Т–HD+Elast. Учет упругости важен, так как в лазерных экспериментах упругость сохраняется до очень больших напряжений. Результаты расчетов с применением кода 2Т–HD+Elast показаны на рис. 9б и 9в. В 2Т–HD+Elast принято, что напряжение в направлении  $x$  составляет  $P_{xx} = P_i + P_e - s_{xx}$ , где сдвиговое напряжение  $s_{xx} = (4/3)G(\partial x / \partial x_0 - 1)$ ,  $G$  – модуль сдвига, а  $x(x_0, t)$  – траектория лагранжевой частицы. Считается, что модуль сдвига в слое смеси кристалл – расплав уменьшается пропорционально объемной доле твердой фазы в смеси. Алюминий в модели 2Т–HD+Elast мягче, чем в МД-расчете с выбранным межатомным потенциалом ЕАМ. Поэтому адиабата Гюгонии, при использовании 2Т–HD+Elast кода, лежит между упругой адиабатой Гюгонии из МД и пластической адиабатой Гюгонии, которая используется в коде 2Т–HD.

В статье [53] была предложена новая структура УВ в твердом теле. Назовем ее для краткости 1W2Z. Это означает, что единая волна (1W), т.е. вся структура, движется как целое, с единой скоростью распространения; при этом термин “двухзонная” (2Z) означает, что имеются две УВ – упругая (УУВ) и пластическая (ПУВ). Ранее полагалось, что в зависимости от постоянного во времени давления на поршне возможны три структуры: одноволновая однозонная 1W1E (чисто упругая), двухволновая двухзонная 2W2Z и одноволновая пластическая 1W1P. Сокращение 2W2Z означает, что структура является нестационарной – упругая и пластическая волны бегут с разной скоростью.

Новая классификация имеет вид: 1W1E, 2W2Z, 1W2Z, 1W1P. Новый режим 1W2Z

попадает в интервал между прежними 2-м и 3-м режимами. Пересечение прямой Рэлея с пластической адиабатой Гюгонии вдоль упругой скорости звука  $c_{el} = \sqrt{(K + 4G/3)/\rho}$  дает точку OD. Здесь  $K$  и  $G$  – объемный и сдвиговой модули. Ранее полагалось, что при давлениях выше OD осуществляется режим 1W1P. В новой классификации появляется важный промежуточный интервал от OD (5 ГПа, Al) до OD\* (67 ГПа) с волной 1W2Z, в которой УУВ и ПУВ разнесены на расстояние  $d(p)$ , где  $p$  – это давление на поршне. УУВ не может увеличить свое отдаление от ПУВ (как в режиме 2W2Z с упругим предвестником), иначе давление на УУВ и скорость УУВ снизятся (на интервале OD-OD\* скорость УУВ значительно превосходит  $c_{el}$ , поэтому ей есть куда снижаться). Тогда ПУВ начнет догонять УУВ и расстояние между ними уменьшится до значения, характерного для данного давления  $p$ .

## 9. Вспенивание и замораживание расплава

Гидродинамический распад прогретого лазерным излучением и электронным переносом тепла поверхностного слоя мишени толщиной  $d_T$  с повышенным давлением приводит к возникновению бегущих в глубь мишени и в противоположную сторону акустических  $f$ - и  $b$ -волн (рис. 16). На границе мишени  $b$ -волна становится отраженной  $r$ -волной. В случае контакта сред с большой разницей акустических импедансов (как в нашем случае контакта металла и вакуума) в отраженной волне создается отрицательное давление, растягивающее металл. За время порядка  $t_s = d_T / c_s$   $f$ - и  $r$ -волны покидают прогретый слой мишени. Если величина флюенса превосходит порог нуклеации  $F_{nucl}$ , то в веществе мишени развиваются явления, связанные с образованием и эволюцией двухфазного состояния жидкость-пар (см. рис. 3). Порог нуклеации  $F_{nucl}$  на несколько процентов меньше порога абляции  $F_{abl}$ . В диапазоне флюенсов  $F_{nucl} < F < F_{abl}$  под поверхностью мишени образуется и расширяется слой пузырьков. Однако инерции вещества, которое располагается между вакуумной границей и слоем пузырьков, не хватает, чтобы оторвать от мишени зарождающийся откольный слой. Дело в том, что  $F < F_{abl}$ , порог абляции не достигнут, и отрыва откольного слоя нет [59–61].

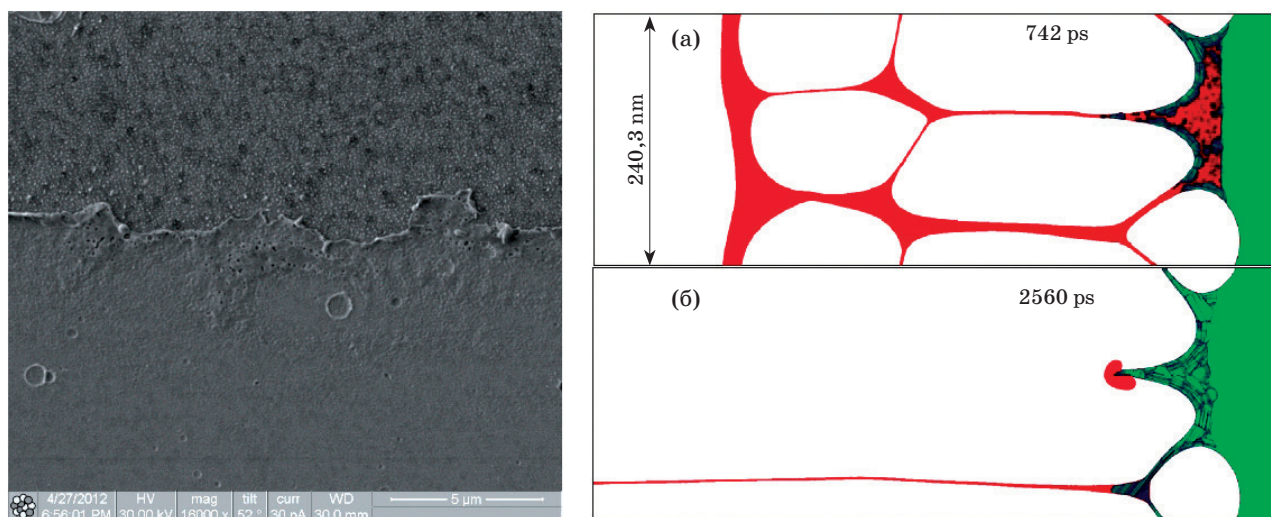
Вблизи порога  $F_{abl}$  эволюция пузырьков происходит медленно, пузырьки “решают”, оторваться им или нет. В этих условиях происходит затвердевание расплава из-за теплоотвода в толщу мишени. При этом пузырьки, не успевшие коллапсировать, вмораживаются в твердую матрицу [59–61]. Существование таких пузырьков было обнаружено с помощью МД-моделирования, в котором с помощью метода Монте-Карло была учтена теплопроводность среды. Эксперимент [59] подтверждает существование нанополостей в поверхностном слое. Такие пузырьки видны на фотографии (рис. 10а), полученной с помощью сканирующего электронного микроскопа в режиме слабого ионного тока. Некоторые из них остались под поверхностью, а некоторые лопнули. Лопнувшие пузырьки образовали маленькие кратеры возле большого кратера (см. рис. 10а). На этом рисунке примерно посередине проходит извилистая линия. Это край основного кратера, крышку которого образует откольный купол. Откольный купол улетает, открывая кратер. Внутренняя часть основного кратера на рис. 9а находится выше извилистого края.

Фотография на рис. 10а представляет собой изображение поверхности тантала. Кратер сформирован одиночным  $p$ -поляризованным УКЛИ мощного Cr:Forsterite-лазера (длина волны света  $\lambda = 1240$  нм, длительность импульса  $\tau_L = 100$  фс). Угол падения света на мишень составлял  $45^\circ$ . Пленка тантала толщиной около

1 мкм была нанесена на стекло и облучалась с вакуумной стороны. Величина поглощенного флюенса составляла  $F_{abs} = 180$  мДж/см<sup>2</sup> в центре фокального пятна. Это значение немного (примерно на 20%) превышает порог абляции. Структура вещества под поверхностью мишени из тантала в области вне кратера (нижняя сторона на рис. 10а) исследовалась с применением резки с помощью фокусированных ионных пучков (FIB), подобно тому, что делалось для алюминия [59]. Эти исследования показали, что в случае тантала подповерхностные пузырьки тоже существуют.

Моделирование заключительной стадии абляции металлов (на временах порядка наносекунд), когда происходит разрушение и отвердевание двухфазной пены, было проведено с помощью высокоэффективных кодов параллельных вычислений [62] на многопроцессорных компьютерах. В крупномасштабном расчете, представленном на рис. 10б, использовано 172 миллиона атомов. (Такой расчет занимает очень много времени.) Анализируется поведение мишени из алюминия, облученной УКЛИ с длительностью импульса 100 фс и поглощенной энергией 120 мДж/см<sup>2</sup>.

Эволюция пены, полученная в результате МД-моделирования, показана на рис. 10б. Жидкий металл на этой стадии сильно переохлажден, что приводит к объемной кристаллизации. Центры кристаллизации показаны как зеленые пятна внутри расплава красного цвета.



**Рис. 10.** а – изображение части кратера на электронном микроскопе. Кратер находится выше извилистой горизонтальной линии. б – крупномасштабное МД моделирование формирования, разлета, разрушения и замораживания пены. Красным цветом отмечены области расплава, а зеленым – твердое тело.

Такие центры возникают также на свободной поверхности расплава. После разрыва мембран, образующих стенки пузырей, капли на концах мембран начинают двигаться по направлению к мишени. Это движение прекращается после полной заморозки мембран и капель. Такое движение вызвано растяжением мембран перед их разрывом. Даже на самой поздней стадии, показанной на рис. 10б, капли остаются незамороженными.

\* \* \* \* \*

Имеются замороженные пузырьки и струи на вершинах этих пузырьков, сходные с наноструями, обнаруженными в экспериментах [63–65]. Длина замороженных струй и мембран может достигать гигантской величины (порядка микрометра).

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований (13-02-01078) и Государственной корпорацией Росатом (ГК Н.4х.44.90.13.1111).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Анисимов С.И., Капелиович Б.Л., Перельман Т.Л. Электронная эмиссия с поверхности металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов // ЖЭТФ. 1974. Т. 66. № 2. С. 776–779.
2. Вейко В.П., Либенсон М.Н., Червяков Г.Г., Яковлев Е.Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. М.: Физматлит, 2008. 308 с.
3. Inogamov N., Petrov Y., Zhakhovsky V., Khokhlov V., Demaske B., Ashitkov S., Khishchenko K., Migdal K., Agranat M., Anisimov S., Fortov, V. Two-temperature thermodynamic and kinetic properties of transition metals irradiated by fs lasers // AIP Conference Proceedings. 2012. V. 1464. P. 593–608.
4. Анисимов С.И., Жаховский В.В., Иногамов Н.А., Нишихара К., Петров Ю.В., Хохлов В.А. Разлет вещества и образование кратера при абляции под действием ультракороткого лазерного импульса // ЖЭТФ. 2006. Т. 130. № 2. С. 212–227.
5. Иногамов Н.А., Петров Ю.В. Теплопроводность металлов с горячими электронами // ЖЭТФ. 2010. Т. 137. № 3. С. 505–529.
6. Петров Ю.В., Иногамов Н.А., Мигдал К.П. Теплопроводность и коэффициент электрон-ионного теплообмена в конденсированных средах с сильно возбужденной электронной подсистемой // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97. № 1. С. 24–31.
7. Петров Ю. В., Иногамов Н. А. Снятие моттовского межзонного s-d-увеличения электросопротивления никеля и платины за счет возбуждения электронов фемтосекундным лазерным импульсом // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98. № 5. С. 316–322.
8. Petrov Y.V. Energy exchange between the lattice and electrons in a metal under femtosecond laser irradiation // Laser and Particle Beams. 2005. V. 23. P. 283–289
9. Inogamov N., Anisimov S., Zhakhovsky V., Faenov A., Petrov Y., Khokhlov V., Fortov V., Agranat M., Ashitkov S., Komarov P., Skobelev I., Kato Y., Pikuz T., Shepelev V., Fukuda Y., Tanaka M., Kishimoto M., Ishino M., Nishikino M., Kando M., Kawachi T., Nagasono M., Ohashi H., Yabashi M., Tono K., Senda Y., Togashi T. and Ishikawa T. Ablation by short optical and x-ray laser pulses // SPIE Proceedings. 2011. V.7996. P. 79960T.
10. Inogamov N., Faenov A., Zhakhovsky V., Pikuz T., Skobelev I., Petrov Y., Khokhlov V., Shepelev V., Anisimov S., Fortov V., Fukuda Y., Kando M., Kawachi T., Nagasono M., Ohashi H., Yabashi V., Tono K., Senda Y., Togashi T., and Ishikawa T. Two-temperature warm dense matter produced by ultrashort extreme vacuum ultraviolet-free electron laser (euv-fel) pulse // Contributions to Plasma physics. 2011. V. 51. № 5. P. 419–426.
11. Lin Z., Zhigilei L. V., Celli V. Electron-phonon coupling and electron heat capacity of metals under conditions of strong electron-phonon nonequilibrium // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. P. 075133.
12. Rethfeld B., Kaiser A., Vicanek M., Simon G. Ultrafast dynamics of nonequilibrium electrons in metals under femtosecond laser irradiation // Phys. Rev. B 2002. V. 65. P. 214303.
13. Amoroso S., Bruzzese R., Wang X., Atanasov P. Femtosecond laser ablation of nickel in vacuum // J. Phys. D.: Appl. Phys. 2007. V. 40. P. 331–340.
14. Kanavin A., Smetanin I., Isakov V., Afanasiev Y., Chichkov B., Wellegehausen B., Nolte S., Momma C., Tunnermann A. Heat transport in metals irradiated by ultrashort laser pulses // Phys. Rev. B. 1998. V. 57. P. 14698–14703.

15. *Loboda P., Smirnov N., Shadrin A., Karlykhanov N.* Simulation of absorption of femtosecond laser pulses in solid-density copper // *High Energy Density Physics*. 2011. V. 7. P. 361.
16. *Agranat M.B., Anisimov S.I., Ashitkov S.I., Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Nishihara K., Petrov Y.V., Fortov V.E., Khokhlov V.A.* Dynamics of plume and crater formation after action of femtosecond laser pulse // *Appl. Surf. Sci.* 2007. V. 253. P. 6276–6282.
17. *Agranat M.B., Anisimov S.I., Ashitkov S.I., Zhakhovskii V. V., Inogamov N.A., Nishihara K., Petrov Y.V.* Nanospallation induced by a femtosecond laser pulse // *Proc. SPIE*. 2007. V. 6720. P. 672002.
18. *Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Ашитков С.И., Петров Ю.В., Агранат М.Б., Анисимов С.И., Нишихара К., Фортвов В.Е.* О нанототколе после воздействия ультракороткого лазерного импульса // *ЖЭТФ*. 2008. Т. 134. № 1. С. 5-28.
19. *Inogamov N.A., Anisimov S.I., Petrov Y.V., Khokhlov V.A., Zhakhovskii V.V., Nishihara K., Agranat M.B., Ashitkov S.I., Komarov P. S.* Theoretical and experimental study of hydrodynamics of metal target irradiated by ultrashort laser pulse // *Proc. SPIE*. 2008. V. 7005. P. 70052F.
20. *Petrov Y.V., Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Ashitkov S.I., Khokhlov V.A., Upadhyay A.K., Agranat M.B., Anisimov S.I., Nishihara K., Rethfeld B., Urbassek H.M.* Equation of state of matter irradiated by short laser pulse and geometry of spalled cupola // *Proc. SPIE*. 2008. V. 7005. P. 70051W.
21. *Anisimov S., Inogamov N., Petrov Y., Khokhlov V., Zhakhovskii V., Nishihara K., Agranat M., Ashitkov S., Komarov P.* Thresholds for frontal ablation and backside spallation of thin foil irradiated by femtosecond laser pulse // *Appl. Phys. A*. 2008. V. 92. № 4. P. 797–801.
22. *Zhigilei L.V., Lin Z., Ivanov D.S.* Atomistic modeling of short pulse laser ablation of metals: Connections between melting, spallation, and phase explosion // *J. Phys. Chem. C*. 2009. V. 113. № 27. P. 11892 .
23. *Zhakhovskii V., Inogamov N., Petrov Y., Ashitkov S. and Nishihara K.,* Md simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // *Appl. Surf. Sci.* 2009. V. 255, P. 9592.
24. *Karim E.T., Lin Z., Zhigile, L.V.* Molecular dynamics study of femtosecond laser interactions with cr targets // *AIP Conf. Proc.* 2012. V. 1464 P. 280–293.
25. *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*. 2010. Т. 91. № 9. С. 517-523.
26. *Ашитков С.И., Агранат М.Б., Канель Г.И., Комаров П.С., Фортвов В.Е.* Поведение алюминия вблизи предельной теоретической прочности в экспериментах с фемтосекундным лазерным воздействием // *Письма в ЖЭТФ*. 2010. Т. 92. № 8. С. 516–520.
27. *Ashitkov S., Inogamov N., Komarov P., Zhakhovsky V., Oleynik I., Agranat M., Kanel G. and Fortov V.* Strength of metals in liquid and solid states at extremely high tension produced by femtosecond laser heating // *AIP Conference Proc.* 2012. V. 1464. P. 120–125.
28. *Inogamov N., Faenov A., Khokhlov V., Zhakhovskii V., Petrov Y., Skobelev I., Nishihara K., Kato Y., Tanaka M., Pikuz T., Kishimoto M., Ishino M., Nishikino M., Fukuda Y., Bulanov S., Kawachi T., Anisimov S., Fortov V.* Spallative ablation of metals and dielectrics // *Contributions to Plasma Physics*. 2009. V. 49. № 7–8. P. 455–466.
29. *Demaske B., Zhakhovsky V., Inogamov N., Oleynik I.* Ablation and spallation of gold films irradiated by ultrashort laser pulses // *Phys. Rev. B*. 2010. V. 82. P. 064113.
30. *Zhakhovsky V., Demaske B., Inogamov N., Khokhlov V., Ashitkov S., Agranat M., Oleynik I.* Super-elastic response of metals to laser-induced shock waves // *AIP Conf. Proc.* 2012. V. 1464. P. 102–112.
31. *Demaske B., Zhakhovsky V., Inogamov N. and Oleynik, I.* Molecular dynamics simulations of femtosecond laser ablation and spallation of gold // *AIP Conf. Proc.* 2010. V. 1278. P. 121–130.
32. *Demaske B., Zhakhovsky V., Inogamov N., White C., Oleynik I.* Md simulations of laser-induced ultrashort shock waves in nickel // *AIP Conf. Proc.* 2012. V. 1426. P. 1163–1166.
33. *Demaske B.J., Zhakhovsky V.V., Inogamov N.A., Oleynik I.I.* Ultrashort shock waves in nickel induced by femtosecond laser pulses // *Phys. Rev. B*. 2013. V. 87. № 5. P. 054109 [1–9].
34. *Bushman A.V., Kanel' G. I., Ni A. L., Fortov V. E.* Intense dynamic loading of condensed matter. Taylor & Francis (1993).
35. *Kanel G.I., Razorenov S.V., Fortov V.E.* Shock-Wave Phenomena and the Properties of Condensed Matter. Springer, 2004.

36. *Antoun T., Seaman L., Curran D.R., Kanel G.I., Razorenov S.V., Utkin A.V.* Spall Fracture (Shock Wave and High Pressure Phenomena), Springer. 2003.
37. *Канель Г.И., Фортвов В.Е., Разоренов С.В.* Ударные волны в физике конденсированного состояния // УФН. 2007. Т. 177. № 8. С. 809–830.
38. *Мисочко О.В.* Неклассические состояния возбуждений кристаллической решётки: сжатые и запутанные фононы // УФН. 2013. Т. 183. № 9. С. 917–933.
39. *Zijlstra E.S., Kalitsov A., Zier T., Garcia M.E.* Squeezed thermal phonons precurse nonthermal melting of silicon as a function of uence // Phys. Rev. X. 2013. V. 3. P. 011005.
40. *Gamaly E.G. Rode A.V.* Ultrafast electronic relaxation in superheated bismuth // New J. Phys. 2013. V. 15. P. 013035.
41. *Khakshouri, S., Alfe D., Duffy D.M.* Development of an electron-temperature-dependent interatomic potential for molecular dynamics simulation of tungsten under electronic excitation // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 224304.
42. *Sin'ko, G.V., Smirnov N.A., Ovechkin A.A., Levashov P.R., Khishchenko K.V.* Thermodynamic functions of the heated electron subsystem in the field of cold nuclei // High Energy Density Physics. 2013. V. 9. P. 309–314.
43. *Kresse G., Furthmuller J.* Efficiency of ab initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Computational Materials Science. 1996. V. 6. P. 15–50.
44. *Norman, G., Saitov, I., Stegailov, V., and Zhilyaev, P.* Atomistic modeling and simulation of warm dense matter. conductivity and reflectivity // Contributions to Plasma Physics. 2013. V. 53. № 4–5. P. 300–310.
45. *Knyazev D.V. and Levashov P. R.* Ab initio calculation of transport and optical properties of aluminum: Influence of simulation parameters // Computational Materials Science. 2013. V. 79. P. 817–829.
46. *Evans R., Badger A.D., Fallies F., Mahdieh M., Hall T.A., Audebert P., Geindre J.-P., Gauthier J.-C., Mysyrowicz A., Grillon G., Antonetti A.* Time- and Space-Resolved Optical Probing of Femtosecond-Laser-Driven Shock Waves in Aluminum // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 3359–3362.
47. *Gahagan K.T., Moore D.S., Funk D.J., Rabie R.L., Buelow S.J., Nicholson J.W.* Measurement of shock wave rise times in metal thin films // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. P. 3205–3208.
48. *Funk D.J., Moore D.S., Gahagan K.T., Buelow S.J., Reho J.H., Fisher G.L., Rabie R.L.* Ultrafast measurement of the optical properties of aluminum during shock-wave breakout // Phys. Rev. B. 2011. V. 64. № 8. P. 115114.
49. *Ashitkov S., Komarov P., Agranat M., Kanel G., Fortov V.* Measurements of a strength of metals in a picosecond time range // Bulletin of the American Physical Society. 2013. V. 58. № 7. P. 187–188.
50. *Whitley V.H., McGrane S.D., Eakins D.E., Bolme C.A., Moore D.S., Bingert, J.F.* The elastic-plastic response of al films to ultrafast laser-generated shocks // J. Appl. Phys. 2011. V. 109. P. 013505.
51. *Crowhurst J.C., Armstrong M.R., Knight K.B., Zaugg J.M., Behymer E.M.* Invariance of the Dissipative Action at Ultrahigh Strain Rates Above the Strong Shock Threshold // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. P. 144302.
52. *Жаховский В.В., Иногамов Н.А.* Упругопластические явления в ультракоротких ударных волнах // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92. № 8. С. 574–579.
53. *Zhakhovskiy V.V., Budzevich M.M., Inogamov N.A., Oleynik I.I., White C.T.* Two-zone elastic-plastic single shock waves in solids // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. № 13. P. 135502 [1–4].
54. *Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А., Шепелев В.В.* Сверхупругость и распространение ударных волн в кристаллах // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93. № 4. С. 245–251.
55. *Huang L., Yang Y., Wang Y., Zheng Z., Su W.* Measurement of transit time for femtosecond-laser-driven shock wave through aluminium films by ultrafast microscopy // J. Phys. D. 2009. V. 42. P. 045502.
56. *Demaske B., Zhakhovskiy V., Inogamov N., White C., Oleynik I.* Split and two-zone elastic-plastic shock waves in nickel: a MD study // Bulletin Amer. Phys. Soc. 2013. V. 58. № 7. P. 151–152.
57. *Inogamov N., Ashitkov S., Zhakhovskiy V., Shepelev V., Khokhlov V., Komarov P., Agranat M., Anisimov S., Fortov V.* Acoustic probing of two-temperature relaxation initiated by action of ultrashort laser pulse // Appl. Phys. A. 2010. V. 101. P. 1–5.
58. *Inogamov N., Zhakhovskiy V., Ashitkov S., Khokhlov V., Shepelev V., Komarov P., Ovchinnikov A., Sitnikov D., Petrov Y., Agranat M., Anisimov S., Fortov V.* Laser acoustic probing of two-temperature zone created by femtosecond pulse // Contributions to Plasma Physics. 2011. V. 51. № 4. P. 367–374.

59. Ашитков С.И., Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Эмиров Ю.Н., Агранат М.Б., Олейник И.И., Анисимов С.И., Фортвов В.Е. Образование нанополостей в поверхностном слое алюминиевой мишени при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов // Письма в ЖЭТФ 2012. Т. 95. № 4. С. 192-197.
60. Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Nishihara K. Laser ablation and spallation of crystalline aluminum simulated by molecular dynamics // J. Phys.: Conf. Ser. 2008. V. 112. P. 042080.
61. Жаховский В.В., Иногамов Н.А., Nishihara К. Новый механизм формирования нанорельефа поверхности, облученной фемтосекундным лазерным импульсом // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т. 87. № 8. С. 491–496.
62. arXiv:DC/0405086v1 24 May 2004.
63. Kuznetsov A., Koch J., Chichkov B. Nanostructuring of thin gold films by femtosecond lasers // Appl. Phys. A. 2009. V. 94. P. 221–230.
64. Ivanov D., Kuznetsov A., Lipp V., Rethfeld B., Chichkov B., Garcia M., Schulz W. Short laser pulse nanostr.of metals: direct comp.of md modeling and experiment // Appl. Phys. A. 2013. V. 111. P. 675687.
65. Nakata Y., Tsuchida K., Miyanaga N., Okada T. Nano-sized and periodic structures generated by interfering femtosecond laser // JLMN-Journal of Laser Micro/Nanoengineering. 2008. V. 3. № 2. P. 63–66