

ЭВОЛЮЦИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ МЕДИ ПРИ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ НАНОСЕКУНДНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ

И. В. Неласов^{a}, С. С. Манохин^a, Ю. Р. Колобов^a, В. В. Жаховский^b, Е. А. Перов^c,
Ю. В. Петров^d, Ю. В. Хомич^e, Т. В. Малинский^e, Н. А. Иногамов^{d,c,b}, В. Е. Рогалин^{e**}*

^a *Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

^b *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Н. Л. Духова
127030, Москва, Россия*

^c *Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

^d *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

^e *Институт электрофизики и электроэнергетики Российской академии наук
191181, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 20 марта 2025 г.,
после переработки 7 апреля 2025 г.
Принята к публикации 7 апреля 2025 г.

Исследованы механизмы формирования поверхностного рельефа на объемных образцах меди при воздействии лазерных импульсов (длительность 10 нс, длина волны 355 нм) в доабляционном режиме. Экспериментально установлено, что в процессе облучения при плотностях энергии 0.60–1.05 Дж/см² на поверхности образцов в локальных областях вблизи границ зерен формируется характерная система выступов/впадин, высота/глубина которых достигает 500 нм. Методами оптической профилометрии, конфокальной сканирующей лазерной микроскопии и просвечивающей электронной микроскопии установлена деформационная природа формирующегося рельефа. При этом в тонком приповерхностном слое вблизи границ зерен обнаруживаются следы развития пластической деформации: наноразмерные двойниковые пластины, дислокации и малоугловые дислокационные границы. Молекулярно-динамическое моделирование показало, что основной физической причиной развития рассматриваемого рельефа является анизотропия теплового расширения различно ориентированных зерен (кристаллитов) при циклическом нагреве до предплавильных температур. Установлено, что термомеханические напряжения, возникающие в приповерхностном слое, превышают предел текучести материала, что приводит к необратимой пластической деформации. Показано накопление структурных изменений с ростом как плотности энергии, так и числа импульсов. Полученные результаты важны для понимания механизмов деградации структуры металлов при циклическом импульсном термомеханическом нагружении и могут быть использованы, в частности, для разработки методов повышения эксплуатационной стойкости металлооптики.

DOI: 10.31857/S0044451025060033

1. ВВЕДЕНИЕ

Лазерные технологии, зародившиеся чуть более 60 лет назад, постоянно совершенствуются все эти годы. В связи с активным развитием производства твердотельных лазерных систем, создаваемых благодаря достижениям в производстве высококачественных источников лазерной накачки и керами-

* E-mail: nelasov@icp.ac.ru

** E-mail: v-rogalin@mail.ru

ческих активных элементов [1], появились экономически эффективные лазерные комплексы, излучающие мощные наносекундные импульсы с частотой повторения до 50 кГц. Эти комплексы нашли широкую нишу технологических применений как в области традиционного использования лазеров, таких как резка, пайка и сварка материалов [2, 3], так и в сравнительно новых технологиях лазерного наноструктурирования материалов [4], лазерного ударно-волнового упрочнения [5] и многих других. В обширном обзоре [6] подробно изложены современные данные о технологиях микрообработки металлов с помощью наносекундных лазерных комплексов. Как правило, эти технологии основаны на абляционных процессах [7, 8], происходящих на поверхности обрабатываемого материала при заметном превышении температур плавления и кипения.

Эти замечательные процессы затмили те сравнительно малозаметные явления, которые происходят в твердом теле при предпороговых нагрузках, когда материал остается в твердом состоянии, но температура его тонкого поверхностного слоя достигает предплавления уровня. В этом случае, реализуемом в нашей работе, процессы нагрева и последующего охлаждения происходят за десятки наносекунд. В поверхностном слое происходят значительные термомеханические процессы, приводящие к различным изменениям дефектов кристаллической структуры. На эти явления впервые обратил внимание Мирзоев (см. например, [9]). Они были рассмотрены в его теоретических исследованиях, но систематических экспериментальных работ до недавнего времени не было, хотя и появлялись отдельные разрозненные публикации, например [8, 10–14], но они не получили должного теоретического объяснения.

Физико-химические свойства меди и ее сплавов изучены очень подробно. Достаточно упомянуть, что медь обладает великолепными техническими характеристиками, в частности, является основным электротехническим материалом благодаря высоким значениям тепло- и электропроводности. Это делает ее очень удобным модельным материалом при исследовании новых физических процессов. Однако недавно было обнаружено интересное поведение меди и ее сплавов [15–19] при воздействии наносекундных лазерных УФ-импульсов. Оно названо авторами оптикопластическим эффектом по аналогии с во многом схожими, хорошо известными электропластическим [20, 21], магнитоластическим [21, 22] и акустоластическим [23] эффектами.

Оптикопластический эффект наблюдается при воздействии на поверхность металла сравнительно мощного лазерного импульса ($\sim 10^8$ Вт/см²), интенсивность которого, однако, существенно меньше порога оптического пробоя воздуха ($\sim 10^{10-11}$ Вт/см²) [24] и проявляется в развитии в приповерхностном слое металла высокотемпературной пластической деформации.

Принципиальным результатом в этом случае является значительное изменение структуры поверхностного слоя при сохранении материалом твердого состояния. Устойчивость приповерхностного слоя меди к доабляционным лазерным воздействиям имеет высокую актуальность, в том числе и в связи с активным применением цельнометаллических зеркал из меди в мощных газовых CO₂- и СО-лазерах [25].

Эксплуатационный режим зеркал в мощных импульсных газовых ИК-лазерах характеризуется экстремальными нагрузками, приближающимися к порогу оптического пробоя, но не превышающими его. Однако длительное воздействие высокоинтенсивного излучения на металлические зеркала частотно-импульсных лазеров приводит к возникновению пластической деформации поверхности. Это явление, известное как оптическая усталость (в технической литературе иногда именуемое «эффектом апельсиновой корки»), существенно снижает качество отражаемого излучения. Для поддержания оптимальных характеристик лазерной системы необходимо регулярно проводить восстановление качества отражающих поверхностей зеркал путем полировки. Данная процедура представляет собой технологически сложный и экономически затратный процесс, что обуславливает актуальность исследований, направленных на понимание механизмов возникновения оптической усталости и разработку методов ее предотвращения или минимизации.

Поскольку в рабочем режиме газовых ИК-лазеров основная доля излучения отражается (коэффициент отражения меди $\sim 98.5\%$) и поглощается лишь малая доля излучения, для интенсификации процесса было принято решение провести исследование оптической усталости медных зеркал, используя УФ-лазер в режиме оптикопластического эффекта. Как известно, с уменьшением длины волны отражение большинства металлов заметно снижается. На длине волны 355 нм использованные в опытах образцы имеют коэффициент отражения $25 \pm 5\%$.

Режим оптикопластического эффекта проявляется следующим образом: в зоне воздействия ла-

зерного излучения было зарегистрировано появление неравномерного поднятия поверхности. Основная причина этого явления — значительная термически стимулированная активность зерен (кристаллитов) поликристалла. Последующие лазерные импульсы приводили к усилению деформации поверхности, что выражалось в увеличении высоты и площади поднятых участков, а также в появлении следов движения границ зерен и кристаллографического скольжения внутри них. С ростом числа импульсов излучения наблюдалось явное накопление результатов воздействия. В поверхностном слое в этом случае резко возрастает концентрация структурных дефектов. Предполагается, что такой дефектный слой заметно изменит оптические свойства материала. В данной работе продолжены исследования поведения экспериментальных образцов меди [15–19] к воздействию интенсивного лазерного излучения наносекундного диапазона.

В дальнейших исследованиях планируется сравнить влияние двух различных эффектов на свойства медных лазерных зеркал: ранее обнаруженного режима лазерного наноструктурирования поверхностей [4] и оптикопластического эффекта. Важно отметить, что оптикопластический эффект кардинально отличается от хорошо известного явления оптического пробоя на поверхности материала [4]. Сравнительный анализ этих эффектов позволит лучше понять их потенциальное применение для улучшения характеристик лазерных зеркал [8].

Исследования в области лазерной модификации поверхности металлов и сплавов продемонстрировали значительный потенциал для улучшения их эксплуатационных характеристик. В частности, обработка технически чистого титана наносекундными лазерными импульсами привела к существенным изменениям микроструктуры и механических свойств приповерхностных слоев. Было зафиксировано повышение твердости, износостойкости и устойчивости к циклическим нагрузкам [26], что имеет особую актуальность в контексте циклических напряжений, возникающих в приповерхностных слоях зеркал. При воздействии фемтосекундных лазерных импульсов на титан был обнаружен эффект «холодного плавления», обусловленный уникальными фазовыми переходами под действием высоких сдвиговых напряжений [27–29]. Более того, была зафиксирована возможность фазового перехода α – ω в титане в условиях нагружения, имитирующего ударно-волновое лазерное воздействие [30]. Отличительной особенностью вышеупомянутых исследований является сочетание экспериментальных ме-

тодов и компьютерного моделирования, что обеспечило комплексное понимание процессов, происходящих при лазерной модификации поверхности, на уровне детализации, не достижимом при использовании исключительно экспериментальных подходов. Настоящая работа продолжает цикл исследований, в которых сочетание высокоразрешающих методов оптической и электронной микроскопии с теоретическим анализом и компьютерным моделированием демонстрирует синергетический эффект, позволяя достичь более глубокого понимания физических процессов, происходящих при лазерной обработке материалов.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1. Методика лазерной обработки

Данное исследование является прямым продолжением цикла экспериментов, посвященных изучению оптикопластического эффекта. В качестве материала для исследований была выбрана бескислородная медь (ГЦК) с чистотой 99.999%. Для проведения углубленных материаловедческих исследований были подготовлены образцы меди диаметром 40 мм и толщиной 10 мм, полностью идентичные исследованным в работах [15–19]. Поверхность образцов была отполирована по оптической технологии. Для финишной обработки применялась химико-механическая технология [31,32]. До воздействия шероховатость поверхности образца на участке, сравнимом с площадью лазерного пятна, составляла приблизительно 15–20 нм.

Методика и режимы лазерного воздействия также полностью соответствовали разработанным в работах [15–19] условиям. Для данного исследования лазерная обработка образцов меди проводилась с помощью частотно-импульсной наносекундной лазерной системы Nd:YAG (355 нм, 10 нс) при частоте повторения импульсов 10 Гц. Плоскополяризованное лазерное УФ-излучение фокусировалось с помощью линзы из кварца на полированную поверхность медного образца. На поверхности образца была получена серия пятен, различающихся плотностью энергии (диапазон от 0.6 до 2.9 Дж/см²) и количеством воздействующих импульсов (от 1 до 15) с интервалом между импульсами 0.1 с.

Первичное исследование поверхности образца до и после лазерного воздействия проводилось с помощью многолучевого оптического профилометра Zygo NewView 7300. Этот прибор позволяет регистрировать отклонение формы поверхности от гори-

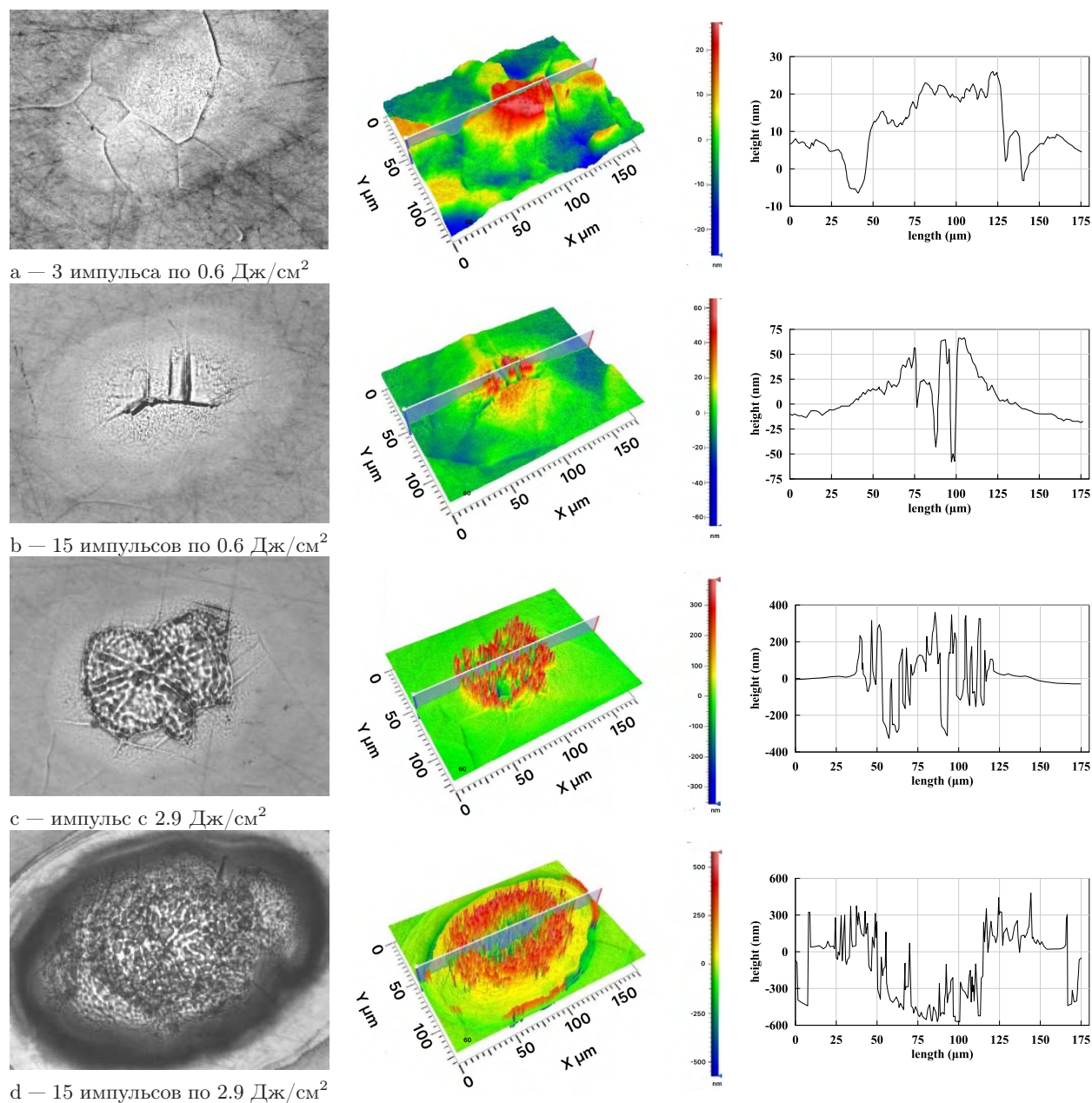


Рис. 1. Профилограммы лазерных пятен на поверхности медного образца после воздействия импульсов наносекундного УФ-лазера при изменении плотности энергии и количества импульсов. В левой колонке приведены микрофотографии пятен, в средней колонке — 3D-профилограммы (размеры кадра: $X=176$ мкм, $Y=132$ мкм), а в правой колонке — 2D-профилограммы в плоскости, показанной на 3D-профилограмме. Наблюдается рост перепада высот в рельефе при увеличении плотности энергии и количества воздействующих импульсов

зонти с точностью 1 Å. Точность измерения координат в плоскости мишени ограничена оптическим дифракционным пределом порядка 1 мкм. Также в данной работе использовался конфокальный сканирующий лазерный микроскоп «Optelics Hybrid LaserTec».

В статье [15] показано, что при использованной в работе частоте повторения импульсов каждый по-

следующий импульс воздействует на поверхность металла, полностью остывшую после предыдущего импульса. В ходе эксперимента наблюдалось постепенное преобразование лазерного пятна в зависимости от плотности энергии и числа воздействующих идентичных импульсов. На начальных этапах воздействия наблюдался оптикопластический эффект, ранее исследованный в работах [15–19]. С

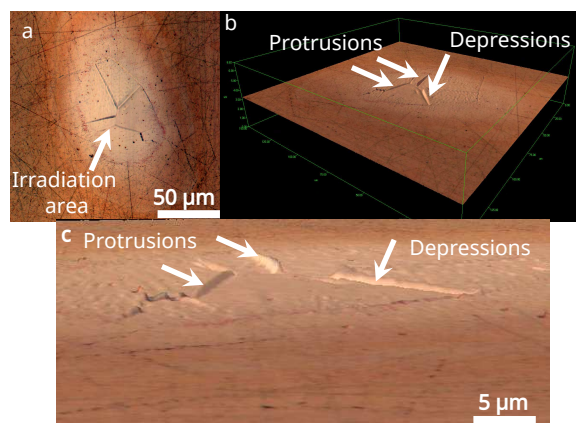


Рис. 2. Типичное изображение лазерного пятна с выступами и впадинами на границах зерен (плотность энергии 0.6 Дж/см^2 : *a* — вид сверху после 3-х импульсов; *b, c* — вид сбоку (3D) после 15-и импульсов облучения. Конфокальная сканирующая лазерная микроскопия

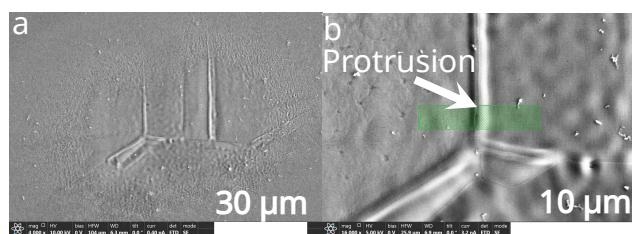


Рис. 3. *a* — Общий вид лазерного пятна, сформированного лазерным импульсом наносекундной длительности на поверхности меди (плотность энергии 0.6 Дж/см^2 , после 15-и импульсов облучения); *b* — увеличенное изображение области изготовления тонкой фольги, прямоугольником отмечена область изготовления фольги вблизи тройного стыка границ зерен. Растровая электронная микроскопия

увеличением плотности энергии и количества воздействующих импульсов пятно постепенно приобретало классическую форму лазерного кратера. На рис. 1 приведены полученные профилограммы некоторых лазерных пятен на поверхности образца. Показана эволюция возникших поверхностных изменений после воздействия импульсов наносекундного УФ-лазера при изменении плотности энергии с 0.6 до 2.9 Дж/см^2 . Наглядно видны накопительные процессы при увеличении плотности энергии и количества воздействующих импульсов. В левой колонке приведены микрофотографии полученных пятен, в следующей колонке — 3D-профилограммы, а в правой колонке — 2D-профилограммы.

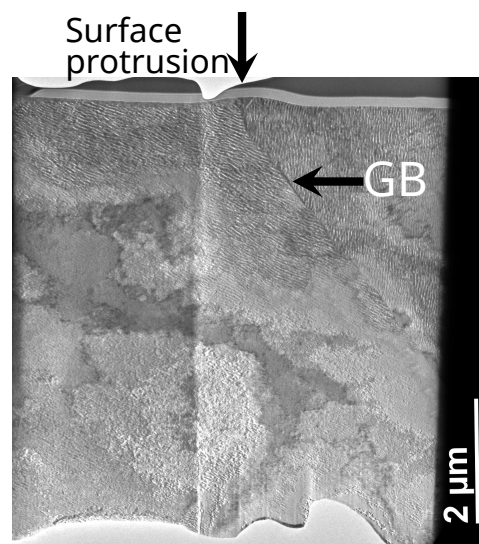


Рис. 4. Общий вид тонкой фольги, вырезанной из лазерного пятна, показанного на рис. 3 (на границе с выступом, после 15-и импульсов с плотностью энергии 0.6 Дж/см^2). GB указывает границу между соседними зернами. Просвечивающая сканирующая электронная микроскопия

2.2. Получение ламели для просвечивающей электронной микроскопии

После проведения структурных исследований лазерных пятен на медной поверхности было выбрано пятно (рис. 1 *b*) для дальнейшего изучения микроструктуры приповерхностного слоя в тонких фольгах на просвечивающем электронном микроскопе (ТЕМ) Теспаі Osiris при ускоряющем напряжении 200 кВ . Подготовка вырезаемой перпендикулярно к поверхности образца тонкой фольги (ламели) для ТЕМ осуществлялась методом ионного утонения сфокусированным ионным пучком в колонне растрового электронно-ионного микроскопа FEI Scios (ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника»). Данный метод подготовки ламелей подробно описан в [33].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

В результате проведенного экспериментального исследования, согласно данным конфокальной сканирующей лазерной микроскопии, было установлено, что при многократном воздействии лазерными импульсами на поверхности образца образуются впадины и выступы на границах зерен исходной зеренной структуры исследуемого образца (рис. 2). Эти изменения наблюдаются при плотности энер-

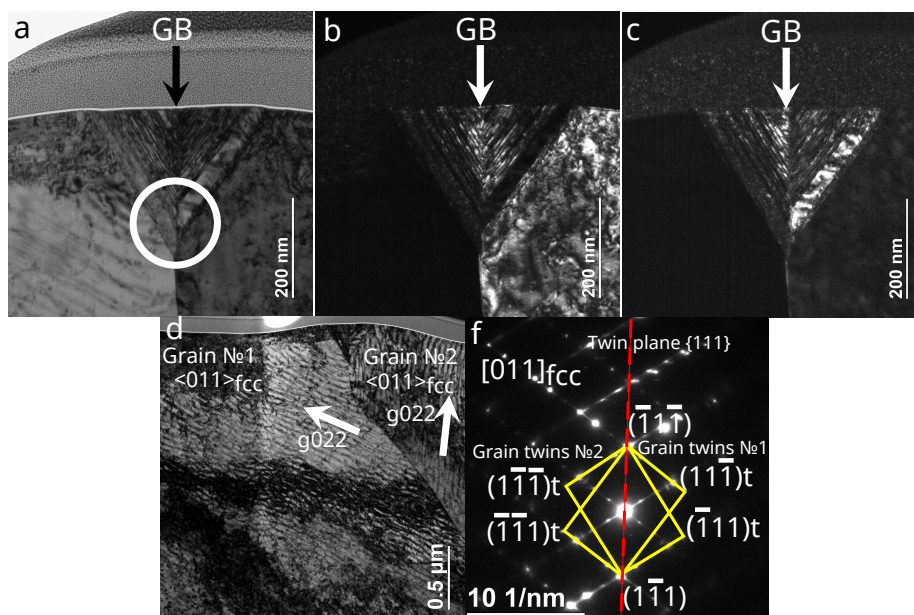


Рис. 5. Микроструктура образца в области с «выступом»: *a* — светлое поле; *b, c* — темное поле в рефлексах матрицы и двойниковых пластин; *d* — дислокационная структура образца в области с «выступом». Ориентация зерен в оси зоны $[011]$ ГЦК; *f* — микродифракционная картина, полученная методом просвечивающей электронной микроскопии из выбранной области на границе раздела зерен (см. белый кружок на рис. 5 *a*). Картина включает рефлексы как от зерна матрицы, так и от двойниковых кристаллов (пластин). Толщина пластин несколько нанометров. GB — граница зерна

гии в диапазоне от 0.60 до 1.05 Дж/см² в зависимости от количества лазерных импульсов (10–30 импульсов). Высота образовавшихся выступов и глубина впадин могут достигать 500 нм. Для дальнейшего изучения микроструктурных изменений была выбрана область, соответствующая выступу на границе двух зерен (рис. 3).

Общий вид изготовленной сфокусированным ионным пучком фольги приведен на рис. 4. Этот участок образца ранее был показан на профилограмме рис. 1 *b*. В центре образца наблюдается выступ на поверхности и граница между зёрнами.

По данным просвечивающей электронной микроскопии в области выступа наблюдаются многочисленные пакеты наноразмерных пластин двойников деформации (указаны кружком на рис. 5 *a*). По данным этих изображений, полученных в темнопольном контрасте, толщина таких пластин порядка нескольких нанометров, а длина от 5 до 250 нм. Пластинки ориентированы под углом 45° к поверхности и наблюдаются в каждом из смежных зерен. Они расположены практически симметрично относительно границы зерен (рис. 5 *a–f*). На полученной микродифракционной картине (рис. 5 *f*) можно наблюдать два набора взаимных решеток с зеркальной симметрией. Рефлексы типа $\{111\}t$ соответствуют двойни-

ковым ориентировкам, их симметричное расположение относительно основных рефлексов типа $\{111\}$ матрицы (выделено желтыми линиями) характерно для двойниковой структуры в ГЦК-решетке. Плоскость двойникового (111) отмечена красной штриховой линией.

На рис. 5 *d* представлена дислокационная структура образца меди в области формирования выступа после лазерного воздействия, полученная методом просвечивающей электронной микроскопии. Оба зерна имеют кристаллографическую ориентацию $\langle 011 \rangle$ ГЦК-решетки. Контраст от дислокационных структур получен с использованием вектора действующего отражения $g022$, что обеспечивает видимость большинства полных дислокаций с векторами Бюргерса типа $a/2\langle 110 \rangle$, характерных для систем скольжения $111\langle 110 \rangle$ в ГЦК-решетке меди. Наблюдаемые дислокационные линии формируют стенки с упорядоченным эквидистантным расположением дислокаций, симметрично расположенные относительно границы зерен, что является типичным для развития процессов пластической деформации в ГЦК-металлах при повышенных температурах. Такая конфигурация дислокационных структур свидетельствует об активной роли дислокационного механизма в релаксации внутренних напряже-

ний, возникающих при импульсном лазерном воздействии в доплавленном режиме.

4. АНИЗОТРОПИЯ НАПРЯЖЕНИЙ В МОНОКРИСТАЛЛЕ ПРИ НАГРЕВЕ

Проведем расчет деформаций и напряжений в кубическом монокристалле при его нагреве на 1000 К с использованием линейной теории упругости. Пусть с этим кристаллом связана система координат с осями x, y, z , направленными по ребрам куба. Вместе с декартовой системой координат x, y, z можно также ввести сферическую систему координат, связанную с кристаллом. Произвольное направление в сферической системе координат определяется полярным θ (отсчитывается от оси z) и азимутальным ϕ углами. Единичный вектор вдоль этого произвольного направления суть $\mathbf{n}_3 = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$.

Теперь определим плоский слой, который произвольным образом вырезан из монокристалла. Эта произвольная ориентация слоя относительно кристалла полностью задается вектором $\mathbf{n}_3$, который считаем нормалью к плоскости слоя.

Связь (взаимная ориентация) между плоским слоем и кристаллом, как видим, задается углами θ и ϕ . Рассмотрим ось, которая задается единичным вектором $\mathbf{n}_2 = (\sin \phi, -\cos \phi, 0)$ Вектор $\mathbf{n}_2$ перпендикулярен плоскости, образованной осью z и вектором $\mathbf{n}_3$. Чтобы убедиться в этом, достаточно вычислить скалярное произведение векторов $\mathbf{n}_2$ и $\mathbf{n}_3$. С осью z вектор $\mathbf{n}_2$ образует прямой угол по определению декартовой системы координат x, y, z . Вращение на угол θ вокруг оси $\mathbf{n}_2$ связывает декартовы системы координат кристалла и слоя. Действительно, при этом ось z кристалла совмещается с осью $\mathbf{n}_3$.

Мы вычисляем свободное относительное удлинение вдоль направления $\mathbf{n}_3$ при нагревании кристалла при условии, что в перпендикулярной к этому направлению плоскости смещений нет. Кроме вектора $\mathbf{n}_2$ в этой плоскости введем еще вектор $\mathbf{n}_1 = (-\cos \theta \cos \phi, -\cos \theta \sin \phi, \sin \theta)$, так что $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3$ образуют ортонормированную тройку векторов. Любой единичный вектор в плоскости векторов $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$ может быть охарактеризован углом α и имеет вид

$$\mathbf{l}(\alpha) = (-\cos \theta \cos \phi \cos \alpha + \sin \phi \sin \alpha - \cos \theta \sin \phi \cos \alpha - \cos \phi \sin \alpha, \sin \theta \cos \alpha). \quad (1)$$

Введя тензор деформации u_{ik} в координатах x, y, z ($i, k = x, y, z$), можем написать относительное

удлинение по направлению $\mathbf{l}(\alpha)$ в плоскости векторов $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$ как $\xi(\alpha) = u_{ik}l_i(\alpha)l_k(\alpha)$ (здесь и далее по повторяющимся индексам проводится суммирование). Условие равенства нулю таких удлинений при произвольных углах α дает три уравнения для компонент тензора деформации u_{ik} :

$$u_{xx} \sin^2 \phi - u_{xy} \sin 2\phi + u_{yy} \cos^2 \phi = 0, \quad (2)$$

$$u_{xx} \cos^2 \theta \cos^2 \phi + u_{xy} \cos^2 \theta \sin 2\phi - u_{xz} \sin 2\theta \cos \phi + u_{yy} \cos^2 \theta \sin^2 \phi - u_{yz} \sin 2\theta \sin \phi + u_{zz} \sin^2 \theta = 0, \quad (3)$$

$$u_{xx} \cos \theta \sin 2\phi - 2u_{xy} \cos \theta \cos 2\phi - 2u_{xz} \sin \theta \sin \phi - u_{yy} \cos \theta \sin^2 \phi + 2u_{yz} \sin \theta \cos \phi = 0. \quad (4)$$

Теперь учтем условие свободного расширения кристалла в направлении $\mathbf{n}_3$ при изменении его температуры на ΔT . Учитывая, что кристаллы кубической симметрии ведут себя в отношении теплового расширения подобно изотропным твердым телам и могут быть охарактеризованы просто коэффициентом объемного расширения β , условие отсутствия напряжения в направлении $\mathbf{n}_3$ может быть записано в виде

$$(-p_T \delta_{ik} + \sigma_{ik})n_{3,k} = 0,$$

где $p_T = B\beta\Delta T$ с модулем всестороннего сжатия B , а σ_{ik} — тензор напряжений.

Введя компоненты тензора модулей упругости кубического кристалла меди $c_1 = C_{xxxx} = C_{11} = 168$ ГПа, $c_2 = C_{xyxy} = C_{12} = 121$ ГПа, $c_3 = C_{xyxy} = C_{44} = 75$ ГПа, компоненты тензора напряжений в области применимости закона Гука можно представить как

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= c_1 u_{xx} + c_2 (u_{yy} + u_{zz}), \\ \sigma_{yy} &= c_1 u_{yy} + c_2 (u_{xx} + u_{zz}), \\ \sigma_{zz} &= c_1 u_{zz} + c_2 (u_{xx} + u_{yy}), \\ \sigma_{ik} &= 2c_3 u_{ik}, \quad i \neq k. \end{aligned}$$

Тогда условие отсутствия напряжения в направлении $\mathbf{n}_3$ дает еще три уравнения:

$$(-p_T + c_1 u_{xx} + c_2 (u_{yy} + u_{zz})) \sin \theta \cos \phi + 2c_3 u_{xy} \sin \theta \sin \phi + 2c_3 u_{xz} \cos \theta = 0, \quad (5)$$

$$(-p_T + c_1 u_{yy} + c_2 (u_{xx} + u_{zz})) \sin \theta \sin \phi + 2c_3 u_{xy} \sin \theta \cos \phi + 2c_3 u_{yz} \cos \theta = 0, \quad (6)$$

$$(-p_T + c_1 u_{zz} + c_2 (u_{xx} + u_{yy})) \cos \theta + 2c_3 u_{xz} \sin \theta \cos \phi + 2c_3 u_{yz} \sin \theta \sin \phi = 0. \quad (7)$$

Решая систему уравнений (2)–(7), находим шесть компонент тензора деформации u_{xx} , u_{yy} , u_{zz} , u_{xy} , u_{xz} , u_{yz} . Для удобства введем величины

$$\begin{aligned} c_0 &= c_1 - c_2 - 2c_3, \\ u_1 &= c_1 - c_2 + c_3(\operatorname{tg}^2 \theta - 1), \\ u_2 &= 2c_0 \sin^2 \theta \sin^2 \phi \cos^2 \phi + c_3, \\ A_1 &= \frac{u_1 u_2 (c_2 + c_3) \sin^2 \theta}{[c_0 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + c_3][c_0 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + c_3]} + \\ &\quad + c_1 + c_3 \operatorname{tg}^2 \theta, \\ A_2 &= \cos^2 \theta + \{u_1 u_2 \sin^4 \theta + \sin^2 \theta [c_0(2(c_1 - c_2 - c_3) - \\ &\quad - c_0 \sin^2 \theta) \sin^2 \theta \sin^2 \phi \cos^2 \phi + c_3(c_1 - c_2)]\} \times \\ &\quad \times \{[c_0 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + c_3][c_0 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + c_3]\}^{-1}. \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} u_{zz} &= p_T / A_1, \\ u_{xx} &= u_{zz} \frac{u_1 \sin^2 \theta \cos^2 \phi}{c_0 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + c_3}, \\ u_{yy} &= u_{zz} \frac{u_1 \sin^2 \theta \sin^2 \phi}{c_0 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + c_3}, \\ u_{xy} &= \frac{1}{2} u_{zz} \frac{u_1 \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi [c_0 \sin^2 \theta + 2c_3]}{[c_0 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + c_3][c_0 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + c_3]}, \\ u_{xz} &= \frac{1}{2} u_{zz} \operatorname{tg} \theta \cos \phi \frac{c_1 - c_2 - c_0 \sin^2 \theta \sin^2 \phi}{c_0 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + c_3}, \\ u_{yz} &= \frac{1}{2} u_{zz} \operatorname{tg} \theta \sin \phi \frac{c_1 - c_2 - c_0 \sin^2 \theta \cos^2 \phi}{c_0 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + c_3}. \end{aligned}$$

Относительное смещение по направлению $\mathbf{n}_3$ можно тогда представить в виде

$$\begin{aligned} \xi_{\mathbf{n}_3}(\theta, \phi) &= u_{ik} n_{3,i} n_{3,k} = u_{xx} \sin^2 \theta \cos^2 \phi + \\ &\quad + u_{xy} \sin^2 \theta \sin 2\phi + u_{xz} \sin 2\theta \cos \phi + u_{yz} \sin 2\theta \sin \phi + \\ &\quad + u_{yy} \sin^2 \theta \sin^2 \phi + u_{zz} \cos^2 \theta = p_T A_2 / A_1. \end{aligned}$$

Относительное смещение $\xi_{\mathbf{n}_3}(\theta, \phi)$ для медного образца с модулем всестороннего сжатия $B = (c_1 + 2c_2)/3 = 137$ ГПа и объемным коэффициентом теплового расширения $\beta = 5.1 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ показано на рис. 6 а в трехмерном изображении. На рис. 7 а представлены линии уровня этой функции.

Эквивалентное напряжение σ_e определяется по Мизесу через второй инвариант девиатора тензора напряжений J_2 как $\sigma_e = \sqrt{3J_2}$, где

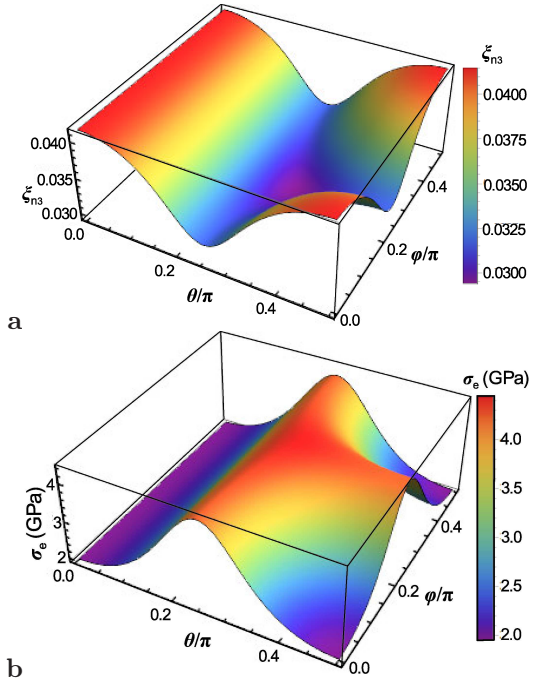


Рис. 6. а — Относительное смещение слоя меди, нагретого на $\Delta T = 1000$ К, в направлении нормали к слою по оси $\mathbf{n}_3(\theta, \phi)$. б — Соответствующее эквивалентное напряжение $\sigma_e(\theta, \phi)$ в гигапаскалях

$$\begin{aligned} J_2(\theta, \phi) &= \\ &= \frac{1}{6} [(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2] + \\ &\quad + (\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2) = (c_1 - c_2)^2 \times \\ &\quad \times \frac{1}{6} [(u_{xx} - u_{yy})^2 + (u_{xx} - u_{zz})^2 + (u_{yy} - u_{zz})^2] + \\ &\quad + 4c_3^2(u_{xy}^2 + u_{xz}^2 + u_{yz}^2). \end{aligned}$$

Зависимость эквивалентного напряжения σ_e от углов θ и ϕ , максимально возможного при заданном нагреве на 1000 К, показана на рис. 6 б и 7 б.

Следует отметить, что для всех ориентаций кристалла $\mathbf{n}_3$ это напряжение превосходит статический предел текучести меди $\sigma_e > Y$, не превышающий $Y \approx 0.5$ ГПа, то есть пластические деформации должны возникнуть при нагреве слоя меди на 1000 К. Проведенный анализ напряжений в рамках линейной теории упругости также применим и при меньших нагревах. Так как диапазон рассчитанных σ_e примерно в 4 раза больше предела текучести, то следует ожидать появления пластических деформаций уже при нагреве на 250 К (т.е. до $T \approx 650$ К). Однако при быстром нагреве лазерным импульсом длительностью 1–10 нс эксперимен-

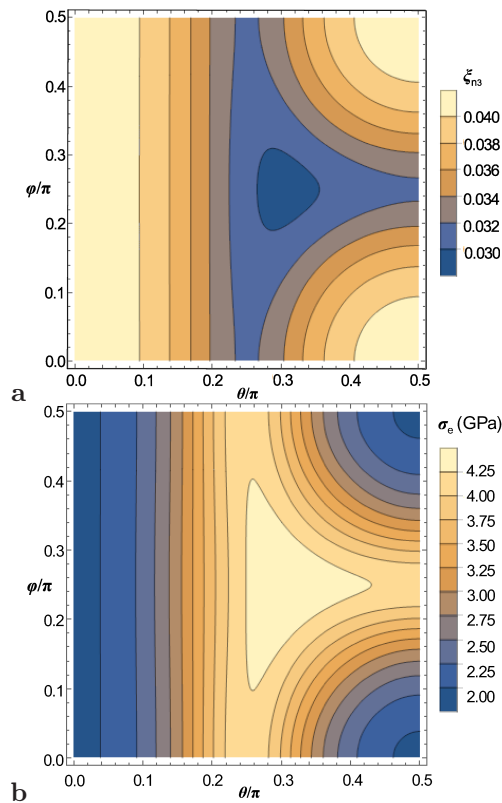


Рис. 7. *a* — Линии уровня относительного смещения слоя меди по направлению нормали $\mathbf{n}_z(\theta, \phi)$ при нагреве на $\Delta T = 1000$ К. *b* — Эквивалентное напряжение $\sigma_e(\theta, \phi)$ в гигапаскалях после нагрева слоя меди на $\Delta T = 1000$ К

тальный темп деформации оценивается величиной 10^{6-7} с^{-1} , при которой динамический предел текучести становится значительно больше статического предела текучести [34, 35] при темпах, превышающих 10^5 с^{-1} . Поэтому температурный порог для начала пластических процессов будет в действительности выше $Y \approx 0.5$ ГПа. Также известно [36], что предел текучести монотонно увеличивается в металлах при повышении температуры при темпах деформации, превышающих 10^4 с^{-1} .

Следует отметить, что аналитический расчет поликристалла, состоящего всего из двух типов зерен разной ориентации, достаточно сложен. Поэтому для более реалистичной проверки возможности пластических процессов в поликристаллах при высоких темпах деформации было принято решение провести молекулярно-динамическое моделирование. Этот метод позволил учесть атомистические особенности деформации различных зерен поликристалла меди при быстром нагреве и высоких скоростях деформации, что невозможно в рамках континуальных моделей.

5. АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ

На основании результатов экспериментальных исследований было установлено, что величина формирующегося рельефа на поверхности меди, характеризуемого параметром R_z , увеличивается с ростом количества импульсов. Предполагается, что развитие рельефа обусловлено термоциклированием тонкого приповерхностного слоя меди под воздействием лазерного импульса в диапазоне температур от комнатной до примерно $0.9T_m$. При этом медь, окружающая фокальное пятно, и медь, подстилающая слой прогрева толщиной примерно 2 мкм, остаются при комнатной температуре.

Для проверки данной гипотезы были проведены два молекулярно-динамических (МД) моделирования образцов меди, сильно различающихся в размерах. Для первого МД-моделирования был создан малый образец меди, воспроизводящий двойниковую границу, наблюдавшуюся нами экспериментально при исследованиях методом просвечивающей электронной микроскопии. При этом была использована элементарная ячейка кристалла меди, содержащая ось z , ориентированную вдоль направления $[11\bar{1}]$, ось y вдоль направления $[2\bar{1}1]$ и ось x вдоль направления $[011]$. Из этих ячеек строился модельный образец из двух зерен (бикристалл) размером $64 \times 6.6 \times 26 \text{ нм}^3$, в котором центры формируемых зерен находились в точках $0.5 \times 0.5 \times 0.25$ и $0.5 \times 0.5 \times 0.75$ (в единицах размера образца). В моделируемом медном образце два кристаллита поворачивались вокруг оси y на -32° и 32° соответственно. В этом МД-моделировании межатомные взаимодействия описывались с использованием метода погруженного атома (ЕАМ) с потенциалом, предложенным Мишиным и соавторами [37]. Конструирование модельных бикристаллов осуществлялось посредством программного обеспечения AtomsK [38]. МД-моделирование осуществлялось с использованием пакета LAMMPS [25]. Последующий анализ и визуализация полученных атомных структур выполнялись с использованием программного комплекса OVITO [40].

На следующем этапе проводилась релаксация положений атомов к минимуму энергии и отжиг при температуре 300 К в течение 1 нс с молекулярно-динамическим шагом 2 фс при фиксации размеров образца вдоль направлений x и y и свободных граничных условиях вдоль положительных направлений z и фиксации отрицательного направления z

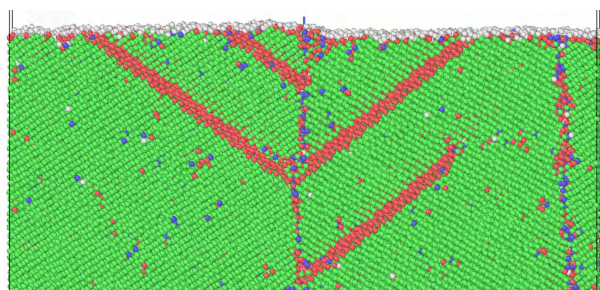


Рис. 8. Приповерхностный слой малого образца меди, состоящего из двух зерен. Зеленым цветом обозначены атомы, имеющие локальное окружение, как в ГЦК-структуре, красным — как в ГПУ-структуре (что соответствует атомам, принадлежащим деформационным двойникам), белым — атомы на поверхности образца

потенциальной стенкой. Затем термическое воздействие неплавящего лазерного импульса моделировалось с использованием термостата Ноуз–Хувера с целевой температурой 1200 К в течение 1.4 нс.

При этом обнаружено формирование деформационных двойников вблизи границ зерна (рис. 8), подобных наблюдаемым на ТЕМ-снимке на рис. 5, с одновременным формированием перепада высот порядка 1 нм свободной поверхности образца.

Дополнительные циклы термоциклирования, имитирующее нагревание при воздействии лазерных импульсов до $T = 1200$ К и охлаждение до $T = 300$ К между импульсами, не привели к дальнейшему развитию рельефа. Это может быть обусловлено малостью моделируемых кристаллитов, а также несопоставимостью времен, доступных для моделирования, с экспериментальными временами со значительно более продолжительным (на 7 порядков) интервалом между импульсами, в течение которого возникающие после охлаждения остаточные напряжения могут быть сняты из-за поперечной разгрузки образца конечного размера и медленных процессов релаксации кристаллической структуры.

Для крупномасштабного МД-моделирования был создан увеличенный образец меди с размерами $L_z = 100.1$ нм по оси z , $L_y = 40.7$ нм по оси y и $L_x = 46$ нм по оси x . Граничные условия по оси x и y — периодические, по оси z — свободные. Поликристалл меди состоял из 16 продольных вдоль оси z зерен с шестигранной ячеистой структурой в сечении xy (рис. 9). Количество атомов в модельной системе составляло 15771035, а среднее количество атомов на одно зерно примерно один миллион. Ориентация кристаллических осей в зернах относительно осей расчетной области

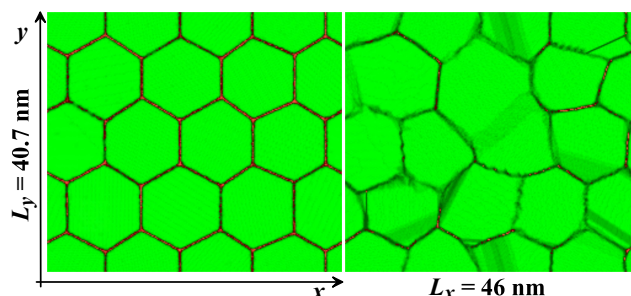


Рис. 9. Сечение большого поликристаллического образца меди в плоскости xy . Сечение ограничено координатами от -2 до 2 нм вдоль оси z (это середина образца по оси z). По боковым границам образца наложены периодические граничные условия. Слева представлено сечение в исходном состоянии. Справа показано это сечение после отжига нагревом до $T = 1200$ К в течение 1 нс с последующим охлаждением до $T = 300$ К. Параметр центральной симметрии атомов в кристаллических зернах без дефектов упаковки представлен зеленым цветом; черные полосы соответствуют границам между зернами, в которых сильно нарушен решеточный порядок

задавалась случайными поворотами, что дает также случайные взаимные ориентации соседних зерен. Для этого моделирования была разработана обновленная версия потенциала Жаховского [41] для лучшего согласия с экспериментальной температурой плавления и поверхностным натяжением (энергией). Использовался метод подгонки по зависимостям напряжений от деформаций по главным осям холодной кристаллической решетки [42, 43]. В отличие от потенциала Мишина [37], новый потенциал оптимизирован для воспроизведения свойств меди при высоких температурах и давлениях, возникающих в результате облучения коротким лазерным импульсом.

Полученный таким образом идеальный поликристаллический образец отжигался термостатом Ланжевена при $T = 1200$ К в течение 1 нс с последующим охлаждением до $T = 300$ К для релаксации неравновесной начальной атомной конфигурации, что привело к возникновению дислокаций и перемещению межзеренных границ. Хотя остаточное сдвиговое напряжение в центре холодного образца составило около 1 ГПа, однако движения дислокаций и межзеренных границ не наблюдалось в конце охлаждения в течение примерно 0.2 нс. В процессе отжига на начальной почти идеальной свободной поверхности образца сформировался перепад высот примерно 1 нм. Финальная зеренная структура показана в сечении центральной области образца на рис. 9 справа. После описанной подготовки

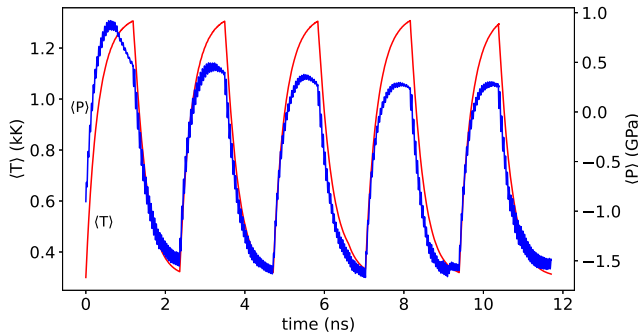


Рис. 10. Эволюция температуры $\langle T \rangle$ и давления $\langle P \rangle$, усредненных по образцу в процессе МД-моделирования термоциклирования, которое использует термостат Ланжевена только для поперечных компонент скоростей всех атомов v_x и v_y . При этом тепловое расширение по оси z происходит свободно, а продольное напряжение $\langle P_{zz} \rangle \approx 0$

образец подвергался термоциклированию в условиях, подобных импульсному лазерному нагреву с полным охлаждением до комнатной температуры между импульсами. За нулевое время моделирования принимается начало термопластического эффекта при импульсном термоциклировании, а время, потраченное на подготовку образца в первичном отжиге, не учитывается.

Всего было смоделировано 5 импульсов, то есть образец 5 раз однородно нагревался до целевой температуры $T \approx 1300$ К в течение примерно 1.2 нс и соответственно 5 раз остывал до температуры $T \approx 300$ К. На рис. 10 демонстрируется изменение температуры в процессе термоциклирования, а также можно видеть как менялось среднее давление

$$\langle P \rangle = \frac{1}{3L_z} \int (P_{xx} + P_{yy} + P_{zz}) dz$$

во всем образце. Из-за свободных граничных условий по z среднее напряжение $\langle P_{zz} \rangle \approx 0$, а периодические граничные условия по x и y позволяли соответствующим напряжениям следовать за температурой. Таким образом, если поликристаллический образец считать изотропным твердым телом с $\langle P_{xx} \rangle = \langle P_{yy} \rangle$, то среднее по образцу сдвиговое напряжение

$$\langle \tau \rangle = \frac{1}{2} [\langle P_{xx} \rangle - \langle P_{zz} \rangle] \approx \frac{3}{4} \langle P \rangle$$

изменялось значительно, что вызывало пластическую перестройку кристаллитов и создание перепада высот поверхности.

Расположение межзеренных границ, в которых упаковка атомов гораздо менее упорядочена, чем в кристаллической решетке, легко наблюдать по

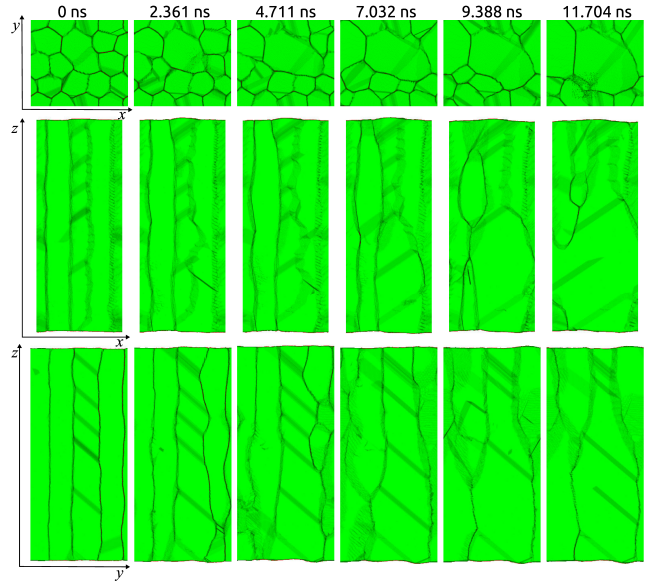


Рис. 11. Эволюция параметра центральной симметрии большого образца меди при термоциклировании. Карты кристаллической структуры показаны для холодного образца после 5-и циклов нагрева-охлаждения от $T \approx 1300$ К до $T \approx 300$ К. Видно, что изначальная сетчатая структура сильно разрушается к концу моделирования

значительному уменьшению параметра центральной симметрии атомов (см. рис. 11). Движение этих границ становится достаточно быстрым (чтобы наблюдать в МД-моделировании) при приближении к температуре плавления. Наблюдаемая перестройка геометрии зерен приводит как к увеличению размеров некоторых зерен, так и к уменьшению и даже полному исчезновению других зерен. В нашем моделировании из исходных одинаковых 16-и зерен осталось только 3 больших и 7 малых зерен после 5-и импульсов нагрева. При охлаждении межзеренные границы постепенно становятся неподвижными. Их положение показано на рис. 11 после достижения минимальной (комнатной) температуры (прямо перед началом нового цикла нагрева). После остывания движение межзеренных границ и дислокаций в зернах не детектируется при наблюдении в течение примерно 100 пс, при том что остаточные сдвиговые напряжения в центре образца превышают 1 ГПа.

Оказалось, что 5 импульсов для данной конфигурации поликристалла достаточно для того, чтобы перепад высот вышел на некоторый уровень насыщения, при котором дальнейшее увеличение перепада стало невозможным. Однако в экспериментах накопление эффекта наблюдалось даже после 30 импульсов. Рост высот и углубление низин обнаруживается не по всему кристаллу, а лишь в некото-

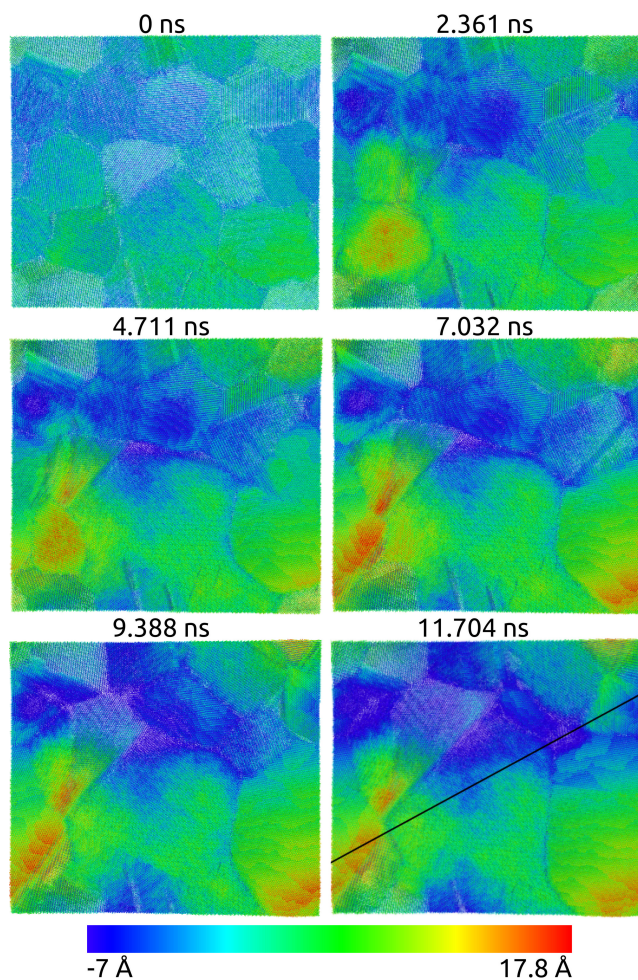


Рис. 12. Накопление перепада высот по координате z на свободной поверхности образца. Карта высот при $t = 0$ получена в образце после первичного отжига (до термоциклирования). Последующие карты снимались с полностью остывших образцов после 5-и импульсов нагрева. На последней карте показана линия, вдоль которой строился рельеф поверхности на рис. 13

рых его областях. На рис. 12 показано, какую форму приобретала поверхность после каждого остывания. Видно, что в одних местах зерно растет вверх, в других, наоборот, опускается вниз. Растут и опускаются одни и те же области на поверхности кристалла.

Перепад высот лучше виден на рис. 13, для которого находились вертикальные сечения приповерхностного слоя образца вдоль прямой линии, соединяющей положение области с минимальной высотой с положением максимальной высоты.

На рис. 14 демонстрируется динамика накопления перепада высот в образце с начальной шероховатостью вследствие первичного отжига. Небольшая начальная шероховатость $R_z \simeq 15$ нм так же присутствует и у экспериментального образца.

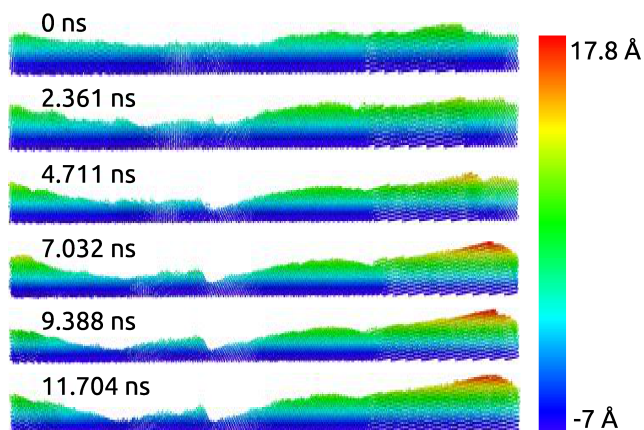


Рис. 13. Рельеф свободной поверхности в сечении образца по прямой линии, связывающей положение минимальной высоты с положением максимальной высоты. Для последнего рельефа эта линия показана на рис. 12. Высоты по вертикальной оси z иллюстрируются цветовой шкалой по отношению к начальной высоте образца. Высота представлена в очень увеличенном масштабе по сравнению с длиной сечения

Поверхностный слой поликристаллического образца меди в пятне лазерного воздействия подвергается воздействию сдвиговых напряжений, возникающих из-за теплового одноосного расширения или сокращения материала вследствие нагрева или остывания. Если это напряжение превышает предел текучести, который зависит от ориентации зерен и плотности накопленных в них дислокаций, то начинаются пластические деформации в таком кристаллите. Причем сдвиговое напряжение сбрасывается и в окружающих зернах из-за распространения сдвиговой волны от пластически деформируемого зерна. Именно различие в пластическом отклике в соседних зернах приводит к накоплению перепада высот поверхности.

В моделировании образец деформируется в направлении оси z , так как в других направлениях изменение линейных размеров образца невозможно из-за периодических граничных условий, что имитирует практически одноосное тепловое расширение в разогретом широком лазерном пятне, толщина которого много меньше его радиуса. На рис. 15 построены графики эквивалентного сдвигового напряжения, определенного как $\tau = \sigma_e/2 = \sqrt{3}\bar{\sigma}_2/2$, после завершения нагрева (красные точки) и остывания (синие точки) в каждом цикле термоциклирования образца. На рис. 16 изображены графики соответствующих напряжений, действующих вдоль осей для тех же состояний для всех 5-и циклов. В качестве точек для построения выбиралось среднее зна-

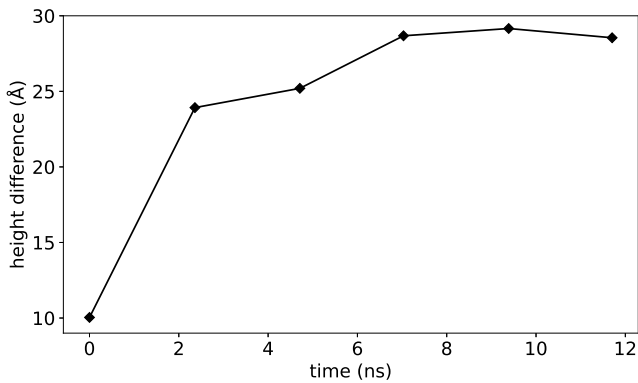


Рис. 14. Накопление перепада высот, измеренных после охлаждения образца. Начальный перепад образовался в результате подготовки образца к термоциклированию. Накопление прекратилось после 3-его импульса

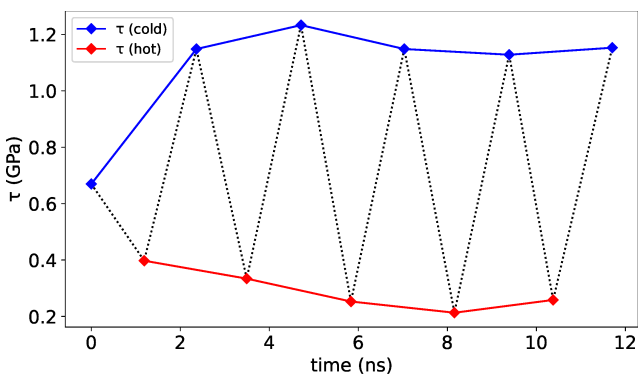


Рис. 15. Эквивалентное сдвиговое напряжение τ , усредненное в центральной области образца, ограниченной координатами от -10 до 10 нм вдоль оси z , сразу после нагрева (красная линия) и после охлаждения (синяя линия). Последовательность процессов нагрева и охлаждения иллюстрируется пунктирной линией

чение рассматриваемой величины, взятой из центра образца. Значение усреднялось во внутренней области образца от -10 до 10 нм (вдали от свободных границ). Напряжение вдоль оси деформации держится вблизи $p_{zz} \approx 0$ как для горячего состояния (штриховая красная линия), так и для холодного состояния (сплошная красная линия), а вот поперечные остаточные напряжения в холодном образце значительно больше по абсолютной величине, чем в горячем образце. Вследствие этого наблюдаемые остаточные сдвиговые напряжения (рис. 15) больше в 3–4 раза в холодном образце, чем в горячем.

Величина перепада высот, как и величины напряжений, после определенного цикла нагревания выходят на постоянный уровень. Это означает, что со временем зерна образца пере-

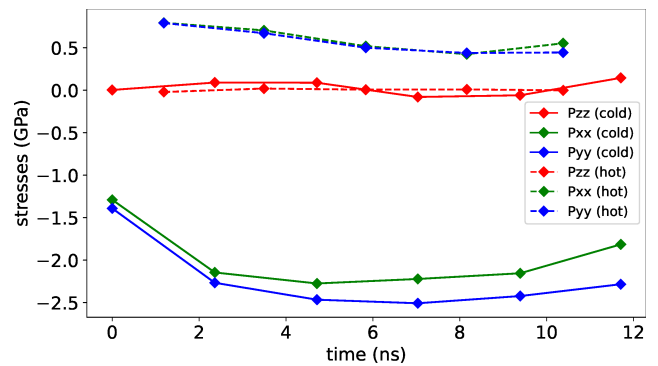


Рис. 16. Изменения компонентов тензора напряжений в центральной области образца, ограниченной координатами от -10 до 10 нм вдоль оси z , после нагрева (штриховые линии) и после охлаждения (сплошные линии). Напряжения вдоль оси z остаются в районе нулевых значений из-за свободных граничных условий вдоль этой оси. Периодические граничные условия по осям x и y позволяют соответствующим напряжениям отличаться от нуля

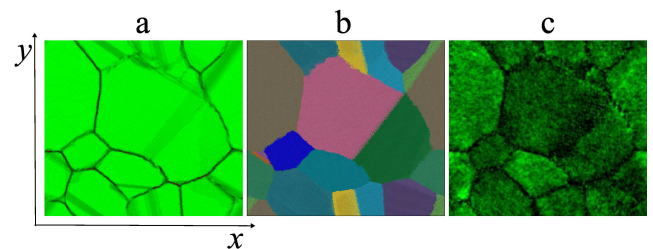


Рис. 17. Центральное поперечное сечение холодного образца на 9.388 нс (после 4 импульса и охлаждения): *a* — параметр центральной симметрии; *b* — раскраска зерен с различной ориентацией; *c* — распределение остаточного эквивалентного сдвигового напряжения, где минимальное $\tau = 0.1$ ГПа в темно-зеленых зернах, а максимальное сдвиговое напряжение $\tau = 0.5$ ГПа в светло-зеленых.

стают реагировать пластически на воздействие сдвиговых напряжений. В нашем моделировании поликристалл перестает реагировать после 3-х циклов термоциклирования. Сдвиговых напряжений, которые возникают при последующих циклах термоциклирования, оказывается недостаточно для пластических деформаций, заметных в течение примерно 1 нс. Однако положение межзеренных границ продолжает медленно меняться в горячем состоянии образца, когда амплитуда сдвиговых напряжений достигает $\tau \approx 0.2\text{--}0.3$ ГПа, как видно на рис. 15.

Распределение остаточных напряжений относительно расположения зерен в холодном образце продемонстрировано на рис. 17. Темно-зеленый цвет соответствует $\tau \approx 0.1$ ГПа — такое значение имеют

межзеренные границы и большая часть мест прохождения дислокаций (толстые светло-серые полосы на рис. 17 *a*). Ориентация зерен относительно друг друга представлена на рис. 17 *b*, где цвет каждого зерна зависит от угла ориентации кристаллической решетки атомов в зерне. Эта ориентация может слегка меняться при возникновении дислокаций. Светло-зеленый цвет на рис. 17 *c* соответствует значению $\tau \simeq 0.5$ ГПа. Такую величину сдвиговых напряжений имеет большая часть зерен, поэтому при последующих циклах термоциклирования максимальной амплитуды напряжений в горячем состоянии оказывается недостаточной для явных пластических деформаций. Также, возможно, произошло упрочнение материала из-за увеличения плотности дислокаций, и предел текучести вырос в соответствующих пластически деформированных зернах.

6. ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотренный в данной работе режим воздействия сфокусированного частотно-импульсного излучения наносекундного УФ-лазера на полированную поверхность опытных образцов бескислородной меди характерен тем, что в течение импульса 10 нс происходит нагрев поверхностного слоя толщиной около 2 мкм до предплавильной температуры. Последующее остывание до комнатной температуры происходит естественным путем за десятки наносекунд. Поскольку частота следования импульсов 10 Гц, последующий импульс воздействует на полностью остывшую поверхность.

Был проведен углубленный анализ поверхности образцов меди после такого воздействия с помощью конфокальной сканирующей лазерной микроскопии и сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии. Полученные экспериментальные данные подкреплены результатами тщательного молекулярно-динамического моделирования с использованием двух потенциалов межатомного взаимодействия. Подтверждены ранее полученные данные об оптикопластическом эффекте. Сформирована расширенная интерпретация этого процесса.

В экспериментах нагрев и последующее остывание происходят в тонком приповерхностном слое толщиной 2 мкм в пятне размером примерно 180 мкм — в этой области наблюдается релаксация возникших, вследствие термического расширения, внутренних напряжений. Молекулярно-динамическое моделирование показало, что сначала происходит активное образование и движение

дислокаций. Обнаружена значительная концентрация возникших двойниковых образований. Далее происходит интенсивное движение и других дефектов структуры металла. Наиболее наглядно это наблюдается при рассмотрении зернограницных процессов. Набухшие при нагреве монокристаллические зерна вследствие анизотропии выдвигаются на свободную поверхность с разной скоростью и в различных направлениях. Есть некоторые отличия результатов моделирования от экспериментальных результатов. В моделировании накопление ущерба и рост напряжений в материале прекращается через несколько импульсов, так как моделируемый кристалл во много раз меньше области прогрева в эксперименте, которая представляет собой приповерхностный слой толщиной 2 мкм. В моделировании рассматривался кристалл, который и представляет собой такой слой. Поэтому он грелся целиком.

При росте числа воздействующих импульсов амплитуда шероховатости поверхности растет в результате термоциклирования. Рост наблюдается в тех областях кристалла, где уже наблюдались максимумы высот при изначальной шероховатости после отжига.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально установлено, что воздействие наносекундных лазерных УФ-импульсов ($\lambda = 355$ нм, $\tau = 10$ нс) с плотностью энергии $0.60\text{--}1.05$ Дж/см² на поверхность меди приводит к формированию характерного рельефа в доабляционном режиме. Высота формирующихся выступов и глубина впадин на границах зерен достигает 500 нм при воздействии 10–30 импульсов.

Методом просвечивающей электронной микроскопии выявлено формирование в приповерхностном слое сложной дефектной структуры, характеризующейся

- образованием наноразмерных двойниковых пластин толщиной несколько нанометров и длиной 5–250 нм,
- формированием дислокационных стенок с преимущественной ориентацией дислокаций с векторами Бюргерса типа $a/2\langle 110 \rangle$, характерных для систем скольжения $\{111\}\langle 110 \rangle$ в ГЦК-решетке меди,
- симметричным расположением двойников относительно границ зерен под углом 45° к поверхности.

На основе молекулярно-динамического моделирования установлено, что

- основным механизмом развития рельефа является дислокационная релаксация напряжений, связанных с анизотропией теплового расширения различно ориентированных зерен,
- термомеханические напряжения в приповерхностном слое превышают предел текучести материала ($\sigma_e > Y \approx 0.5$ ГПа),
- наблюдается накопительный эффект пластической деформации при термоциклировании.

Показано, что при частоте следования импульсов 10 Гц каждый последующий импульс воздействует на полностью остывшую поверхность, что приводит к циклическому характеру накопления структурных изменений. Температура поверхности исследуемого образца меди при воздействии достигает $0.9T_m$, т. е. не превышает температуру плавления T_m .

Выявлен пороговый характер развития рельефа по плотности энергии и количеству импульсов. При этом рост высоты выступов и глубины впадин происходит преимущественно в областях, где наблюдались начальные неоднородности после первичного отжига. Установленные закономерности формирования рельефа и структурных изменений имеют определяющее значение для понимания механизмов деградации металлических поверхностей, подвергающихся частотно-импульсному лазерному воздействию в доабляционном режиме. В частности, полученные результаты могут быть использованы для разработки методов повышения эксплуатационной стойкости лазерных зеркал.

Финансирование. В части исследования тонкой структуры приповерхностного слоя меди методами просвечивающей электронной микроскопии и компьютерного моделирования бикристалла меди работа выполнена по теме государственного задания FFSG-2024-0018, № государственной регистрации 124020700089-3 (Ю. Р. К., И. В. Н., С. С. М.). В части математического моделирования — государственного задания ИТФ FFWR-2024-0013, № государственной регистрации 124041900014-8 (Н. А. И., Ю. В. П.). В части молекулярно-динамического моделирования терморегулирования поликристаллического образца меди — государственного задания ОИВТ № 075-00269-25-00 (Н. А. И.). В части осуществления экспериментальных работ по лазерному воздействию и профилометрии образцов работа поддержана грантом РНФ № 24-19-00727 (Т. В. М., Ю. В. Х., В. Е. Р.).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Е. Рогалин, К. М. Крымский, Радиотехн. и электрон. **68**, 1236 (2023).
2. В. Я. Панченко, *Лазерные технологии обработки материалов: современные проблемы фундаментальных исследований и прикладных разработок*, Физматлит, Москва (2009).
3. А. Г. Григорьянц, А. И. Мисюров, *Технологические процессы лазерной обработки*, МГТУ им. Н. Э. Баумана, Москва (2006).
4. В. Ю. Хомич, В. А. Шмаков, УФН **185**, 489 (2015).
5. И. А. Новиков, Ю. А. Ножницкий, С. А. Шибачев, *Авиационные двигатели* **2**, 59 (2022).
6. Kaichang Yu, Haichuan Shi, Peilei Zhang, Zhishui Yu, Hua Yan, and Qinghua Lu, J. Mater. Sci. **59**, 1819 (2024).
7. Н. А. Иногамов, Ю. В. Петров, В. А. Хохлов, В. В. Жаховский, ТВТ **58**, 689 (2020).
8. С. И. Анисимов, Я. А. Имас, Г. С. Романов, Ю. В. Ходыко, *Действие излучения большой мощности на металлы*, Наука, Москва (1970).
9. Ф. Мирзоев, ЖТФ **72**, 53 (2002).
10. С. В. Васильев, А. Ю. Иванов, В. А. Лиопо, ИФЖ **80**, 12 (2007).
11. K. Vogel and P. J. Beckland, Appl. Phys. **36**, 3697 (1965).
12. Л. Н. Лариков, В. Ф. Мазанко, В. М. Фальченко, *Физика и химия обработки материалов* **6**, 144 (1983).
13. Р. Е. Ровинский, В. Е. Рогалин, В. М. Розенберг, М. Д. Теплицкий, *Физика и химия обработки материалов* **3**, 7 (1980).
14. G. Liedl, R. Pospichal, and S. P. Murzin, Comput. Opt. **41**, 504 (2017).
15. Т. В. Малинский, С. И. Миколуцкий, В. Е. Рогалин и др., *Письма в ЖТФ* **46**, 51 (2020).
16. Yu. V. Khomich, T. V. Malinskiy, V. E. Rogalin, V. A. Yamshchikov, and I. A. Kaplunov, Acta Astronaut. **194**, 434 (2022).

17. Т. В. Малинский, В. Е. Рогалин, ЖТФ **92**, 268 (2022).
18. Т. В. Малинский, В. Е. Рогалин, В. А. Ямщиков, ФММ **123**, 192 (2022).
19. Т. В. Малинский, В. Е. Рогалин, В. Я. Шур, Д. К. Кузнецов, ФММ **124**, 653 (2023).
20. В. И. Спицын, О. А. Троицкий, *Электропластическая деформация металлов*, Наука, Москва (1985).
21. В. И. Карась, В. И. Соколенко, ФММ **188**, 1156 (2018).
22. И. М. Неклюдов, Я. Д. Стародубов, В. И. Соколенко, УФЖ **50**, 113 (2005).
23. Х. А. Тяпунина, Е. К. Наими, Г. М. Зиненкова, *Действие ультразвука на кристаллы с дефектами*, Изд-во МГУ, Москва (1999).
24. Г. В. Островская, А. Н. Зайдель, УФН **111**, 579 (1973).
25. И. А. Каплунов, В. Е. Рогалин, Изв. Сочинского гос. ун-та **2-4**, 120 (2013).
26. Ю. Р. Колобов, С. С. Манохин, В. И. Бетехтин, А. Г. Кадомцев, М. В. Нарыкова, Г. В. Одинцова, Г. В. Храмов, Письма в ЖТФ **48**, 15 (2022).
27. M. M. Budzevich, V. V. Zhakhovsky, C. T. White, and I. I. Oleynik, Phys. Rev. Lett. **109**, 125505 (2012).
28. В. А. Хохлов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др., Письма в ЖЭТФ **115**, 523 (2022).
29. V. Zhakhovsky, Y. Kolobov, S. Ashitkov et al., Phys. Fluids **35**, 096104 (2023).
30. I. V. Nelasov, A. I. Kartamyshev, A. O. Boev, A. G. Lipnitskii, Yu. R. Kolobov, and Truong Khang Nguyen, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **29**, 065007 (2021).
31. В. А. Алексеев, С. А. Батанов, И. В. Митричев, А. А. Караханов, А. И. Моксяков, Г. А. Рябикова, С. А. Филин, *Метод подготовки оптической поверхности металлических заготовок для глубокой штамповки*, Патент РФ 2042456, 27.08.1995.
32. З. И. Ашурлы, М. К. Ильин, Н. И. Конюшкина, А. Г. Отсечкин, С. А. Филин, В. И. Ямпольский, *Метод высокоскоростной абразивной обработки детали из материала*, Патент РФ 2000915, 15.10.1993.
33. Eduardo Montoya, Sara Bals, Marta D. Rossell, Dominique Schryvers, and Gustaaf Van Tendeloo, Microsc. Res. Tech. **70**, 1060 (2007).
34. R. J. Clifton, Appl. Mech. Rev. **43**(5S), S9 (1990).
35. M. A. Meyers, D. J. Benson, O. Vöhringer, B. K. Kad, Q. Xue, and H.-H. Fu, Mater. Sci. Eng. A **322**, 194 (2002).
36. E. B. Zaretsky and G. I. Kanel, J. Appl. Phys. **114**, 083511 (2013).
37. Y. Mishin, M. J. Mehl, D. A. Papaconstantopoulos, A. F. Voter, and J. D. Kress, Phys. Rev. B **63**, 224106 (2001).
38. P. Hirel, Comput. Phys. Comm. **197**, 212 (2015).
39. A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger et al., Comp. Phys. Comm. **271**, 108171 (2022).
40. A. Stukowski, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 015012 (2009).
41. R. Perriot, V. Zhakhovsky, N. Inogamov, and I. Oleynik, J. Phys.: Conf. Ser. **500**, 172008 (2014). EAM potential for Cu is available via <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.30152.02562>
42. V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, S. I. Ashitkov, and K. Nishihara, Appl. Surf. Sci. **255**, 9592 (2009).
43. D. I. Zhukhovitskii and V. V. Zhakhovsky, J. Chem. Phys. **152**, 224705 (2020).