

ЭФФЕКТЫ НЕРАВНОВЕСНОСТИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА МЕТАЛЛЫ

© 2011 г. В. И. Мажукин, доктор физ.-мат. наук; А. В. Мажукин;
М. М. Демин, канд. физ.-мат. наук; А. В. Шапранов, канд. физ.-мат. наук
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва,
E-mail: vim@modhef.ru

Рассмотрены два режима лазерной абляции металлов (Al, Cu): нано- и фемтосекундный. Математическое моделирование наносекундного воздействия позволило определить область применимости однетемпературного приближения. Длительность лазерного импульса должна быть при этом не менее 10 нс. Результаты моделирования показали качественное влияние неравновесности на основные процессы. Наиболее ярко они проявляются в режимах фемтосекундного воздействия, при котором быстрые фазовые трансформации сопровождаются появлением сильно перегретых (5000–15 000 К) метастабильных состояний и ударных волн в твердом теле, а также повышенным выносом энергии из зоны облучения электронной теплопроводностью.

Ключевые слова: математическое моделирование, лазерное воздействие, перегрев, нано- фемтосекундный режим.

Коды OCIS: 350.3390, 320.7040, 320.7120

Поступила в редакцию 18.02.2011

1. Введение

Наметившаяся в последние годы тенденция использования сверхмощных $G \sim 10^{12} - 10^{18} \text{ W/cm}^2$ и ультракоротких $\tau_L \approx 10^{-12} - 10^{-15} \text{ s}$ лазерных импульсов для обработки материалов приводит к реализации уникальных физических условий, при которых продолжительность воздействия оказывается сравнимой с характеристическими временами термализации и фазовых превращений в веществе. Это приводит к необходимости рассмотрения сложнейших фундаментальных проблем, одной из которых является описание и исследование сильно неравновесного нагрева вещества лазерным излучением [1].

Воздействие пико- и фемтосекундных лазерных импульсов большой интенсивности на твердотельные мишени является одним из способов получения частиц с уникальными характеристиками или формирования их потоков, состоящих из кластеров, жидких или твердых фрагментов мишени. Формирование потока частиц в процессе импульсной лазерной абляции наблюдается для широкого круга материалов: металлов, полупроводников, диэлектриков. Возможность использования продуктов лазер-

ной абляции в практических приложениях явилась стимулом для ряда экспериментальных и теоретических исследований, направленных на изучение условий образования и механизмов формирования частиц нано- и микро размеров при лазерном воздействии [2–8].

В то же время лазерная абляция в пико- и фемтосекундном диапазоне является наименее изученной, хотя количество публикаций в этой области неуклонно растет. До сих пор отсутствует ясная и полная картина развития и динамической смены доминирующих механизмов генерации частиц в зоне облучения.

Основные особенности ультракороткого воздействия на металлы связаны с высокой скоростью и объемным характером выделения энергии лазерного импульса. Высокая скорость нагрева конденсированной среды сопряжена с быстрыми фазовыми трансформациями вещества, которые характеризуются переносом через фазовые границы мощных потоков массы и энергии. Вынос энергии потоком вещества в совокупности с объемным механизмом выделения энергии лазерного излучения способствуют нагреву поверхностей раздела фаз до температур, значительно превышающих равновесные значения температур плавления

и испарения. В силу тех же причин вблизи облучаемых поверхностей в твердой и жидкой фазах формируются области температурных максимумов.

В данной работе моделируются два режима воздействия нано- и фемтосекундной длительности с целью определения порога однотемпературного описания лазерного нагрева и исследования метастабильных перегретых состояний в металлах.

2. Теоретическая модель

На рис. 1 изображено пространственное положение фаз, подвижных межфазных границ $\Gamma_{sl}(t)$, $\Gamma_{lv}(t)$ и ударных волн в конденсированной среде $\Gamma_{sh,s}(t)$. Постановка задачи осуществ-

лялась при следующих предположениях и ограничениях:

Механизмы объемного плавления и испарения в рассмотрение не включены. Полагается, что фронт плавления возникает на облучаемой поверхности в момент достижения температуры T_{m0} , а перегретые метастабильные состояния в течение рассмотрения ведут себя устойчиво.

Математическое описание и моделирование нано- и фемтосекундной лазерной абляции твердой алюминиевой мишени в вакууме осуществляется в рамках двухтемпературной одномерной по пространству многофронтной неравновесной гидродинамической задачи Стефана, записанной для двух фаз – твердой и жидкой.

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho_e \varepsilon_e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_e u \varepsilon_e)}{\partial x} &= - \left(P \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial W_e}{\partial x} + g(T_e)(T_e - T_{ph}) + \frac{\partial G}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial(\rho_{ph} \varepsilon_{ph})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_{ph} u \varepsilon_{ph})}{\partial x} &= - \left(P \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial W_{ph}}{\partial x} - g(T_e)(T_e - T_{ph}) \right) \\ \frac{\partial G}{\partial x} + \alpha(T_e)G &= 0, \quad \rho_e = z \frac{m}{M} \rho, \\ P &= P_e(\rho_e, T_e) + P_{ph}(\rho_{ph}, T_{ph}), \quad \varepsilon_e = C_{ve}(T_e)T_e, \quad \varepsilon_{ph} = C_{vph}(T_{ph})T_{ph} \end{aligned} \right\}_k$$

$$t > 0, \quad \Gamma_s < x < \Gamma_{sh,s}(t) \cup \Gamma_{sh,s}(t) < x < \Gamma_{sl}(t) \cup \Gamma_{sl}(t) < x < \Gamma_{lv}(t),$$

где

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

$$P(\rho, T) = P(\rho_e, T_e) + P(\rho_{ph}, T_{ph}).$$

Принятые обозначения: ρ , u , ε , T , P – плотность, газодинамическая скорость, внутренняя энергия, температура и давление вещества соответственно, $\alpha(T_e)$, $R(T_e)$ – коэффициент объемного поглощения и отражательная способ-

ность поверхности, G – плотность лазерного излучения, C_v , λ – теплоемкость и коэффициент теплопроводности, $g(T_e)$ – электрон-фононный фактор энергообмена. Индексы s , l , g – обозначают принадлежность величин соответственно к твердой и жидкой фазам и пару, e , ph – к электронному и фононному газам. Модель поверхностного плавления представляет собой гидродинамический вариант задачи Стефана [9], состоящего из трех законов сохранения и феноменологического условия равенства температур на межфазной границе

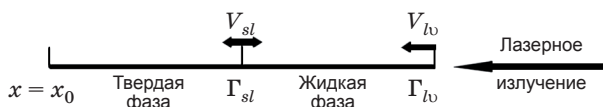


Рис. 1. Пространственная конфигурация фаз.

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

$$\rho_s(u_s - v_{sl}) = \rho_l(u_l - v_{sl}),$$

$$P_s + \rho_s(u_s - v_{sl})^2 = P_l + \rho_l(u_l - v_{sl})^2,$$

$$\left(\lambda_{ph} \frac{\partial T_{ph}}{\partial x} \right)_s - \left(\lambda_{ph} \frac{\partial T_{ph}}{\partial x} \right)_l = \rho_s L_m^{ne} v_{sl},$$

$$T_{sl} = T_{ph,s} = T_{ph,l} = T_m(P_s),$$

где

$$T_m = T_m(P_s) = T_{m,0} + kP_s,$$

$$L_m^{ne} = L_m^e + \Delta C_{psl} \Delta T_{sl} + \frac{\rho_s + \rho_l (u_s - u_l)^2}{\rho_s - \rho_l} \frac{1}{2},$$

$$\Delta C_{psl} = (C_{pl} - C_{ps}), \quad \Delta T_{sl} = (T_{sl} - T_m).$$

Поверхностное испарение описывалось в приближении Кнудсеновского слоя [10, 11]:

$$x = \Gamma_{kv}(t): \quad -\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} = \sigma T_e^4,$$

$$\left(\lambda_{ph} \frac{\partial T_{ph}}{\partial x} \right)_k - \left(\lambda_v \frac{\partial T_v}{\partial x} \right)_v = \rho_k L_v v_{kv},$$

$$\rho_k v_{kv} = \rho_v (v_{kv} - u), \quad P_k + \rho_k v_{kv}^2 = P_v + \rho_v (k v_v - u)^2,$$

$$T_v = \alpha_T(M) T_{ph,k},$$

$$P_H(T_{ph,k}) = P_b \exp \left[\frac{L_v^{ne}}{RT_b} \left(\frac{\Delta T_{ph,k}}{T_{ph,k}} \right) \right], \quad \rho_H = \frac{P_H(T_{ph,k})}{RT_{ph,k}},$$

$$L_v^{ne} = L_v^e(T_l) + C_{pv} (T_v - T_{ph,k}) + \frac{\rho_l + \rho_v (u_l - u_v)^2}{\rho_l - \rho_v} \frac{1}{2},$$

$$\rho_v = \alpha_p(M) \rho_H, \quad \Delta T_{ph,k} = T_{ph,k} - T_b,$$

$$G(t) = (1 - R(T_e)) \cdot G_0 \exp \left[- \left(\frac{t}{\tau_L} \right)^2 \right],$$

где v_{kv} , v_{sl} – скорости испарения и плавления, L_v^{ne} , L_m^{ne} – неравновесная энергия испарения и плавления, $\alpha_p(M)$, $\alpha_T(M)$ – коэффициенты Крута [10], T_m , T_b – равновесные температуры плавления и испарения, T_v , ρ_v – температура и плотность пара, ρ_H , P_H – плотность и давление насыщенного пара, σ – постоянная Стефана–Больцмана.

Для определения температурных зависимостей транспортных и оптических характеристик $\lambda_e(T_e, T_{ph})$, $\lambda_{ph}(T_{ph})$, $g(T_e)$, $\alpha(T_e)$ и $R(T_e)$ использовали подходы, изложенные в [12, 13], согласно которым в произвольном температурном диапазоне были получены следующие зависимости:

$$\begin{aligned} (\lambda_e(T_e, T_{ph}))_k &= (C_{ve}(T_e) \chi_e(T_e, T_{ph}))_k = \\ &= \left(\frac{1}{3} C_{ve}(T_e) l_e(T_e, T_{ph}) \langle v_e(T_e) \rangle \right)_k, \end{aligned}$$

где $\chi_e(T_e, T_{ph})$ – электронная температуропроводность, $l_e(T_e, T_{ph})$ – усредненная длина пробега в электронном ферми-газе,

$$l_e(T_e, T_{ph}) = \left(\frac{l_{ee}(T_e) l_{eph}(T_{ph})}{(l_{ee}(T_e) l_{eph}(T_{ph}))_k} \right),$$

l_{ee} , l_{eph} – длины свободных пробегов электронов при электрон-электронном и электрон-фононном взаимодействии [13, 14]:

$$\begin{aligned} l_{ee}(T_e) &= \frac{1}{N_e \sigma_{ee}} = \\ &= \frac{2}{\pi^2} \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3} \frac{1}{r^2} \frac{1}{z^{1/3} N_a} \cdot \frac{t^2}{\xi^2} \left[\ln(1+t) - \frac{t}{1+t} \right]^{-1}, \end{aligned}$$

где

$$t = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{4/3} z^{1/3} \frac{r_B}{r} \cdot \left[(\xi^2 + 0,16) \cdot \left(\xi^2 + \frac{4}{9} \right) \right]^{1/2}$$

σ_{ee} – сечение рассеяния с передачей энергии $\Delta \varepsilon$ для электронов с энергиями ε_1 , ε_2 , $r = (3/4/(\pi N_a))^{1/3}$ – расстояние между атомами, $r_B = \hbar^2/m_e e^2$ – боровский радиус, \hbar – постоянная Планка, k_B – постоянная Больцмана, m_e , e – масса и заряд электрона, z – количество валентных электронов, N_a , N_e – плотность атомов и электронов, M_0 , A – атомная единица массы и атомный вес.

$$(l_{eph}(T_{ph}))_k = \left(\frac{E_k \cdot r}{z N_a k_B T_{ph}} \right)_k,$$

где E – модуль Юнга, $\langle v_e(T_e) \rangle$ – средняя скорость электронов, равная

$$\begin{aligned} \langle v_e(T_e) \rangle &= \\ &= (3/2)^{1/2} (9\pi z/4)^{1/3} \hbar (\xi^2 + 0,16)^{1/4} / r m_e, \end{aligned}$$

$\xi = T_e/\varepsilon_F$, ε_F – энергия Ферми. Температурная зависимость $g(T_e)$ – электрон-фононного фактора энергообмена определяется выражением

$$\begin{aligned} g(T_e) &= \langle \Delta \varepsilon \rangle \frac{k_B N_e}{\varepsilon_F} = \left(\frac{3}{2} \right)^{1/2} \left(\frac{8}{9\pi} \right)^{1/3} \frac{8}{3} \times \\ &\times \frac{\hbar k_B}{r_B^2 M_0} \frac{z^2}{A} N_a \left[1 - \left(\frac{1}{2^4 z} \right) \right] \Phi_{eph}(\xi), \end{aligned}$$

где $\langle \Delta \varepsilon \rangle$ – средняя энергия, передаваемая при одном столкновении электрона с фононом,

$$\Phi_{eph}(\xi) = \frac{\xi \left[\ln(t_1 + 1) - \frac{t_1}{(t_1 + 1)} \right]}{(\xi^2 + 0,16)^{1/4} \left(\xi^2 + \frac{4}{9} \right)^{1/2}},$$

$$t_1 = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{4/3} \frac{z^{1/3} r_B}{2 r} \cdot \left[(\xi^2 + 0,16) \cdot \left(\xi^2 + \frac{4}{9} \right) \right]^{1/2}.$$

Температурные зависимости оптических характеристик $\alpha(T_e)$ и $R(T_e)$ взяты из работы [15]:

$$\text{Al} - \alpha(T_e) = b \cdot \exp(a_0 + a_1 T_e + a_2 T_e^2),$$

где

$$b = 1, a_0 = 13,66, a_1 = -2,69 \times 10^{-2},$$

$$a_2 = 1,665 \times 10^{-4}, R(T_e) = r_0 + r_1 T_e,$$

где

$$r_0 = 0,7845, r_1 = -4,86 \times 10^{-3};$$

$$\text{Cu} - \alpha(T_e) = b \cdot \exp(a_0 + a_1 T_e + a_2 T_e^2),$$

где

$$b = 1, a_0 = 13,2767, a_1 = 4,165 \times 10^{-2},$$

$$a_2 = 3,183 \times 10^{-4}, R(T_e) = r_0 + r_1 T_e + r_2 T_e^2,$$

где

$$r_0 = 0,7142, r_1 = -1,227 \times 10^{-2}, r_2 = 7,93 \times 10^{-5}.$$

3. Результаты моделирования

Проанализируем основные процессы, протекающие в металлических мишенях (Al, Cu) под воздействием лазерных импульсов с длиной волны $\lambda_L = 0,8$ мкм, гауссовским временным распределением энергии в импульсе, длительностью $\tau_L = 1$ нс и $\tau_L = 1$ фс, пиковой интенсивностью $G_0 = 1,15 \times 10^9$ Вт/см² и $G_0 = 5,7 \times 10^{14}$ Вт/см², соответственно.

Наносекундное воздействие. Воздействие относительно длинного лазерного импульса в силу больших значений коэффициента обмена энергией $g(T_e)$ в алюминии приводит к неярко выраженному неравновесному нагреву. Отрыв температуры электронов от температуры фононов составляет примерно 500 К, рис. 2а.

У медной мишени энергообмен между подсистемами замедлен, поскольку фактор энергообмена у меди примерно на порядок меньше, чем у алюминия. Поэтому у меди эффект неравновесного нагрева выражен более ярко и составляет ≈ 2000 К, рис. 2б. Эффекты неравновесного нагрева оказывают заметное влияние

на динамику фазовых превращений. Плавление алюминия происходит на переднем фронте лазерного импульса ($t \approx 0,8$ нс), скорость фронта достигает 420 м/с, рис. 3а, что приводит к генерации давления в твердой фазе ~ 200 бар. У меди плавление начинается вблизи максимума интенсивности ($t \approx 0,2$ нс) и скорость фронта плавления оказывается выше, ее максимальное значение равняется 550 м/с, рис. 3б, а давление в твердой фазе достигает 3 кбар. Фронт испарения из-за большой величины теплоты испарения $L_v^e(T_i) \gg L_m^e$ имеет скорость распространения на 2–3 порядка меньше скорости фронта плавления, рис. 3а, 3б. Максимальная скорость фронта испарения определяется величиной температуры поверхности. Так как поверхность Al разогрета значительно сильнее чем Cu, соответственно до 5000 и 3600 К, то максимальная скорость испарения Al (≈ 5 м/с) в 20 раз превосходит скорость испарения Cu. В алюминии относительно низкие значения скорости плавления и степени неравновесности для рассматриваемого режима

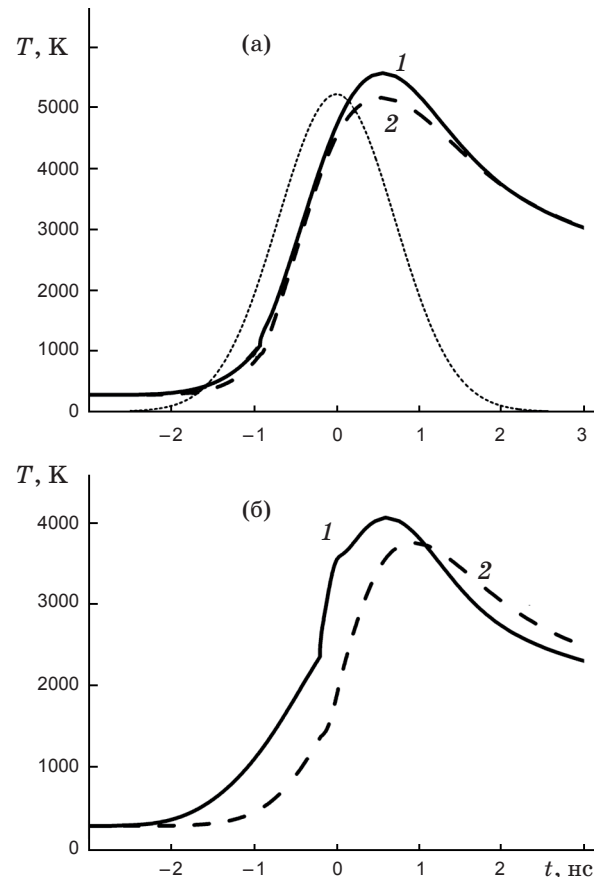


Рис. 2. Временные профили температур поверхности алюминия (а) и меди (б). $F = 2$ Дж/см², $\tau_L = 10^{-9}$ с. $T_e - 1$, $T_{ph} - 2$, форма импульса - 3.

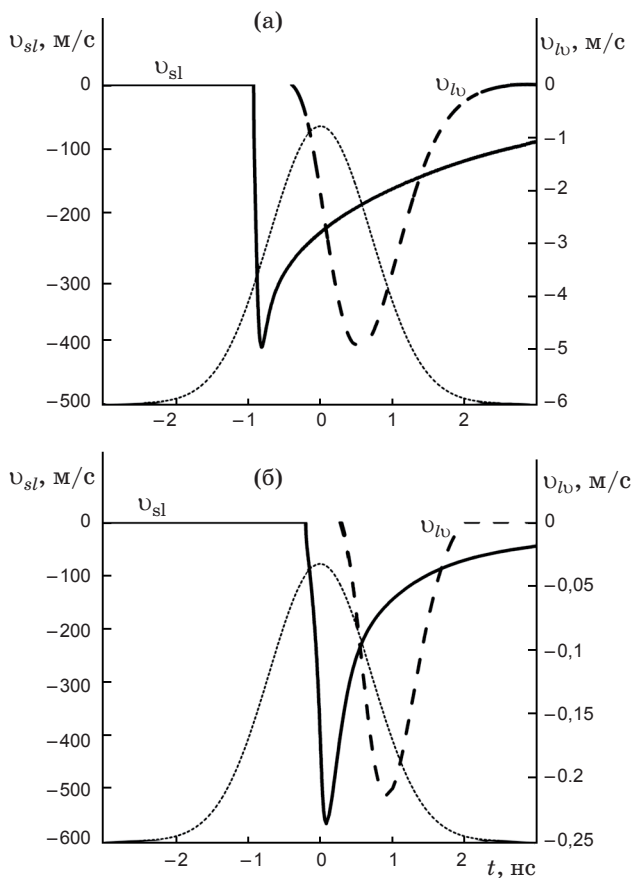


Рис. 3. Временные профили скоростей плавления и испарения в алюминии (а) и меди (б). $F = 2 \text{ Дж/см}^2$, $\tau_L = 10^{-9} \text{ с}$.

воздействия приводят к относительно невысокому перегреву твердой (70 К) и жидкой (30 К) фаз, рис. 4а.

В меди большие потоки вещества через границу плавления в совокупности с медленным энергообменом, при котором электронная подсистема играет роль объемного источника энергии, формируют в твердой фазе метастабильную область сильного перегрева ($\sim 850 \text{ К}$), рис. 4б. В то же время в жидкой фазе из-за низкой скорости испарения подобная область отсутствует.

Таким образом, результаты моделирования свидетельствуют о том, что неравновесные эффекты начинают проявляться уже в наносекундном диапазоне. Определяющим фактором создания неравновесных состояний является скорость энергообмена между электронной и фононной подсистемами. Для трехвалентного алюминия, у которого фактор энергообмена $g(T_e)$ на порядок выше, чем у одновалентной меди, заметное проявление неравновесно-

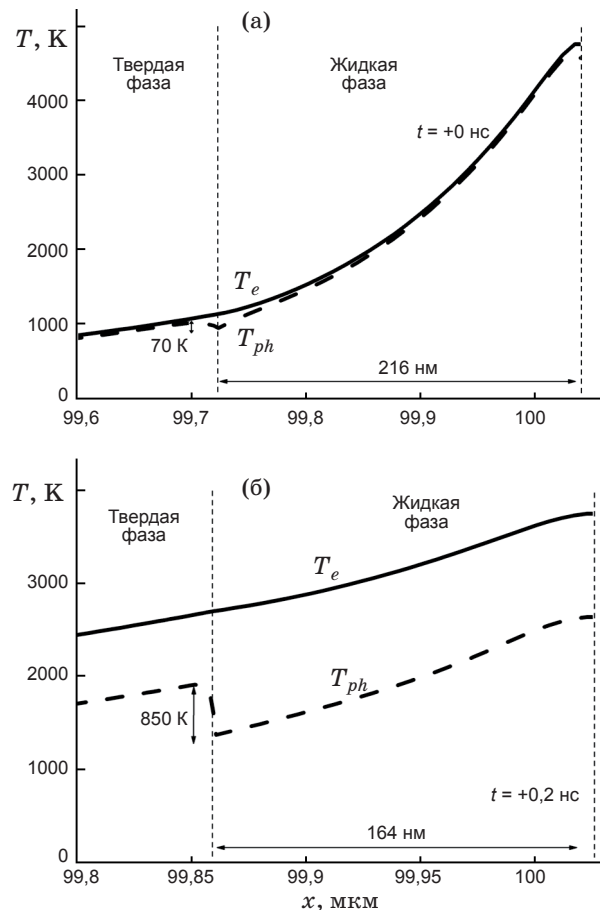


Рис. 4. Пространственные распределения температур в алюминии (а) и меди (б), $F = 2 \text{ Дж/см}^2$, $\tau_L = 10^{-9} \text{ с}$.

сти отмечается для импульсов длительностью $\tau_L \leq 1 \text{ нс}$. Описание процессов в однетемпературном приближении применимо для режимов с $\tau_L \geq 10 \text{ нс}$.

У металлов с более низким фактором $g(T_e)$ (на один порядок у меди и на полтора у золота) проявление неравновесных эффектов и применение однетемпературного приближения сдвигаются в область более длинных импульсов, соответственно $\tau_L \leq 10 \text{ нс}$ и $\tau_L \geq 5 \times 10 \text{ нс}$. Полученные результаты и выводы не противоречат существующим оценкам [16].

Фемтосекундное воздействие. Особенности фемтосекундной лазерной абляции определяются высокой скоростью выделения энергии. На рис. 5а, б представлены временные зависимости температур поверхности. Максимальные значения электронной температуры в обоих металлах достигаются $T_{e \max}^{\text{Al}}(t) \approx 5,3 \times 10^4 \text{ К}$, $T_{e \max}^{\text{Cu}}(t) \approx 6,9 \times 10^4 \text{ К}$ сразу за пиковым значением интенсивности. Быстрый рост электронной температуры приво-

дит к росту коэффициентов $g(T_e)$ и $\lambda_e(T_e)$. Коэффициент энергообмена $g(t)$ увеличивается более чем на два порядка. Максимальные значения температуры решетки в обоих металлах достигаются к концу периода неравновесности. Для алюминия $T_{ph,max}^{Al} \approx 1,1 \times 10^4$ К, рис. 5а, что значительно превышает величину критической температуры T_{cr} . Принципиальная возможность подобного режима фемтосекундного нагрева была показана в [5] с помощью молекулярной динамики. В рамках используемой континуальной модели отсутствует возможность моделирования последующего распада перегретого состояния. Поэтому можно лишь предположить, что механизмом распада перегретого состояния будет разделение фаз [5]. Для решетки меди реализуется другая ситуация. Из-за замедленного энергообмена электронная компонента нагревается сильнее, чем в алюминии, но решетка разогревается до относительно невысоких температур, сравнимых с температурой равновесного кипения меди $T_{ph,max}^{Cu} \approx 2800$ К, рис. 5б.

Отличительная черта фемтосекундного воздействия проявляется и в значительной за-

держке начала фазовых превращений относительно лазерного импульса. Появление жидкой фазы у обоих металлов характеризуется скачкообразным изменением коэффициента электронной теплопроводности, рис. 9. У алюминия плавление начинается через 16 пс, а у меди значительно позже – через 55 пс.

Высокие скорости нагрева предопределяют высокие скорости фазовых трансформаций алюминия и меди. На рис. 6а представлены временные зависимости скорости распространения фазовых фронтов плавления $v_{sl}(t)$ и испарения $v_{lv}(t)$ в алюминии. Скорость фронта плавления быстро достигает максимальной величины $v_{sl,max}(t) \approx 4,4$ км/с. Поверхностное испарение начинается с некоторой задержкой. Из-за большой величины удельной энергии испарения L_v^{ne} ($L_v^{ne} \gg L_m^{ne}$) максимальная скорость поверхностного испарения примерно на порядок меньше скорости плавления $v_{lv,max}(t) \approx 150$ м/с. Скорость плавления меди заметно меньше – $v_{sl,max}(t) \approx 1,2$ км/с, рис. 6б, а испарение из-за невысокой температуры поверхности практически отсутствует. Высокие скорости распространения фазовых фронтов связаны с мощным

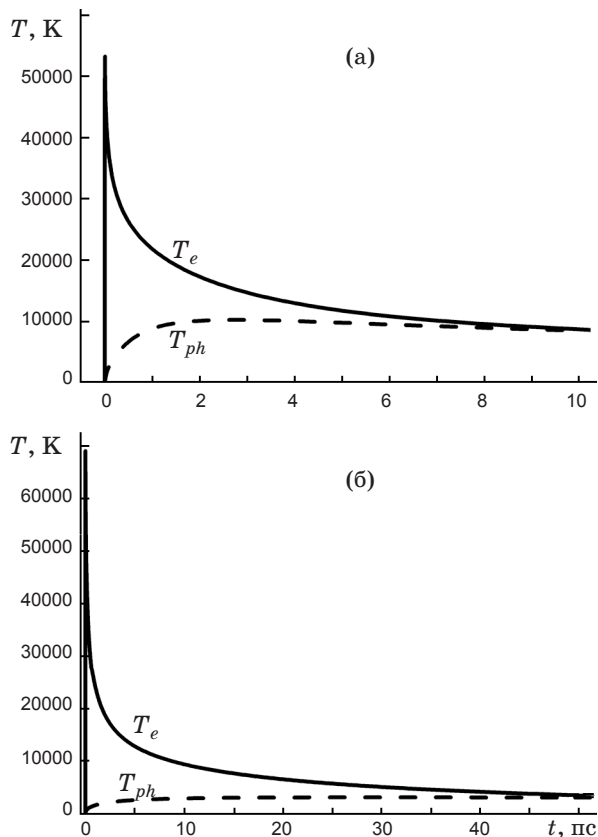


Рис. 5. Временные профили температур поверхности алюминия (а) и меди (б). $F = 1$ Дж/см², $\tau_L = 10^{-15}$ с.

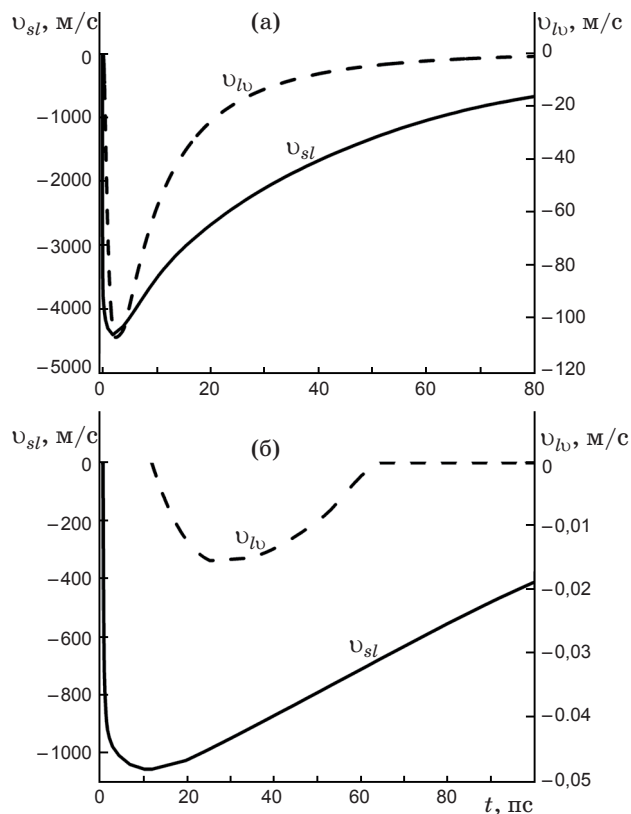


Рис. 6. Временные профили скоростей плавления и испарения в алюминии (а) и меди (б). $F = 1$ Дж/см², $\tau_L = 10^{-15}$ с.

перетоком вещества и энергии через межфазные границы. В совокупности с объемным характером передачи энергии от электронного газа к решетке это приводит к формированию сильно перегретых метастабильных состояний и возникновению приповерхностных максимумов температуры в твердой и жидкой фазах, рис. 7а, б. Максимальные скорости фронта плавления у обоих металлов оказываются сопоставимыми со скоростью звука, что вызывает скачкообразные изменения давления на поверхности твердой фазы, рис. 8а, б, в алюминии до 250 кбар, в меди до 30 кбар. Этим значениям давления оказывается достаточно для формирования в твердой фазе ударных волн, бегущих впереди фронта плавления, рис. 8а, б. Вертикальными пунктирными линиями отмечены положения фазовых фронтов и ударных волн.

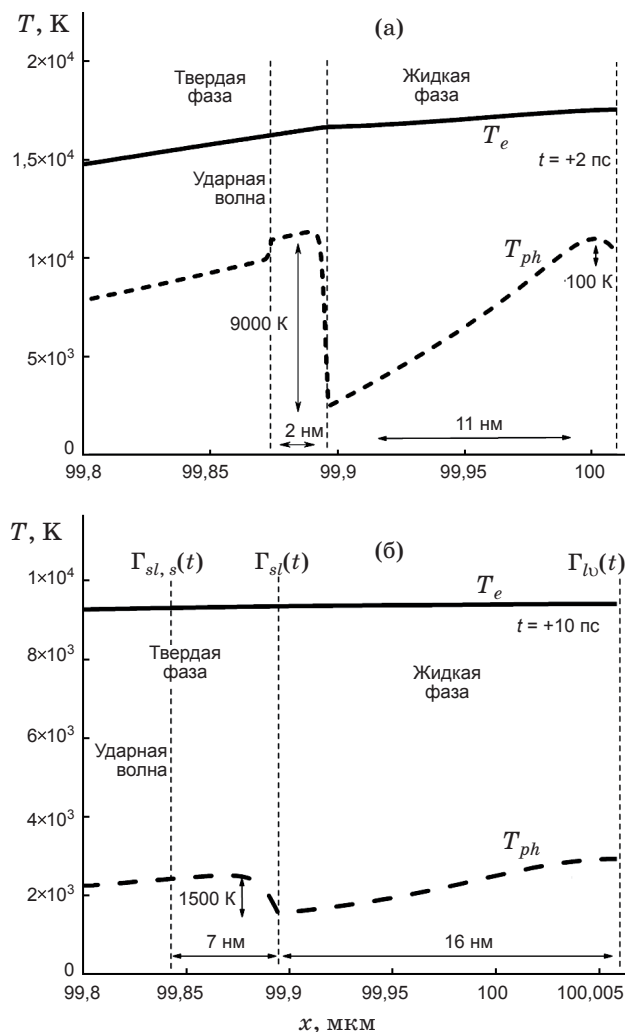


Рис. 7. Пространственные распределения температур в алюминии (а) и меди (б). $F = 1$ Дж/см², $\tau_L = 10^{-15}$ с.

Стрелками указаны положения максимумов температуры и их величины.

Возникновение жидкой фазы происходит в момент достижения температуры T_m . Выражение для кинетики плавления, учитывающее в явном виде перегрев поверхности, в данной модели отсутствует. Вместо него используется равенство температур $T_{sl} = T_{ph, s} = T_{ph, l} = T_m(p_s)$, позволяющее учитывать только сдвиг температуры плавления $T_m(p_s)$ под влиянием давления. Эти условия приводят к формированию в твердой фазе резко выраженного приповерхностного температурного максимума $\Delta T_{sl}^{Al} = (T_{ph, \max} - T_{ph, s}) \approx 9000$ К. и $\Delta T_{sl}^{Cu} = (T_{ph, \max} - T_{ph, s}) \approx 1100$ К. Граничные условия на облучаемой испаряющейся поверхности жидкой фазы $x = \Gamma_{lv}(t)$ допускают ее перегрев. В алюминии температура поверхности достигает величины $T_{ph, l}^{Al} \approx 10^4$ К, а приповерхностный температурный максимум в жидкой фазе оказывается значительно меньшим, чем в твердой $\Delta T_{lv}^{Al} = (T_{ph, \max} - T_{ph, l}) \approx 200$ К. В медной мишени из-за невысокой скорости испарения приповерхностный температурный максимум в жидкой фазе отсутствует. Отметим,

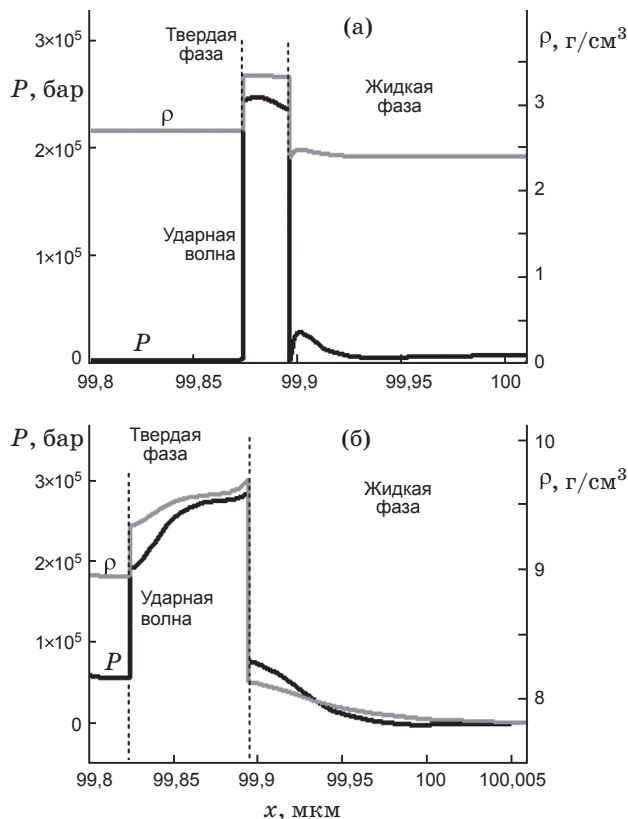


Рис. 8. Пространственные распределения давления в алюминии (а) и меди (б). $F = 1$ Дж/см², $\tau_L = 10^{-15}$ с.

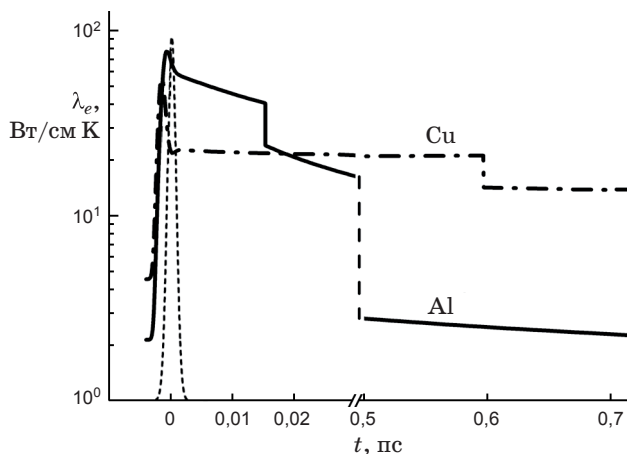


Рис. 9. Временные профили коэффициентов электронной теплопроводности в алюминии и меди. $F = 1 \text{ Дж/см}^2$, $\tau_L = 10^{-15} \text{ с}$.

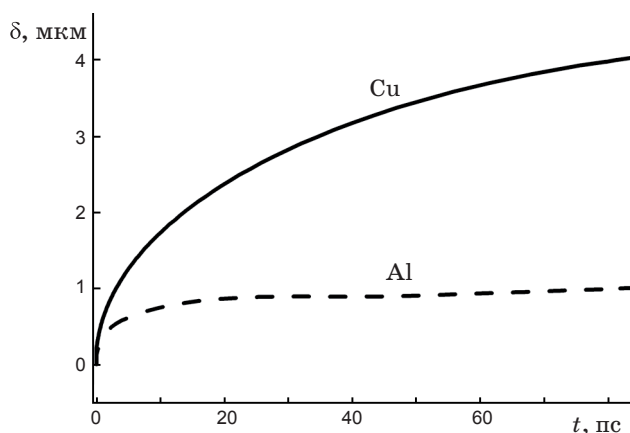


Рис. 10. Пространственные профили областей теплового влияния в алюминии и меди. $F = 1 \text{ Дж/см}^2$, $\tau_L = 10^{-15} \text{ с}$.

что приведенные приповерхностные температурные максимумы получены в предположении отсутствия гомогенных фазовых переходов (описание которых в рамках континуальных моделей не представляется возможным) и устойчивости перегретых состояний. Поэтому абсолютные величины перегревов и времена их существования остаются открытыми.

Формирование области сильной неравновесности $T_e \gg T_{ph}$ сопровождается резким увеличением коэффициента электронной теплопроводности $\lambda_e(T_e, T_{ph})$, примерно в 30 раз, рис. 9,

* * * * *

что приводит к выносу энергии электронного газа на аномально большой объем, $\delta_{Al} \approx 0,9 \text{ мкм}$, $\delta_{Cu} \approx 4,0 \text{ мкм}$, рис. 10.

Полное выравнивание температур $T_e \approx T_{ph}$ для данного режима в различных металлах происходит за различное время. В Al оно составляет $t \approx 15 \text{ пс}$, а в Cu – $t \approx 55 \text{ пс}$.

Таким образом, фемтосекундное лазерное воздействие на металлы приводит к возникновению сильно неравновесных состояний, для которых характерны качественные изменения в развитии таких процессов, как энергообмен и быстрые фазовые переходы.

Заключение

Математическое моделирование позволило установить, что воздействие лазерных импульсов длительностью $\tau_L = 1\text{--}10 \text{ нс}$ характеризуется появлением неравновесных состояний. Использование для количественного анализа лазерной абляции металлов одотемпературных моделей допустимо для импульсов длительностью не менее $\tau_L = 10\text{--}50 \text{ нс}$. Степень неравновесности зависит от скорости ввода лазерной энергии и резко возрастает с переходом к импульсным режимам пико- фемтосекундной длительности. Результаты моделирования подтверждают качественное воздействие неравновесности на основные процессы. Отложенный (замедленный) обмен энергии между электронной и фононной подсистемами с возрастающим вкладом энергии в электронную компоненту приводит к объемному типу нагрева решетки. В режимах лазерной фемтосекундной абляции металлических мишеней быстрые фазовые трансформации сопровождаются появлением сильно перегретых ($5000\text{--}15\ 000 \text{ К}$) метастабильных состояний и ударных волн в твердом теле, а также повышенным выносом энергии из зоны облучения электронной теплопроводностью. В то же время моделирование гомогенных (объемных) фазовых переходов (плавление, испарение) требует включения в континуальные модели моделей молекулярной динамики или зародышеобразования.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты № 10-07-00246-а и № 09-07-00225-а.

ЛИТЕРАТУРА

1. Miotello A., Ossi P.M. Laser-Surface Interactions for New Materials Production. Springer Series in Materials Science., 130. Heidelberg.: Springer-Verlag, 2009. 358 p.

2. *Liu B., Hu Z.D., Che Y., Chen Y.B., Pan X.Q.* Nanoparticle generation in ultrafast pulsed laser ablation of nickel // *Appl. Phys. Lett.* 2007. V. 90. P. 044103–044107.
3. *Ausanio G., Amoroso S., Barone A.C., Bruzzese R., Iannotti V., Lanotte L., Vitiello M.* Production of nanoparticles of different materials by means of ultrashort laser pulsed // *Appl. Surf. Sci.* 2006. V. 252. P. 4678–4684.
4. *Song K.H., Xu X.* Explosive phase transformation in excimer laser ablation // *Appl. Surf. Sci.* 1998. V. 127–129. P. 111–116.
5. *Ch. Cheng, X. Xu.* Mechanisms of decomposition of metal during femtosecond laser ablation // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 72. P. 165415-1–165415-15.
6. *Zhigilei L.V.* Dynamics of the plume formation and parameters of the ejected clusters in short-pulse laser ablation // *Appl. Phys. A.* 2003. V. 76. P. 339–350.
7. *Mene'ndez-Manjo'n A., Barcikowski S., Shafeev G.A., Mazhukin V.I., Chichkov B.N.* Influence of beam intensity profile on the aerodynamic particle size distributions generated by femtosecond laser ablation // *Laser and Particle Beams.* 2010. № 28. P. 45–52.
8. *Yang J., Zhao Y., Zhu X.* Theoretical studies of ultrafast ablation of metal targets dominated by phase explosion // *Appl. Phys. A.* 2007. V. 89. P. 571–578.
9. *Mazhukin V.I., Samarshii A.A.* Mathematical Modeling in the Technology of Laser Treatments of Materials // *Review. Surveys on Mathematics for Industry.* 1994. V. 4. № 2. P. 85–149.
10. *Crout D.* An application of kinetic theory to the problems of evaporation and sublimation of monatomic gases // *J. Math. Phys.* 1936. № 15. P. 1–54.
11. *Мажукин В.И., Прудковский П.А., Самохин А.А.* О газодинамических граничных условиях на фронте испарения // *Математическое моделирование.* 1993. Т. 5. № 6. С. 3–10.
12. *Mazhukin A.V., Chichkov B. N.* Kinetics of electron-phonon relaxation in metals in wide temperature range // *Book Abstracts E-MRS 2008 Spring Meeting (E-MRS 2008).* P. b-17.
13. *Мартыненко Ю.В., Явлинский Ю.Н.* Охлаждение электронного газа металла при высокой температуре // *ДАН СССР.* 1983. Т. 270. № 1. С. 88–91.
14. *Френкель Я.И.* Введение в теорию металлов. М.: Физматлит, 1958. 380 с.
15. *Mazhukin V.I., Mazhukin A.V., Koroleva O.N.* Optical Properties of Electron Fermi-Gas of Metals at Arbitrary Temperature and Frequency // *Laser Physics.* 2009. V. 19. P. 1179–1186.
16. *Анисимов С.И., Имас Я.А., Романов Г.С., Ходыко Ю.В.* Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1970. 271 с.