

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО ТЕПЛОФИЗИКЕ
НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО ФИЗИКЕ ПЛАЗМЫ
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

**ФИЗИКА ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ
ВЕЩЕСТВА — 2008**

Черноголовка — 2008

УДК:536.20

Физика экстремальных состояний вещества — 2008

*Под редакцией Фортова В. Е., Ефремова В. П., Хищенко К. В., Султанова В. Г.,
Левашова П. Р., Карамурзова Б. С., Темрокова А. И., Канеля Г. И., Иосилевского И. Л.,
Милявского В. В., Минцева В. Б., Петрова О. Ф., Савинцева А. П., Шпаташовской Г. В.*

Сборник посвящен исследованиям в области теплофизики экстремальных состояний и физики высоких плотностей энергии. Рассматриваются различные модели и результаты теоретических расчетов уравнений состояния вещества при высоких давлениях и температурах, физика ударных и детонационных волн, экспериментальные методы диагностики быстропротекающих процессов, взаимодействие мощных ионных и электронных пучков, интенсивного лазерного, рентгеновского и СВЧ излучения с веществом, электрический взрыв проводников мощными импульсами тока, методы генерации интенсивных импульсных потоков энергии, физика низкотемпературной плазмы, проблемы управляемого термоядерного синтеза и традиционной энергетики, а также различные технологические аспекты. Основная часть работ была представлена на XXIII Международной конференции «Уравнения состояния вещества» (Эльбрус, 1–6 марта 2008 г.). Издание адресовано специалистам в области физико-технических проблем энергетики.

ISBN 5-901675-34-7

© Институт проблем химической физики Российской академии наук,
Черноголовка, 2008

26–28, 2007. RAS, Joint Institute for High Temperatures. Book of Abstracts, Moscow, 2007, P. 30–31.
V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, K. Nishihara, *ibid*,

- P. 47–48.
2. V.V. Temnov, Doctoral Dissertation, University of Duisburg-Essen (2004).

СУБПИКОСЕКУНДНАЯ ЛАЗЕРНАЯ АБЛЯЦИЯ: УНИВЕРСАЛЬНОСТЬ ПОРОГА И СПЕЦИФИКА ОКОЛОПОРОГОВОГО ПОВЕДЕНИЯ

Петров Ю.В.*¹, Анисимов С.И.¹, Иногамов Н.А.¹, Хохлов В.А.¹, Жаховский В.В.²,
Nishihara K.³, Upadhyay A.K.⁴, Rethfeld B.⁵, Urbassek H.M.⁵

¹ИТФ РАН, Москва, Россия, ²ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, Россия, ³ILS, Osaka, Japan,

⁴University of Michigan, Ann Arbor, USA, ⁵Universität Kaiserslautern, Kaiserslautern, Deutschland

*uvp49@mail.ru

Работа посвящена сравнению абляции разных веществ ультракороткими лазерными импульсами (УКЛИ). Имеются три класса веществ: металлы, полупроводники и диэлектрики. Причем металлы и полупроводники образуют одну группу, а диэлектрики — другую. Результаты воздействия УКЛИ на эти группы при умеренных флюенсах $F \sim 1 \text{ Дж}/\text{см}^2$ качественно отличаются. В первой группе существуют диапазон F между порогами абляции F_a и испарения F_e , в котором в разлетающемся лазерном факеле имеется откольный купол (ОК). Наличие ОК принципиально меняет характер отражения зондирующих УКЛИ от факела по сравнению со случаем диэлектриков, когда ОК в факеле нет.

В металлах после воздействия УКЛИ за время t_T прогревается тонкий слой толщины $d_T \sim 10 - 100 \text{ нм}$. После этого скорость распространения тепловой волны резко снижается. Время t_T меньше или порядка звукового времени $t_s = d_T/c_s$. Это важно, поскольку определяет характер последующего разлета. Сверхзвуковой нагрев переводит слой d_T в нагруженное состояние с давлением $p_T > 0$. В волне разгрузки в конденсированной среде с конечной прочностью возникает область растяжения вещества, в которой давление становится отрицательным. При превышении порога прочности происходит откол — причина образования ОК.

В полупроводниках при малых F глубина $d_T(F)$ велика по сравнению с d_T для металлов. С повышением F увеличивается количество электронов e^- , перебрасываемых из валентной зоны в зону проводимости за время τ_L действия УКЛИ («металлизация»). Толщина $d_T(F)$ резко уменьшается, когда в поверхностном слое отность электронов n в зоне проводимости превышает критическую плотность n_c для частоты греющего УКЛИ. Положение становится аналогичным случаю металла. При сравнении с диэлектриками очень важно то, что расплавленные полупроводники имеют проводящую жидкую fazу. Ширина запрещённой зоны Δ мала, поэтому заброс даже большого числа электронов $Z \sim 1$ оставляет полупроводник в конденсированном состоянии с конечным сопротивлением на разрыв (Z — число свободных e^- на атом). Соответственно в полупроводнике, как и в металле, имеется диапазон (F_a, F_e) с ОК в факеле.

В диэлектриках при малых флюенсах F глубина $d_T(F)$ велика. При повышении F начинается металлизация — переброс e^- через зону Δ за время τ_L . Когда плотность n свободных e^- достигает n_c толщина $d_T(F)$ резко уменьшается. Положение становится аналогичным случаю металла в том отношении, что изохорический нагрев повышает давление $p_T > 0$. Однако, щель Δ в спектре велика — заброс $Z \sim 1$ электронов переводит диэлектрик в газо-плазменное состояние, не обладающее сопротивлением растяжению. Поэтому в факеле диэлектрика ОК отсутствует.

В работе откольные явления в первой группе рассматриваются методами молекулярной динамики (МД). На начальной стадии создаётся профиль температуры с глубиной $d_T \sim 10 - 100 \text{ нм}$ и изучаются, во-первых, последующая акустическая релаксация, во-вторых, нуклеация при превышении порога F_a , и, в-третьих, развитие кавитационного ансамбля с образованием откольной пластины. Для МД расчётов необходим потенциал межатомного взаимодействия. С этой целью часто используют потенциал Леннарда-Джонса (LJ), простота которого позволяет несколько смягчить ограничения на быстродействие. В работе сравниваются показанные на рис. 1 потенциалы с узкой (LJ) и широкой (металлы, алюминий, многочастичный ЕАМ потенциал) ямами, ГЦК ячейка. Полупроводники образуют промежуточный случай. В качестве примера полупроводника на рис. 1 показан кремний (Si), который в кристаллическом состоянии имеет структуру алмаза. Потенциалы, нормированные на энергию когезии U_{coh} , построены в виде функции от координаты x вдоль перевального направления, x нормировано на расстояние между начальной и конечной точками: $x \rightarrow x_{norm}$. Максимум $U(x)$ соответствует точке перевала. На рис. 1 показан потенциал атома при его смещении в направлении 110 (ГЦК) или 100 (структуре алмаза) на соседний атом при условии, что этот сосед исключен из решетки. В случае Si на отрезке перехода атома в незанятый узел имеется дополнительный минимум потенциала такой же глубины как исходный минимум. Дополнительный минимум находится на меньшем расстоянии от исходной точки, чем незанятый узел. Это указывает на уменьшение удельного объема Si при плавлении. Потенциалы LJ и Al образуют крайние случаи с высокой и



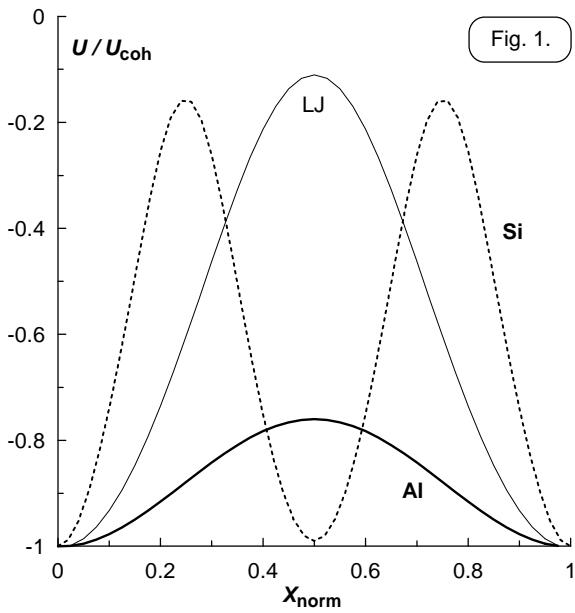


Рис. 1.

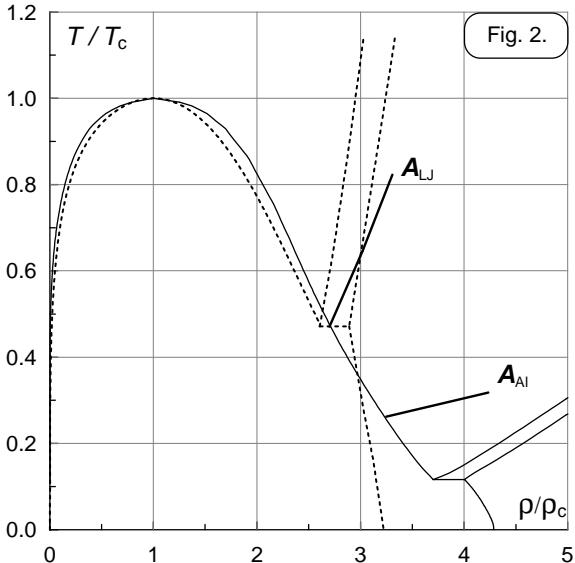


Рис. 2.

низкой перевальными точками и соответственно с высокой и низкой температурами тройной точки T_t по отношению к критической температуре T_c . Сравнение фазовых диаграмм LJ (штриховые линии) и Al (сплошные линии), нормированных на критические параметры, представлено на рис. 2. Данные по УРС Al взяты из работы [1]. Показаны бинодаль и область плавления.

Спрашивается, как потенциал оказывается на отколе? Для изучения вопроса были определены пороги абляции в случае разрыва тонкой плёнки после её быстрого однородного нагрева УКЛИ [2, 3]. Для моделирования металлов применялись многочастичные потенциалы. Оказывается, что с одной стороны пороги абляции E_a/U_{coh} слабо зависят от формы потенциальной ямы, а с другой — характер нуклеации на пороге качественно различается для узких и широких ям, здесь E_a —

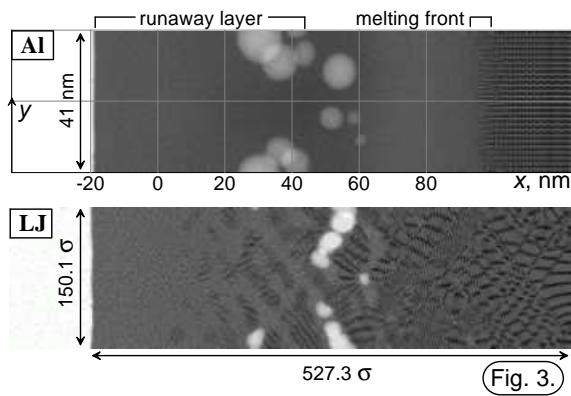


Рис. 3.

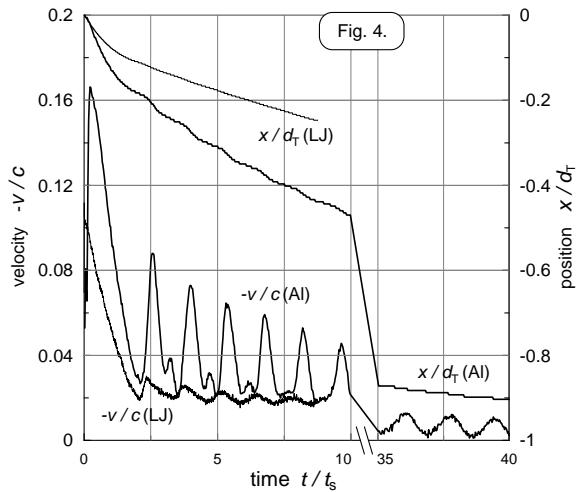


Рис. 4.

энергия, потраченная на нагрев плёнки на пороге. Действительно, с одной стороны порог E_a/U_{coh} находится в диапазоне 0.3–0.4 и для LJ, и для всех исследованных металлов Al, Cu, Ti, W — в этом заключается универсальность. Получается, что термомеханический разрыв вещества определяется глубиной ямы, а не её формой (как при испарении). Для случая полубесконечной мишени пороговые адиабаты LJ и Al показаны линиями A_{LJ} и A_{Al} на рис. 2. С другой стороны, эти адиабаты идут одна по твёрдой, а другая по жидкой фазам. Поэтому около порога аблации вещество с широкой ямой разрывается в жидкой фазе, а с узкой — в твёрдой. Нуклеация в расплаве соответствует кавитации (верхний кадр на рис. 3), тогда как разрушение твёрдого тела называется отколом (нижний кадр на рис. 3).

При кавитации в жидкости зародыши паровой фазы приобретают сферическую форму при расширении до размеров порядка нанометра. Искажение сфер начинается при значительных объёмных содержаниях паровой фазы в двухфазной смеси, когда становится существенным взаимное влияние пузырьков. Образование пустот в твердом теле связано с плоскостями скольжения, их пересечениями и накоплением дефектов упаковки [2, 4]. Поэтому образуются сетчатые струк-



туры дефектов, показанные на нижнем кадре на рис. 3, а пустоты направлены под углом к направлению расширения. Расчёт на рис. 3 проведён при $d_T = 772\sigma = 263$ нм (LJ) и 110 нм (алюминий). Показано поле потемнений $\int \rho(x, y, z, t) dz$ на момент времени $t/t_s = 2.1$ (LJ) и 1.7 (алюминий). Координата z направлена по нормали к рисунку.

Пороговые адиабаты A_{LJ} и A_{Al} на рис. 2 относятся к энтропии самой горячей материальной частицы мишени, находящейся на границе с вакуумом. Соответствующие начальные температуры поверхности T_0 равны 1.16ϵ (LJ) и 2.5 кК (Al) для полубесконечной мишени, где ϵ - глубина ямы LJ. Значение энтропии убывает вглубь мишени. На плоскости $(\rho/\rho_c, T/T_c)$ LJ адиабаты идут круче, чем адиабаты Al (рис. 2). Температура в точке пересечения критической адиабаты и изохоры начальной плотности в 8 раз превышает критическую температуру T_c в случае LJ и только примерно в два раза в случае Al. Здесь критической названа адиабата, пересекающая точку ρ_c, T_c . Адиабаты на плоскости (ρ, T) идут под меньшим углом, чем кривые солидус и ликвидус, ограничивающие двухфазную (твёрдое тело и жидкость) область плавления. Поэтому в случае LJ пороговая адиабата A_{LJ} пересекает область плавления около тройной точки. Она заканчивается на отрезке бинодали, соответствующем тройной точке.

Расчёт, приведённый на нижнем кадре на рис. 3, соответствует 8% превышению над порогом абляции по T_0 . Поэтому в LJ случае на рис. 3 некоторая зона возле внешней границы ОК расплавлена. Однако нуклеация несплошностей происходит в глубине мишени вне этой зоны. Там вещество остаётся в твердом состоянии. На границе зоны расплава формируется переходный слой с сильными нарушениями кристаллической структуры в виде сгущений дефектов, переходящих в аморфную упаковку вместе с зернами сохранившихся кристаллитов. Сказанное относится к полубесконечной мишени. В случае однородно нагретого лазером тонкого слоя порог по T_0 меньше. Поэтому соответствующая адиабата A_{LJ}^{foil} проходит существенно ниже адиабаты A_{LJ} (рис. 2) — достаточно далеко от области плавления и от жидкой фазы [2, 4]. Поэтому вблизи порога F_a эффекты аморфизации при разрушении тонкого LJ слоя намного меньше, чем в случае полубесконечной мишени. Отметим, что величина порога слабо зависит от толщины слоя, тогда как относительная роль эффектов аморфизации существенно возрастает при уменьшении толщины слоя и соответственно размеров МД системы.

В случае алюминия с полубесконечной мишенью ситуация другая — фронт плавления (рис. 3) располагается на значительном расстоянии от дна кратера. Для алюминия порог абляции выше порога плавления в случае и полубесконечной мишени, и тонкого слоя. Вообще для металлов порог абляции в 1.5–2 раза выше порога плавления.

Во всяком случае МД расчёты тонкого слоя из металлов Al, Cu, Ti или W приводят к такому отношению порогов [3]. Поэтому в режимах вблизи порога F_a и выше возникают большие перегревы вещества относительно температуры плавления при данной плотности. Соответственно плавление идёт быстро — к моменту формирования максимального растягивающего напряжения вещество расплавлено на глубину от поверхности мишени большую, чем глубина нуклеации. Ликвидус LJ пересекает изохору начальной плотности при $T \approx 2\epsilon$. Начиная с начальных температур поверхности полубесконечной мишени T_0 примерно на 50% выше пороговой, зона нуклеации LJ переходит в расплавленную фазу, как в случае металлов. При этом как и в металлах заметную роль начинает играть торможение откольного слоя за счёт сопротивления пены растяжению.

На рис. 4 сравнивается кинематика $(x/d_T, v/c_s$ от t/t_s) движения границы с вакуумом в случае LJ и Al в околовороговом режиме. Всплески на рис. 4 связаны с акустическими пульсациями в откольной пластине. Амплитуда пульсаций меньше в LJ пластине. При этом пластина остаётся динамически связанный с остатком мишени через кавитационную зону. Расширение на дистанции, превышающие длину теплового расширения Δd , указывает на возникновение двухфазной области между пластиной и остатком. На пороге F_a отношение $\Delta d/d_T$ составляет примерно 15% (LJ) и 25% (алюминий). Медленное снижение скорости на рис. 4 при $t > 3t_s$ происходит из-за торможения пластины плёнками между кавитационными пузырями. На картах потемнений типа рис. 3 такие плёнки имеют вид длинных перемычек, соединяющих ОК и остаток как в случае LJ, так и в случае Al. В случае LJ вблизи порога абляции перемычка состоит из аморфного вещества с вкраплениями кристаллитов. Она обладает высокой пластичностью, позволяющей оказывать сопротивление растяжению при смещениях, превышающих Δd , рис. 4. Ещё более растяжимыми оказываются жидкие перемычки в случае металла. Торможение откольной пластины продолжается на огромных временах порядка наносекунды. За эти промежутки времени накапливаются гигантские смещения границы, которые в 3–5 раз превышают длину Δd . Работа поддержана грантом РФФИ 07-02-00764.

-
1. A.V. Bushman, G.I. Kanel', A.L. Ni, V.E. Fortov, *Intense dynamic loading of condensed matter*, Taylor & Francis Translation., 295 p. (1993). <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/>
 2. С.И. Анисимов, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, К. Nishihara, А.М. Опарин, Ю.В. Петров, Письма в ЖЭТФ **77**, 731 (2003).
 3. A.K. Upadhyay, H.M. Urbassek, J. of Phys.: Conference Series **59**, 68 (2007).
 4. S.I. Anisimov, V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, K. Nishihara, Yu.V. Petrov, Appl. Surf. Sci. **253**, 6390 (2007).

