

## ФОРМИРОВАНИЕ КРАТЕРА И ОТКОЛЬНОЙ ОБОЛОЧКИ КОРОТКИМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ

© 2006 г. С.И. Анисимов<sup>1</sup>, В.В. Жаховский<sup>2,3</sup>, Н.А. Иногамов<sup>1</sup>, К. Нишихара<sup>3</sup>,  
Ю.В. Петров<sup>1</sup>, В.А. Хохлов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, Москва

<sup>2</sup>ИТЭС ОИВТ РАН, Москва

<sup>3</sup>Institute of Laser Engineering, Osaka University, Osaka, Japan

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант 04-02-16972.

Рассматривается задача о воздействии коротких лазерных импульсов на плоские мишени из поглощающих излучение конденсированных веществ. Гидродинамическому движению, вызванному лазерным облучением, предшествует догидродинамическая стадия, на которой формируется нагретый слой толщины  $d_T$  возле границы мишени. Проведен анализ распространения электронной тепловой волны из скин-слоя металла на догидродинамической стадии. Распространение тепловой волны сопровождается передачей тепловой энергии электронной подсистемы в ионную подсистему из-за электрон-ионной температурной релаксации. Анализ волны и релаксации позволяет оценить зависимость толщины нагретого слоя  $d_T(F_{abs})$  от поглощенной лазерной энергии  $F_{abs}$  Дж/см<sup>2</sup>. Для описания движения на гидродинамической стадии привлечены, во-первых, газодинамический код из монографии А.А. Самарского и Ю.П. Попова и, во-вторых, многопроцессорный (до 10<sup>3</sup> процессоров) молекулярно-динамический (МД) код. Массивное распараллеливание позволило довести количество атомов в МД расчетах до очень больших значений, соответствующих условиям экспериментов (~35·10<sup>6</sup>). В МД расчетах других групп используется намного меньшее число частиц ~10<sup>4</sup>–10<sup>5</sup> (то есть на три порядка меньше, однопроцессорные алгоритмы).

## CRATER AND SPALLATION SHELL FORMATION BY SHORT LASER PULSE

S.I. Anisimov<sup>1</sup>, V.V. Zhakhovskii<sup>2,3</sup>, N.A. Inogamov<sup>1</sup>, K. Nishihara<sup>3</sup>, Yu.V. Petrov<sup>1</sup>, V.A. Khokhlov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Landau Institute for Theoretical Physics of RAS

<sup>2</sup>Institute for High Temperatures of RAS

<sup>3</sup>Institute of Laser Engineering, Osaka University, Osaka, Japan

Action of ultrashort laser pulses on opaque condensed plane targets is considered. The prehydrodynamical stage with supersonic electron heat conduction wave precedes to the hydrodynamical stage. At the prehydrodynamical stage near a boundary a heated layer with thickness  $d_T$  is formed. An expansion of electron heat wave from a skin layer is studied. The expansion is accompanied by a gradual cooling of hot electrons due to electron-ion thermal relaxation. The analysis of a heat wave and relaxation allows to estimate dependence  $d_T(F_{abs})$  of thickness of the heated layer on absorbed laser fluence  $F_{abs}$  [J/cm<sup>2</sup>]. For description of the hydrodynamical stage we use, first, A.A. Samarskii and Yu.P. Popov gasdynamical code and, second, multiprocessor (up to 10<sup>3</sup> processors) molecular dynamics (MD) code. Massively parallel computations have allowed us to operate with very large amounts of atoms in MD simulations (~35·10<sup>6</sup>). This corresponds to experimental conditions. In MD calculations of other groups three order of magnitude smaller amounts of atoms are used (one processor approach).

### 1. Введение

В течение последних нескольких лет было опубликовано много работ, посвященных экспериментальному исследованию и численному моделированию воздействия ультракоротких

(пикосекундных и фемтосекундных) лазерных импульсов на поглощающие вещества (см., например, [1-12]). Известно резкое отличие профилей давления и, соответственно, характера гидродинамического движения в случаях с длинными,  $\tau > d_T/c_s$ , и короткими,  $\tau < d_T/c_s$ , импульсами. Здесь  $\tau$  – длительность лазерного импульса,  $d_T$  – толщина слоя вещества, прогретого электронной тепловой волной, и  $c_s$  – скорость звука (при  $d_T \sim 100$  нм,  $c_s \sim 10^6$  см/с имеем:  $d_T/c_s \sim 10$  пс). В случае длинных импульсов мишень находится в механически "разгруженном" состоянии, поскольку успевает произойти релаксация термомеханических напряжений. Соответственно, давления невелики (порядка давления насыщенных паров) и абляционный унос вещества обусловлен испарением с поверхности (градиенты давления недостаточны для обеспечения интенсивных движений в конденсированной фазе).

При коротких импульсах положение иное. Унос вещества вызывается движением, причиной которого является тепловое расширение слоя вследствие поглощения лазерной энергии (термомеханическое разрушение). При этом существенна кинетическая энергия вещества, набранная в процессе ускорения из состояния покоя при тепловом расширении (в процессе «разгрузки»). Перед началом гидродинамической стадии давления велики – закончившийся лазерный импульс оставляет нагретый слой в "нагруженном" состоянии. Поэтому режим с коротким импульсом можно назвать режимом инерционного удержания. Имеется в виду, что до начала гидродинамической стадии  $t < \tau_H$  из-за инерции вещества термомеханические напряжения "заперты" внутри нагретого слоя.

Поглощение излучения происходит за время действия лазерного импульса  $\tau$ , которое в типичных случаях [1–4] составляет примерно 100 фс. Энергия излучения поглощается в электронной подсистеме и передается в глубину мишени электронной теплопроводностью. Перенос энергии носит характер электронной тепловой волны. Одновременно происходит передача энергии от электронов решетке. Заметное гидродинамическое движение начинается на временах порядка  $\tau_H$ , которое во многих случаях, представляющих интерес, превышает время электрон-фононной релаксации  $\tau_{ei} \sim 1$  пс [5]. Таким образом, на гидродинамической стадии температуры электронов и ионов часто оказываются примерно одинаковыми.

Вытекающие из описанной схемы  $\tau \ll \tau_{ei} \ll \tau_H$  упрощения были использованы в теоретических работах [6–8], где абляция рассматривалась в рамках однотемпературной модели как разлет предварительно нагретого слоя вещества. В связи с этим следует упомянуть ряд недавних работ (см., например, [11, 12]), в которых были предприняты интересные попытки рассмотреть поглощение света, электрон-фононную релаксацию, фазовые переходы и гидродинамическое движение в рамках единой "гибридной" модели. Очевидная трудность, возникающая при построении такого рода моделей, связана с тем, что первые два из указанных выше процессов требуют квантового описания, тогда как два последних являются классическими. Насколько известно авторам настоящей статьи, проблема единого описания не была удовлетворительным образом разрешена ни в одной из предложенных моделей. Реальную точность "гибридных" моделей трудно оценить. Можно ожидать, что они, в лучшем случае, дают некоторую качественную картину взаимодействия ультракороткого лазерного импульса с веществом. Для количественного рассмотрения задачи о поглощении света и электрон-фононной релаксации необходимо решать квантовое кинетическое уравнение (см., например, [13, 14]). При этом выясняется, что определяющую роль в нагревании решетки играют не рассматриваемые обычно процессы переброса, учет которых в несколько раз уменьшает время электрон-фононной релаксации [15].

Задачу о разлете нагретого слоя естественно рассматривать в гидродинамическом приближении (как это сделано в [6]), поскольку толщина этого слоя на один - два порядка превосходит межатомное расстояние в конденсированных фазах, а длина свободного пробега ионов сравнима с этим расстоянием. При этом возникает, однако, нетривиальный вопрос о влиянии метастабильных состояний системы конденсированная фаза – пар на динамику разлета. Обычно он решается на полуфеноменологическом уровне путем добавления кинетических уравнений к

уравнениям гидродинамики в области метастабильности. Кинетические модели описывают образование и рост зародышей паровой фазы. Параметры модели извлекаются из сравнения расчетов с экспериментом. Более привлекательным представляется другой путь, связанный с интегрированием уравнений движения индивидуальных атомов (молекулярная динамика). Этот метод не требует феноменологических подгоночных параметров. Использование молекулярной динамики позволяет прогнозировать результат эксперимента, а не подгонять теоретические данные под эксперимент. Такой подход был применен в [8] для проверки предположений, принятых в [6] (гидродинамика). Это позволило корректно учесть роль метастабильных состояний.

Результатом работ [6–8] является выяснение структуры течения при разлете мгновенно нагретого однородного слоя в вакуум. Из них следует, что на внешнем краю разлетающегося облака формируется оболочка из конденсированного вещества, заполненная двухфазной смесью пар – жидкость. Оболочка движется с постоянной скоростью и плотностью, оставаясь в конденсированном состоянии. Парожидкостная смесь расширяется путем однородной деформации, при которой профиль скорости линеен по координате, а средняя плотность смеси падает обратно пропорционально времени разлета. Соответственно, отношение плотности оболочки к плотности смеси возрастает с течением времени.

В первых работах ([6], [8]) была описана главная особенность течения, заключающаяся в выделении двух структурных элементов: тонкой оболочки и резко отличающейся от нее по свойствам двухфазной смеси. Затем был установлен пороговый характер абляции [7]. В [6, 8] рассмотрен случай, когда начальная температура нагретого слоя значительно превышает пороговую температуру. В этом случае эффекты метастабильности не являются доминирующими, поскольку мало отношение давления на спинодали  $|p_s(S) - p_b(S)|$  к давлению  $p_0(S)$  на изохоре начальной плотности  $\rho = \rho_0$  при одинаковых значениях энтропии  $S$ ; здесь  $p_b$  и  $p_s$  – давления на бинадали и спинодали. Соответственно, асимптотическое (в пределе  $t \rightarrow \infty$ ) распределение скоростей по массе разлетающегося вещества формируется в основном при расширении вдоль отрезка адиабаты от точки на изохоре  $(\rho_0, p_0)$  до точки на бинадали  $(\rho_b, p_b)$ . В этом случае гидродинамическое описание строится с помощью равновесного уравнения состояния [6], которое конструируется в соответствии с правилом Максвелла [16]. Правило Максвелла определяет кривую, ограничивающую двухфазную область сосуществования конденсированной фазы и пара (бинадаль). Наоборот, в допороговом и околопороговом режимах эффекты метастабильности [7] играют существенную роль, поскольку давления  $p_0 - p_b(S)$  и  $|p_s(S) - p_b(S)|$  сравнимы.

В [6–8] рассматривался разлет однородно нагретого слоя вещества. Этот случай интересен в двух отношениях. Во-первых, он соответствует помещенной в вакуум тонкой пленке (толщина пленки  $2d$  меньше толщины слоя  $d_T$ , который прогревает тепловая волна). В этом случае происходит симметричный разлет в две стороны. Во-вторых, симметричная половина течения пленки от средней плоскости до границы с вакуумом представляет собой грубую модель полубесконечной мишени с однородно нагретым слоем толщиной  $d_T$  на границе с вакуумом. Начальный профиль температуры имеет в этом случае скачок от температуры  $T_\infty$  в глубине мишени до температуры  $T_0$  в однородно нагретом слое у поверхности. В реальных экспериментах с мишенью конечной толщины [1–3] к началу гидродинамического движения распределение температуры в нагретом слое (которое при нашем рассмотрении является начальным),  $T_0(x)$ , неоднородно. Температура убывает с глубиной  $x$ . Именно этот случай и рассматривается в данной работе.

## 2. Поглощение излучения, тепловая волна и характеристики нагретого слоя перед началом движения

Разлетающееся облако и кратер формируются в процессе гидродинамического движения. Причиной движения являются механические напряжения, возникающие в нагретой лазером мишени. Задачу естественно рассматривать в одномерной постановке, поскольку размер  $D$  пят-

на фокусировки много больше толщины  $d_T$  прогретого слоя. В типичном случае  $d_T \sim 100$  нм, тогда как  $D \sim 100$  мкм. В одномерном течении все величины зависят только от времени  $t$  и координаты  $x$ , а скорость имеет одну компоненту  $u(x,t)$  вдоль оси  $x$ . Вследствие неоднородного распределения интенсивности по пятну фокусировки все характеристики течения параметрически зависят от поперечной к лучу лазера координаты  $z$ . В экспериментах [1–3] распределение интенсивности близко к гауссовскому

$$F_{in}(z) = F_{in}^{cnt} \exp(-z^2 / D^2), \quad (2.1)$$

где  $F_{in}$  – плотность энергии падающего лазерного излучения (Дж/см<sup>2</sup>). Действие лазерного импульса при  $\tau \sim 100$  фс [1–3] заканчивается задолго до начала гидродинамического движения:  $\tau c_s \sim 1$  нм. Поэтому при анализе начальных стадий массовым движением можно пренебречь, полагая  $v=0$ .

Поглощенная лазерная энергия переносится электронной теплопроводностью вглубь мишени. Эту стадию обычно описывают в рамках двухтемпературной модели [17, 18]:

$$c_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) - \alpha(T_e - T_i) + Q, \quad (2.2)$$

$$c_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa_i \frac{\partial T_i}{\partial x} \right) + \alpha(T_e - T_i), \quad (2.3)$$

где  $T_e$ ,  $c_e$ ,  $\kappa_e$ ,  $T_i$ ,  $c_i$ ,  $\kappa_i$  – температура, теплоемкость и теплопроводность электронной и фононной подсистем соответственно,  $Q$  – мощность, выделяемая в результате поглощения лазерного излучения. Коэффициент  $\alpha$  характеризует скорость обмена энергией между электронами и решеткой [17]. Для  $Q$  можно принять простейшее выражение:

$$Q(x, z, t) = \frac{I(z)}{\delta_I} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \exp\left(\frac{x}{\delta_I}\right). \quad (2.4)$$

Коэффициент отражения  $R$  связывает падающую лазерную энергию  $F_{in}$  с энергией, поглощенной электронной подсистемой:  $F_{abs} = (1-R)F_{in}$ . В уравнении (2.4)  $\delta_I = \delta/2$ , где  $\delta$  – толщина скин-слоя.

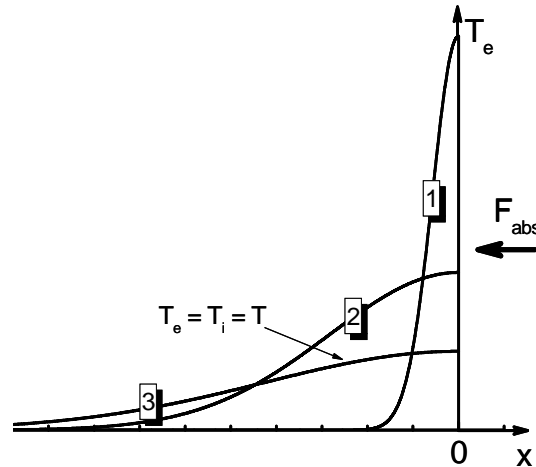
Абляция материала происходит на стадии гидродинамического движения. Ей предшествуют три «электронных» стадии: поглощение излучения, электронный перенос энергии и нагревание решетки – на которых температура электронов значительно превышает температуру решетки, а движением вещества можно пренебречь. Пренебрежем температурой  $T_i$  по сравнению с  $T_e$  в формулах (2.2), (2.3). Это допустимо на стадии охлаждения электронов и нагревания решетки. При снижении температуры электронов до значений  $T_e \sim T_i$  слагаемое  $\alpha(T_e - T_i)$  в системе уравнений (2.2), (2.3) становится несущественным. При таких температурах тепловая энергия электронов мала по сравнению с тепловой энергией ионов из-за малой теплоемкости электронов. Если пренебречь зависимостью коэффициента электронной теплопроводности от  $T_i$ , то на стадии электронного переноса уравнение (2.2) можно записать в виде

$$\frac{\partial E_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \chi_e \frac{\partial E_e}{\partial x} \right) - \frac{2\alpha}{\pi} \sqrt{\frac{E_e \varepsilon_F}{n_e}} + Q. \quad (2.5)$$

Здесь  $E_e = \pi^2 T_e^2 n_e / 4\varepsilon_F$  – тепловая часть электронной энергии и  $\varepsilon_F$  – энергия Ферми. Вместо коэффициента теплопроводности  $\kappa_e$  в уравнение (2.5) входит температуропроводность  $\chi_e = \kappa_e / c_e$ .

Как уже отмечалось выше, стадии гидродинамического движения предшествуют три электронные стадии (рис.1). Продолжительность первой из них, на которой происходит погло-

щение лазерного излучения, определяется длительностью лазерного импульса  $\tau$  (в типичных экспериментах [1–3]  $\tau \sim 100$  фс). Излучение поглощается в приповерхностном скин-слое толщиной  $\delta_l$ . Время  $\tau$  мало; за это время не происходит ни существенного охлаждения электронов из-за электрон-фононной релаксации, ни заметного расширения зоны прогрева из-за электронной теплопроводности. Таким образом, толщина зоны прогрева на стадии поглощения порядка толщины скин-слоя.



**Рис.1.** Качественный характер распределения электронной температуры на трех начальных стадиях взаимодействия: 1 – поглощение излучения, 2 – распространение тепловой волны вглубь мишени, 3 – нагревание решетки

Второй является стадия электронной тепловой волны, на которой обычно также можно пренебречь гидродинамическим движением, поскольку электронная тепловая волна вначале распространяется со сверхзвуковой скоростью. Потери энергии электронной подсистемой, связанные с электрон-фононной релаксацией, на этой стадии быстро возрастают с ростом толщины зоны, прогретой электронной теплопроводностью.

Электронная тепловая волна распространяется по закону  $d_{ehw} \sim \sqrt{\chi_e t} \sim v_F \sqrt{\tau_e t}$ , где  $v_F$  – фермиевская скорость (предполагается, что  $k_B T_e \ll \epsilon_F$ ) и  $\tau_e$  – электронное транспортное время. По мере распространения тепловой волны ее скорость уменьшается и становится порядка скорости звука. Волна разрежения, распространяющаяся со скоростью звука  $d_H \sim c_s t$ , обгоняет тепловую волну. Это происходит за время порядка  $\tau_H \sim \tau_e v_F^2 / c_s^2$ . Толщина прогретого слоя в момент обгона составляет  $d_T \sim \chi_e / c_s$ . При не слишком высоких плотностях энергии (флюенсах) эта толщина слабо зависит от флюенса и составляет порядка 100 нм.

Из уравнения (2.3) следует, что время нагревания решетки за счет обмена энергией с электронами составляет по порядку величины  $\tau_{ei} \sim c_i / \alpha$ . Согласно [17], при температурах выше дебаевской скорость обмена энергией между электронами и решеткой равна  $\alpha = \pi^2 m n_e c_s^2 / 6 T_i \tau_e$ . Сравнивая  $\tau_{ei}$  со временем установления гидродинамического режима  $\tau_H$ , получаем

$$\frac{\tau_H}{\tau_{ei}} \approx \frac{\epsilon_F}{k_B T_i} \gg 1. \tag{2.6}$$

Таким образом, к началу гидродинамической стадии температуры электронов и решетки становятся примерно одинаковыми и разлет нагретого слоя в первом приближении можно рассматривать в рамках однотемпературной модели. Следует заметить, что простая оценка (2.6)

справедлива при не очень высоких электронных температурах, когда электронная теплопроводность определяется электрон-фононными столкновениями. С повышением электронной температуры возрастает частота электрон-электронных столкновений [5]. Она достигает максимума при температурах порядка фермиевской, а затем убывает пропорционально  $T_e^{-3/2}$  – как в невырожденной плазме. В результате толщина  $d_T$  слоя, прогретого к началу гидродинамической стадии, немонотонно зависит от плотности поглощенной энергии.

На гидродинамической стадии перенос энергии связан, в основном, с движением вещества. На этой стадии у веществ с быстрым электрон-фононным обменом электронная тепловая энергия становится малой по сравнению с энергией ионов. Если же обмен энергией между электронами и решеткой происходит медленно, а поглощенная энергия достаточно велика, значительная часть поглощенной энергии к началу гидродинамического движения остается в электронной подсистеме. В дальнейшем нас будут интересовать умеренные плотности поглощенной энергии, когда гидродинамическая стадия начинается после выравнивания электронной и фононной температур. В этом случае распределение температуры  $T_e(x)=T_i(x)=T(x)$  в момент времени  $\tau_H$  является начальным для гидродинамической стадии.

### 3. Оболочка и кратер

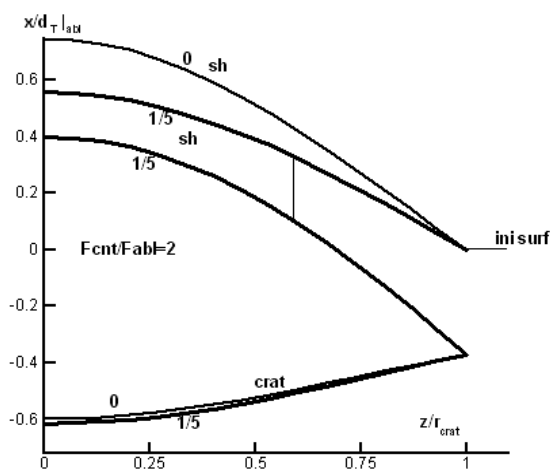
В [6–8] изучался разлет однородно нагретого слоя конденсированного вещества. В реальных экспериментах нагретый слой неоднороден. Начальная температура меняется как по глубине мишени  $x$  (характерный масштаб  $d_T$ ), так и по поперечной к лазерному лучу координате  $z$  (характерный масштаб  $D \gg d_T$ ). Ниже будут приведены результаты газодинамического и молекулярно-динамического моделирования разлета поверхностного слоя, начальная температура которого зависит от  $x$ . Из этих расчетов следует, что качественная структура течения остается такой же, как и при разлете однородно нагретого слоя. Сохраняется, в частности, главная особенность течения: наличие жидкой оболочки, движущейся с постоянной скоростью.

Из расчетов следует, что оболочка существует при плотностях лазерной энергии, находящихся в диапазоне значений между двумя порогом  $F_{abl} < F < F_{ev}$ . На нижнем или абляционном пороге  $F_{abl}$  образуется кратер с резким краем (рис.2 и 3). Край кратера имеет координату  $z=r_{crat}$ . В этой точке по  $z$  глубина кратера  $d_{crat}(z)$  резко изменяется от нуля (прямая «ini surf» соответствует начальному положению границы мишени) до конечного значения  $d_{crat}(z=r_{crat})=d_{crat|abl}$ . Кривые «crat» на рис.2 и 3 дают зависимости  $d_{crat}(z)$  при  $\beta=0$  (метка «0») и  $\beta=1/5$  (метка «1/5»). Предполагалось, что слабые (см. п. 2 выше) зависимости глубины прогрева  $d_T$  от  $F_{abs}$  могут быть аппроксимированы степенными функциями  $d_T \propto F_{abs}^\beta$  с малыми показателями степени  $\beta$ . Считалось, что коэффициент поглощения  $F_{abs}=(1-R)F_{in}$  постоянен, а распределение плотности энергии по пятну гауссово (2.1).

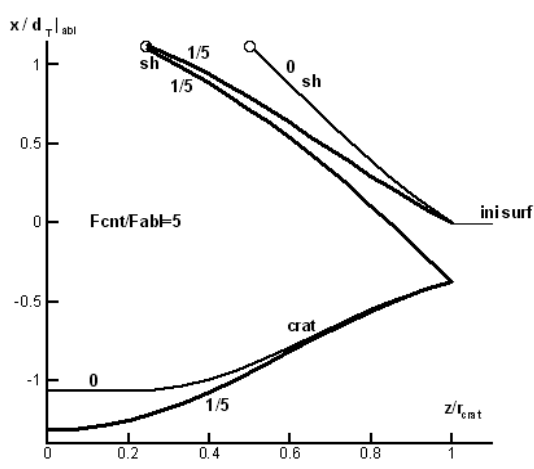
Толщина оболочки  $d_{sh}$  в некоторой точке  $z$  показана на рис.2 вертикальной черточкой, связывающей две кривые «sh» с одинаковыми показателями  $\beta$ . Приведен пример с  $\beta=1/5$  (метка «1/5»). Кривые «sh» являются внешней и внутренней границами оболочки. Толщина  $d_{sh}$  зависит от начальной температуры поверхности  $T_0$  и убывает – как это следует из результатов молекулярно-динамического моделирования – с ростом  $T_0$ . Из-за неоднородного распределения плотности энергии  $F_{abs}$  (а, следовательно, и температуры  $T_0$ ) вдоль оси  $z$  толщина оболочки оказывается также зависящей от  $z$  (рис.2 и 3). С увеличением плотности лазерной энергии от края фокального пятна к центру (2.1) возрастает локальная температура  $T_0(z)$  и уменьшается толщина оболочки. При некоторой локальной температуре  $T_0^{ev}$ , соответствующей верхнему или испарительному порогу  $F_{ev}$ , толщина оболочки обращается в нуль. Это условие определяет порог  $F_{ev}$ .

Из-за наличия порога  $F_{ev}$  возможны две топологически различные формы оболочки. Если  $F_{abl} < F_{crit} < F_{ev}$ , то оболочка полностью покрывает кратер (рис.2), где  $F_{crit}$  – величина плотности энергии в центре пятна (2.1). Если же порог  $F_{ev}$  превзойден, то в центральной области оболочки

образуется отверстие (рис.3). На краю отверстия локальное значение  $F$  равно  $F_{ev}$ . На рис.3 точка окончания оболочки выделена светлым кружком на конце кривой «sh».



**Рис.2.** Формы оболочки «sh» и кратера «crat» в случае, когда оболочка полностью перекрывает кратер. Толщина оболочки  $d_{sh}$  и глубина кратера  $d_{crat}$  нормированы на толщину прогретого слоя на абляционном пороге



**Рис.3.** Случай оболочки с отверстием в центральной области ( $F_{cnt} > F_{ev}$ )

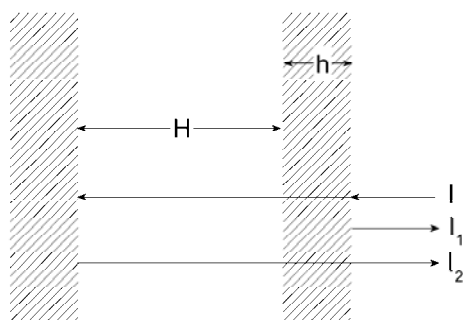
Скорость оболочки  $u_{sh}$  монотонно растет с начальной температурой поверхности  $T_0$ . На пороге абляции  $F_{abl}$  скорость  $u_{sh}$  равна нулю. Поэтому внешняя граница оболочки (кривые «sh») на краю кратера  $z=r_{crat}$  начинаются от прямой «ini surf», задающей положение неповрежденной поверхности мишени (рис.2 и 3). Ниже (п.5) приведены результаты серии газодинамических и молекулярно-динамических (МД) расчетов при разных значениях температуры  $T_0$ . Рис.2 и 3 построены по МД данным.

В экспериментах для исследования динамики абляции используется диагностический лазерный луч, запаздывающий на фиксированное время относительно основного (греющего) луча (техника pump-probe [1–3]). Диагностический луч частично отражается от оболочки, а частично – из-за малой толщины оболочки – проходит сквозь нее и отражается от дна кратера (рис.4). Интерференция двух отраженных лучей порождает наблюдаемую на эксперименте (см., например, [1–3]) характерную картину – кольца Ньютона. Рассмотрим это явление более подробно.

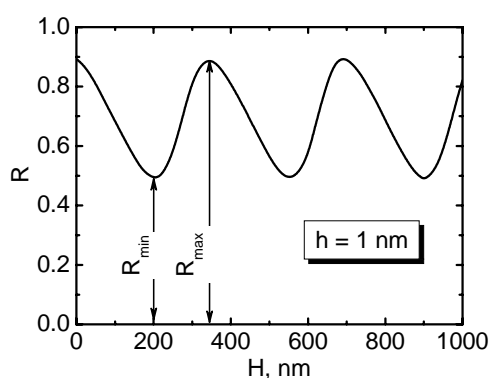
#### 4. Интерференция

Схема формирования интерференционной картины показана на рис.4. Оболочка толщиной  $h$  отделена от дна кратера промежутком  $H$ , который заполнен двухфазной смесью. Зондирующий лазерный луч интенсивностью  $I$  падает справа и отражается частично от оболочки и частично от дна кратера. Коэффициент отражения зависит от геометрических характеристик  $h$  и  $H$ , от комплексных показателей преломления материала оболочки  $\tilde{n}_{sh}$  и материала мишени  $\tilde{n}_{crat}$  и длины волны зондирующего луча:  $R = R_1 + R_2 = R(h, H, \tilde{n}_{sh}, \tilde{n}_{crat}, \lambda)$ . Двухфазная среда, заполняющая промежуток  $H$  между оболочкой и дном кратера, на стадии разлета имеет низкую плотность, поэтому ее показатель преломления можно считать равным единице.

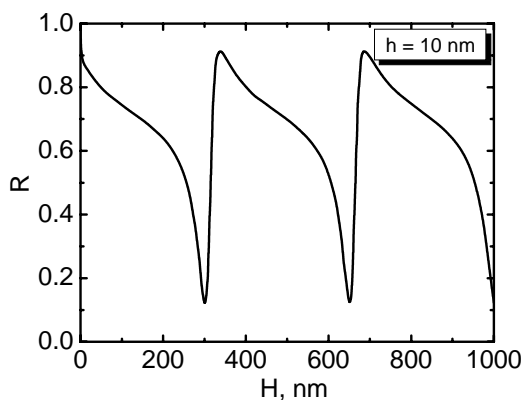
Результаты расчетов интерференции по формулам Френеля с учетом бесконечного числа отражений показаны на рис.5–8. Расчет выполнен для алюминия и длины волны зондирующего излучения  $\lambda=700$  нм. Считается, что на дне кратера и в оболочке алюминий расплавлен. Оптические свойства жидкого алюминия взяты из справочника [19]. Из рис.5–7 видно, как меняется



**Рис.4.** Формирование колец Ньютона в результате отражения лучей от оболочки и от дна кратера. Оболочка и дно разделены промежутком  $H$ , заполненным двухфазным веществом с показателем преломления  $\tilde{n} \approx 1$



**Рис.5.** Интерференционные осцилляции относительной интенсивности отраженного света  $R(H)$  при изменении расстояния  $H$  оболочки от дна кратера



**Рис.6.** Изменение (ср. с рис.5) относительной амплитуды (4.1) и формы осцилляций при увеличении толщины оболочки

характер осцилляций с изменением толщины оболочки  $h$ . Важным параметром в расчете является отношение  $h/\delta$  толщины оболочки к толщине скин-слоя. Для жидкого алюминия на длине волны 700 нм толщина скин-слоя составляет примерно 17 нм. С изменением толщины оболочки изменяется как относительная амплитуда

$$\Delta R = \frac{R_{\max} - R_{\min}}{R_{\max} + R_{\min}}, \quad (4.1)$$



так и форма осцилляций. В (4.1) величины  $R_{\min}$  и  $R_{\max}$  обозначают минимальную и максимальную амплитуды относительной интенсивности отраженного света (см. рис.5).

Зависимость относительной амплитуды (4.1) от толщины оболочки показана на рис.8. Относительная амплитуда  $\Delta R(h)$  обращается в нуль в случае тонких и толстых оболочек. В случае тонких оболочек,  $h/\delta \rightarrow 0$ , в сумме  $R=R_1+R_2$  уменьшается вклад  $R_1$  от оболочки, а в случае толстых оболочек,  $h/\delta \rightarrow \infty$ , мал вклад  $R_2$  от дна кратера, поскольку в этом случае оболочка плохо пропускает свет.

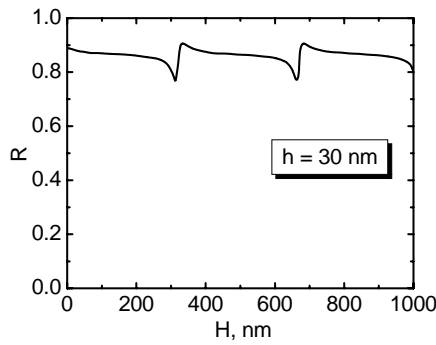


Рис.7. Амплитуда и форма осцилляций при толщине оболочки  $h=30$  нм

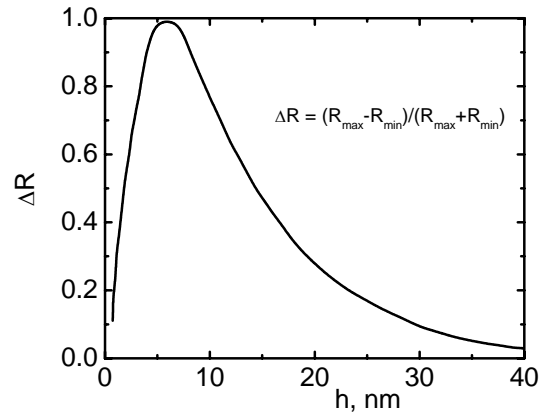


Рис.8. Зависимость относительной амплитуды осцилляций  $\Delta R$  (4.1) от толщины оболочки  $h$

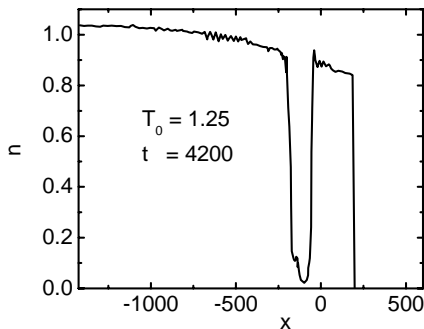


Рис.9. Распределение плотности при малом превышении МД порога абляции. Имеется толстая оболочка справа. Промежуток между оболочкой и кратером практически пуст (провал в распределении плотности)

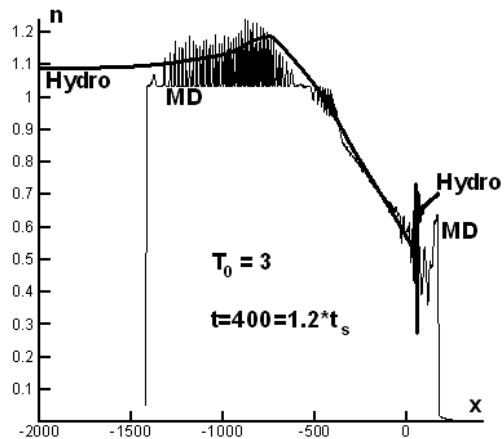


Рис.10. Сравнение газодинамического («Hydro») и МД (MD) расчетов при промежуточном значении  $T_0$  ( $T_0^{abl} < T_0 < T_0^{ev}$ ). Толщина МД оболочки меньше, чем в околопороговом случае (ср. с рис.9)

### 5. Моделирование гидродинамической стадии разлета

Гидродинамическая стадия разлета неоднородно нагретого слоя исследуется в данной работе методами газодинамического и молекулярно-динамического (МД) моделирования. Поскольку предыдущие МД – расчеты разлета [7, 8] были выполнены для леннард – джонсовского (6–12) потенциала межатомного взаимодействия и нас интересует, прежде всего, качественная картина разлета, в описываемых расчетах был использован тот же самый потенциал. Он имеет вид  $U(r)=4\epsilon[(\sigma/r)^{12}-(\sigma/r)^6]$ . Молекулярно-динамической единицей (МДЕ) температуры является  $\epsilon$ , а единицей длины –  $\sigma$ . Опишем кратко постановку задачи. Моделируется расширение по оси

$x$  поверхностного слоя кристалла с экспоненциальным либо гауссовским начальным профилем температуры. По направлениям  $y$  и  $z$ , перпендикулярным к направлению расширения, в МД расчете налагаются периодические граничные условия. На «холодной» левой границе слоя помещен ланжевеновский термостат, моделирующий невозмущенный кристалл. На этой границе поддерживается постоянная температура  $T_\infty=0.25$  МДЕ. В момент времени  $t=\tau_H$  атомы упакованы со средней плотностью  $n_0=1.06$  МДЕ в гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку, соответствующую состоянию равновесия  $p=0$  при  $T=0$ . Плоскость  $x=0$  соответствует начальной границе кристалла. Разлет происходит вдоль направления  $\langle 110 \rangle$ .

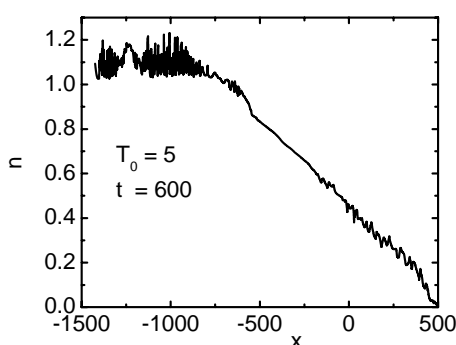


Рис.11. МД профиль плотности при превышении МД порога  $T_0^{ev}$  – оболочки нет

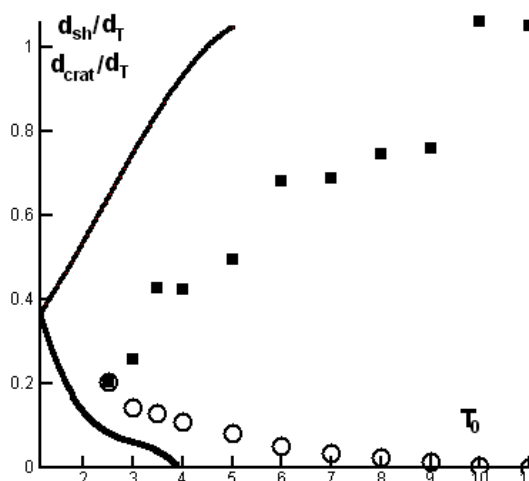


Рис.12. Сопоставление порогов и толщин в газовой (кривые) и молекулярной (маркеры) динамике. При одинаковых УРС газодинамика заметно «прочнее». Это обусловлено разницей в кинетике разрушения

МД моделирование состоит в решении уравнений движения атомов и расчете макроскопических характеристик системы. Для интегрирования уравнений движения, как и в более ранних наших работах [7, 8, 20, 21], был использован метод Штермера восьмого порядка, обеспечивающий высокую точность на больших интервалах времени. Моделирование производилось на РС кластере с использованием динамической декомпозиции расчетной области по методу MPD<sup>3</sup> (Material Particle Dynamical Domain Decomposition), описанному в [22]. Благодаря применению этого нового многопроцессорного алгоритма (в кластер входят до тысячи процессоров) параллельных вычислений удалось провести расчеты с очень большим числом атомов (от 8 до 35 миллионов). В физике взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с конденсированными средами такие вычисления являются рекордными. По числу частиц они на два-три порядка превосходят результаты других авторов, использующих однопроцессорные МД коды.

С помощью столь представительного ансамбля атомов удалось достичь две цели. Во-первых, промоделировать происходящее на больших глубинах и далеких временах (формирование глубокого кратера при больших температурах  $T_0$ ). При больших значениях  $T_0$  разрушение мишени и формирование облака разлета затягивается – отношение времен  $t_{crat}/t_s$  растет вместе с  $T_0$ . Здесь  $t_{crat}$  – это момент времени, в который фрагментация мишени останавливается,  $t_s=d_T/c_s$ . В расчетах отношение  $L/d_T$  составляло величину  $\sim 3-4$ ,  $L \sim (1000-1500)a$ . Отметим, что отделение оболочки происходит за относительно короткое время порядка звукового.

Во-вторых, в наших расчетах велики поперечные размеры расчетной области (порядка  $100a \times 100a$ , где  $a$  – постоянная решетки). Это позволяет следить за реальной кинетикой распада метастабильных состояний при попадании вещества в полосу между бинодалью и спинодалью

на термодинамической плоскости. При обычных расчетах с малым числом атомов в ансамбле с поперечником порядка  $(10a)^2$  и меньше вещество заметно прочнее. Это сказывается на величине порогов в сторону их увеличения и уменьшает скорость оболочки  $u_{sh}(T_0)$ .

Каждый молекулярно-динамический (МД) расчет сопровождался несколькими газодинамическими расчетами. Выполнена серия расчетов при разных значениях начальной температуры  $T_0$  поверхности мишени: (1) до порога абляции  $T_0 < T_0^{abl}$ , (2) между порогами  $T_0^{abl} < T_0 < T_0^{ev}$  и (3) выше испарительного порога  $T_0 > T_0^{ev}$ . Распределение плотности  $n(x,t)$  в разлетающемся веществе на фиксированный момент времени для трех характерных случаев представлено на рис.9–11. На рис.9, соответствующем небольшому превышению над порогом абляции, отчетливо видна оболочка, после отрыва которой образуется кратер конечной глубины. С повышением начальной температуры оболочка становится тоньше, а скорость ее увеличивается (рис.10). При  $T_0=3$  толщина МД оболочки составляет менее 30 МДЕ. При  $T_0=5$  в МД расчете оболочка отсутствует (рис.11), и течение напоминает обычную волну разрежения. С исчезновением оболочки исчезает и интерференционная структура (п.4).

При газодинамическом моделировании использован лагранжев код из монографии [23]. Термодинамические свойства вещества с потенциалом Леннарда-Джонса в расчетах с этим кодом описаны комбинированным уравнением состояния (УРС). В нем твердая фаза аппроксимирована по модели Дебая, а жидкая – по УРС Ри [24]. УРС твердой и жидкой фаз плавно «склеены» в области плавления, ширина которой выбрана соответственно со справочным значением теплового расширения при плавлении. УРС в МД и газодинамических расчетах согласуются с большой точностью (разница порядка процента возникает из-за обрезания потенциала Леннарда-Джонса в МД вычислениях).

Сравнение газодинамических и МД расчетов, стартующих от идентичных начальных данных (экспоненциальный профиль), показано на рис.10 и рис.12. На рис.10 жирная кривая – газодинамика, тонкая – МД расчет. Оболочка располагается на правом краю. Она отделена от остальной части облака разлета зоной резкого снижения плотности. МД оболочка тоньше, чем газодинамическая (см. также рис.12). На рис.12 суммированы данные по порогам  $T_0^{abl}$ ,  $T_0^{ev}$  и по толщинам  $d_{sh}$ ,  $d_{crat}$  (последние нормированы на  $d_T$ ). МД расчет – верхняя (кратер) и нижняя (оболочка) сплошные кривые,  $T_0^{abl}=1.14$ ,  $T_0^{ev}=3.8$ . Газодинамика – маркеры в виде квадратиков (кратер) и кружков (оболочка),  $T_0^{abl}=2.4$ ,  $T_0^{ev}=10$ . Отметим, что значение  $T_0=11$  соответствует адиабате, проходящей через критическую точку.

Газодинамические пороги выше, оболочка толще, а кратер глубже при одинаковых температурах  $T_0$ . Причем разница значительна. Это связано с разницей в кинетике фрагментации (УРС в МД и газодинамических расчетах практически одинаковы).

## 6. Заключение

Описанная выше качественная картина взаимодействия ультракороткого лазерного импульса с веществом объясняет основные особенности процесса и хорошо согласуется с экспериментом в отношении существования абляционного порога и кратера с резким краем (опубликованных экспериментальных данных по предложенному в работе испарительному порогу пока не имеется). Объяснен механизм формирования интерференционных колец Ньютона, связанный с особенностями расширения в вакуум быстро нагретого конденсированного вещества. Форма оболочки и соответственно структура ньютоновских колец качественно отличается в зависимости от того, превышен испарительный порог или нет (рис.2, 3).

Авторы благодарны Б.С. Лукьянчуку за ценные дискуссии.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *D. von der Linde, K. Sokolowski-Tinten.* The physical mechanisms of short-pulse laser ablation // *Appl. Surf. Sci.*, 2000, v.154-155, p.1-10.
2. *K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, A. Cavalleri, D. von der Linde, A. Oparin, J. Meyer-ter-Vehn, S.I. Anisimov.* Transient states of matter during short pulse laser ablation // *Phys. Rev. Lett.*, 1998, v.81, p.224-227.
3. *K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, A. Cavalleri, D. von der Linde.* Observation of a transient insulating phase of metals and semiconductors during short-pulse laser ablation // *Appl. Surf. Sci.*, 1998, v.127-129, p.755-760.
4. *B.C. Stuart, M.D. Feit, S. Herman, A.M. Rubenchik, B.W. Shore, M.D. Perry.* Optical ablation by high-power short-pulse lasers // *J. Opt. Soc. Am.*, 1996, v.B13, p.459-468.
5. *S.I. Anisimov, B. Rethfeld.* On the theory of ultrashort laser pulse interaction with a metal // *Proc. SPIE*, 1997, v.3093, p.192-203.
6. *Н.А. Иногамов, А.М. Опарин, Ю.В. Петров, Н.В. Шапошников, С.И. Анисимов, Д. фон дер Линде, Ю. Мейер-тер-Фен.* Разлет вещества, нагретого ультракоротким лазерным импульсом // *Письма в ЖЭТФ*, 1999, т.69(4), с.284-289.
7. *С.И. Анисимов, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, К. Нишихара, А.М. Опарин, Ю.В. Петров.* Разрушение тонкой пленки под действием ультракороткого лазерного импульса // *Письма в ЖЭТФ*, 2003, т.77(11), с.731-736.
8. *В.В. Жаховский, К. Нишихара, С.И. Анисимов, Н.А. Иногамов.* Молекулярно-динамическое моделирование волн разрежения в средах с фазовыми переходами // *Письма в ЖЭТФ*, 2000, т.71(4), с.241-248.
9. *V.V. Temnov, K. Sokolowski-Tinten, P. Zhou, D. von der Linde* // *Appl. Phys. A*, 2004 (to be published)
10. *M. Hashida, A.F. Semerok, O. Gobert, G. Petite, Y. Izawa, J.F. Wagner.* Ablation threshold dependence on pulse duration for copper // *Appl. Surf. Sci.*, 2002, v.197-198, p.862-867.
11. *M.I. Zeifman, B.J. Garrison, L.V. Zhigilei.* Combined molecular dynamics – direct simulation Monte Carlo computational study of laser ablation plume evolution // *Journ. Appl. Phys.*, 2002, v.92, p.2181-2193.
12. *P. Lorazo, L.J. Lewis, M. Meunier.* Short-Pulse Laser Ablation of Solids: From Phase Explosion to Fragmentation // *Phys. Rev. Lett.*, 2003, v.91, 225502.
13. *A.V. Lugovskoy, I. Bray.* Ultrafast electron dynamics in metals under laser irradiation // *Phys. Rev. B*, 1999, v.60, p.3279-3288.
14. *B. Rethfeld, A. Kaiser, M. Vicanek, G. Simon.* Ultrafast dynamics of nonequilibrium electrons in metals under femtosecond laser irradiation // *Phys. Rev. B*, 2002, v.65, 214303.
15. *Yu.V. Petrov.* Energy exchange between the lattice and electrons in a metal under femtosecond laser irradiation // *Laser and Particle Beams*, 2005, v.23, №3, (to be published).
16. *Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд.* Молекулярная теория газов и жидкостей.- М.: ИЛ, 1961, гл. 5.
17. *М.И. Каганов, И.М. Лифшиц, Л.В. Танатаров.* Релаксация между электронами и решеткой // *ЖЭТФ*, 1956, т.31(2), с.232-237.
18. *С.И. Анисимов, Б.Л. Капелиович, Т.Л. Перельман.* Эмиссия электронов с поверхности металла при воздействии ультракоротких лазерных импульсов // *ЖЭТФ*, 1974, т.66, с.776-781.
19. *Свойства элементов / Справочник под ред. М.Е. Дрица.* - М.: Металлургия, 1985.
20. *V.V. Zhakhovskii, S.V. Zybin, K. Nishihara, S.I. Anisimov.* Shock Wave Structure in Lennard-Jones Crystal via Molecular Dynamics // *Phys. Rev. Lett.*, 1999, v.83(6-9), p.1175-1178.
21. *В.В. Жаховский, С.И. Анисимов.* Численное моделирование испарения жидкости методом молекулярной динамики // *ЖЭТФ*, 1997, т.111(4), с.1328-1346.
22. *V. Zhakhovskii, K. Nishihara, Y Fukuda, S. Shimojo.* A New Dynamical Domain Decomposition Method for Parallel Molecular Dynamics Simulation on Grid. - Annual Progress Report 2003, Institute of Laser Engineering, Osaka University (2004), p.147 (arXiv: cs.DC/0405086).
23. *А.А. Самарский, Ю.П. Попов.* Разностные схемы газовой динамики.- М.: Наука, 1975.
24. *F.H. Ree.* Analytic representation of thermodynamic data for the Lennard-Jones fluid // *J.Chem.Phys.*, 1980, v.73(10), p.5401-5403.