

# МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ЖИДКОСТЬ-ПАР ПРИ СУБНАНОСЕКУНДНОМ ОДНОРОДНОМ НАГРЕВЕ ТОНКОЙ ПЛЕНКИ

*В.И. Мажукин<sup>1</sup>, А.В. Шапранов<sup>1</sup>, А.А. Самохин<sup>2</sup>, А.Ю. Ивочкин<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,*

<sup>2</sup>*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН,*

*Ул. Вавилова 38, 119991 Москва, E-mail: [asam40@mail.ru](mailto:asam40@mail.ru)*

В рамках молекулярной динамики исследуется поведение тонкой жидкой пленки при ее быстром однородном нагреве со скоростью 2-100 К/пс. В части вычислений производилось выключение нагрева с мониторингом последующей эволюции. Результаты расчета представлены в виде усредненных по плоскости пленки распределений температуры, плотности и скорости частиц в расчетной области, а также двумерных распределений плотности частиц в плоскости ZX в диапазоне времен нагрева до 800 пс. Полученные результаты позволяют сделать вывод о четырех различных режимах поведения пленки в зависимости от скорости нагрева: квазистационарный режим с поверхностным испарением, взрывное (объемное) вскипание, спиноподобный распад и разлет однофазного сверхкритического флюида.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, тонкая пленка, объемный нагрев, поверхностное испарение, взрывное вскипание, спиноподобный распад

## MOLECULAR DYNAMIC CALCULATION OF NON-EQUILIBRIUM LIQUID-VAPOR PHASE TRANSITION DURING SUB-NANOSECOND HOMOGENEOUS THIN FILM HEATING

*V.I. Mazhukin<sup>1</sup>, A.V. Shapranov<sup>1</sup>, A.A. Samokhin<sup>2</sup>, A.Yu. Ivochkin<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>*Keldysh Institute of Applied Mathematics,*

<sup>2</sup>*Prokhorov General Physics Institute,*

*E-mail: [asam40@mail.ru](mailto:asam40@mail.ru)*

In the framework of molecular dynamics the behavior of thin liquid film during its rapid homogeneous heating with rate 2-100 K/ps is studied. The initial film thickness through the Z axis is 48 nm. The overall number of particles is 96 000 and the length of calculation area is 268 nm in that direction. In the film plane periodic boundary conditions were used with the main dimension 8x8 nm. The calculation results are presented in a form of distributions of temperature, density and particle velocity in the calculation area averaged over the film plane and also in the form of two-dimension particle density distributions in the zx plane in the range of heating time from 0 to 800 ps. In some calculations the heating was switched off with subsequent monitoring of the film behavior. The obtained results suggest the existence of four different regimes of film behavior depending on the heating rate: quasi-stationary regime with surface evaporation, explosive (volume) boiling, spinodal decomposition and overcritical expansion.

**Keywords:** molecular dynamics, thin film, volume heating, surface evaporation, explosive (volume) boiling, spinodal decomposition

### 1. Введение

Исследование неравновесных фазовых превращений при быстром нагреве конденсированного вещества представляет интерес, как с практической, так и с фундаментальной точки зрения. В этой области имеется ряд невыясненных вопросов, касающихся, в частности, особенностей поведения сильно перегретой жидкой фазы при достижении температуры предельного перегрева. Наиболее полный теоретический анализ подобных вопросов в настоящее время возможен только с помощью математического моделирования в рамках метода молекулярной динамики, в котором поведение вещества

рассматривается на уровне отдельных частиц, взаимодействующих между собой и с внешним окружением.

Такой подход используется во многих работах, в частности, посвященных анализу воздействия интенсивного лазерного излучения на конденсированные среды [1-4], однако при этом, например, не была исследована с необходимой полнотой роль поверхностного испарения, которая может быть существенной уже в субнаносекундном диапазоне. Необходимо подчеркнуть, что быстрое фазовое превращение, как и всякий неравновесный процесс, существенно зависит от условий его реализации, в частности от скорости нагрева и динамики разлета, обусловленной инерционными или другими ограничениями.

В настоящей работе в рамках молекулярной динамики исследуется поведение тонкой жидкой пленки в субнаносекундном диапазоне времен при ее быстром однородном нагреве со скоростью 2-100 К/пс с целью выяснения влияния поверхностного испарения на особенности процесса взрывной дезинтеграции сильно перегретой пленки. В дополнении к результатам [5] приводятся новые данные об особенностях неравновесного фазового превращения после выключения источника нагрева.

## 2. Постановка задачи и метод исследования

В качестве объекта исследования была выбрана жидкая диэлектрическая пленка начальной толщиной вдоль оси  $Z$  48 нм, с общим размером счетной области по этой оси 268 нм. Частицы паровой фазы, достигшие границ этой области, удалялись из расчета (проницаемая безотражательная граница). Размеры счетной области по осям  $X$ ,  $Y$  составляли 8 нм с периодическими граничными условиями. Общее число частиц в начальный момент составляло 96000. Масса частиц соответствовала массе атома алюминия, а межчастичное взаимодействие определялось тем же потенциалом, что и в предыдущей нашей работе [5]. При такой постановке наличие электронной подсистемы в явном виде не учитывается и теплопроводность системы определяется взаимодействием тяжелых частиц. Критические параметры для такой системы составляли:  $T_c = 7500$  К,  $P_c = 1,5$  кбар,  $\rho_c = 0,5$  г/см<sup>3</sup>.

Заметим, что подобная постановка задачи для исследования процесса испарения пленки диэлектрической жидкости (воды) использовалась в работе [6], однако при отсутствии объемного (взрывного) вскипания.

Использованные в настоящей работе методы расчета описаны в [5]. Начальное состояние пленки перед ее нагревом соответствовало равновесию с насыщенным паром при температуре 6400 К. Разлет пара в этом случае ограничивался непроницаемыми отражающими стенками, которые находились на расстоянии 22 нм от правой и левой поверхностей пленки. При  $t \geq 0$  пленка подвергалась нагреву со скоростью 2-100 К/пс, который осуществлялся посредством соответствующего увеличения кинетической энергии частиц [5].

## 3. Обсуждение результатов

Рассмотрим сначала поведение пленки при скорости ее нагрева 2 К/пс. На рис. 1-8 показано поведение температуры, плотности и скоростей частиц пленки и пара при этой скорости нагрева.

На рис. 3-4, изображающих двумерное распределение плотности; из их сравнения видно, как начинается разлет пара после снятия ограничительных стенок. Появление направленной скорости частиц пара по сравнению с начальным состоянием на рис. 1б видно также из рис. 2б. Скорость частиц нарастает по мере удаления от поверхности пленки, где ее величина остается пока еще малой, что соответствует картине свободного разлета первоначального слоя пара и отсутствию заметного поверхностного испарения.

Рис. 5-6 демонстрирует формирование выпуклого температурного профиля и соответствующего ему вогнутого профиля плотности пленки в моменты времени 310 и 800 пс. Такое поведение температуры и плотности обусловлено влиянием интенсивного процесса поверхностного испарения, когда частицы пара имеют приобретающую большую

скорость непосредственно на поверхности пленки. К моменту  $t = 800$  пс толщина пленки уменьшается из-за испарения почти на 16000 частиц. Уменьшение толщины пленки за последние полнаносекунды видно также из сравнения Рис. 7 и 8.

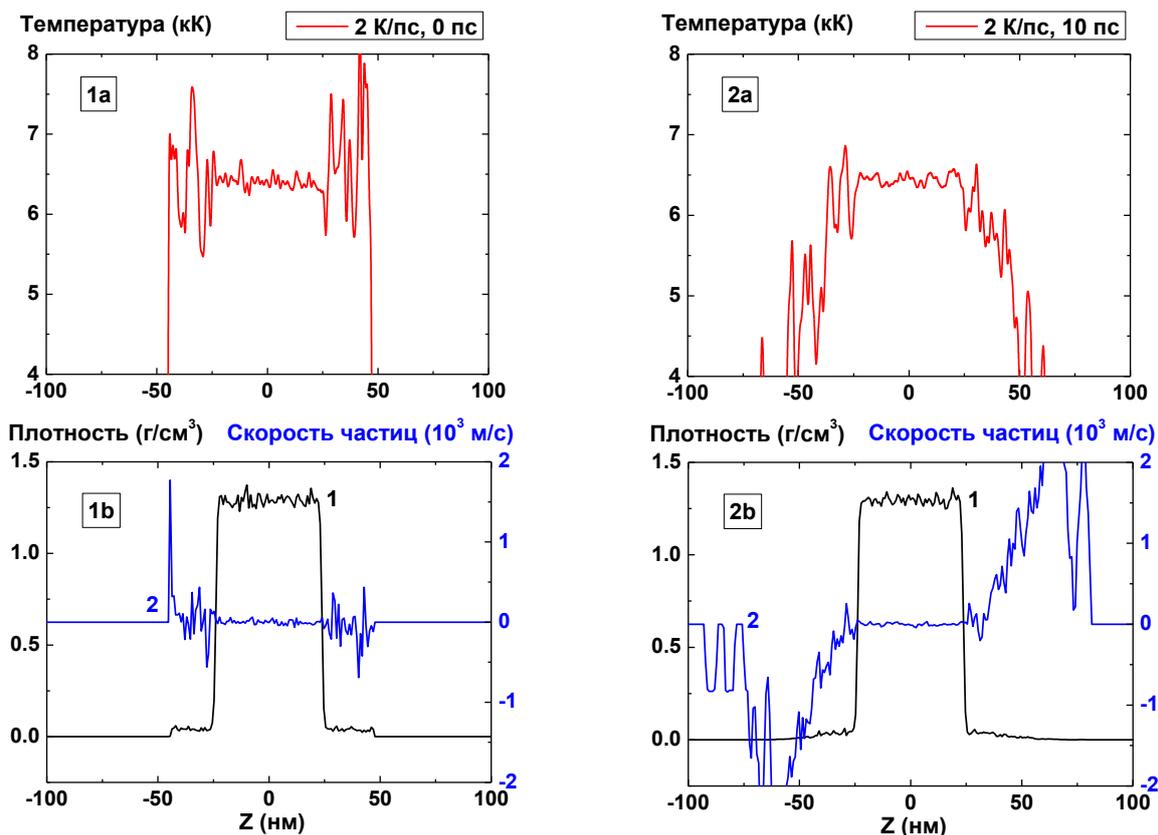


Рис. 1-2: Пространственные распределения температуры (1а-2а), плотности (1b-2b, кривая 1) и скорости частиц (1b-2b, кривая 2) в пленке в моменты времени 0, 10 пс при нагреве со скоростью 2 К/пс

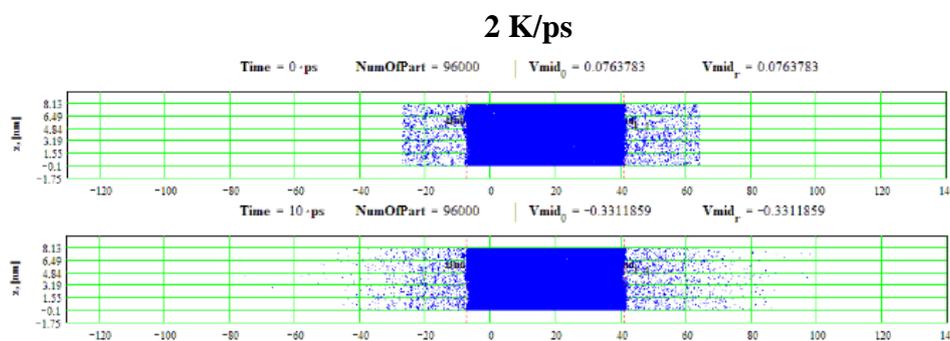


Рис. 3-4: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 0, 10 пс при нагреве со скоростью 2 К/пс

При скорости нагрева 2 К/пс максимальная температура в центре пленки достигает значений 6800 К и стабилизируется на этом уровне. Метастабильное состояние пленки, которое находится при давлении ниже давления насыщенных паров, отвечающих максимуму ее температуры, оказывается сравнительно устойчивым и не приводит к ее взрывному вскипанию.

При увеличении скорости нагрева до 4 К/пс (рис. 9-16) поведение пленки на временах меньших 300 пс качественно не отличается от случая 2 К/пс, как это следует из сравнения рис. 9 и рис. 5. Однако уже к моменту 280 пс намечается быстрый рост флуктуаций и падение плотности в центре пленки, где температура достигает значения примерно 6900 К, которое почти совпадает с величиной температурного максимума в момент 240 пс.

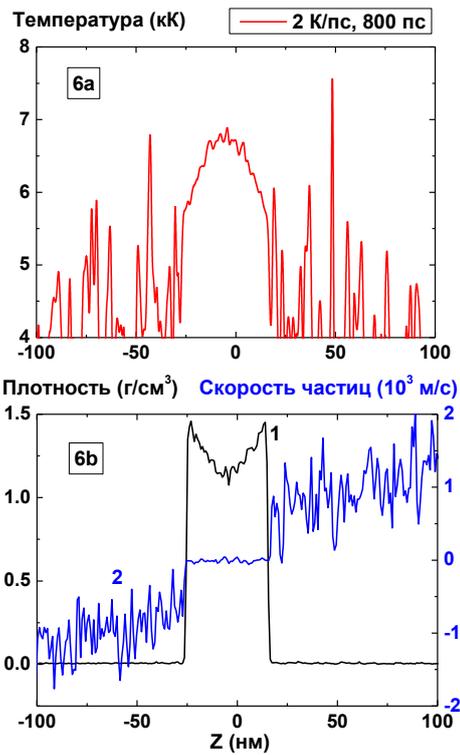
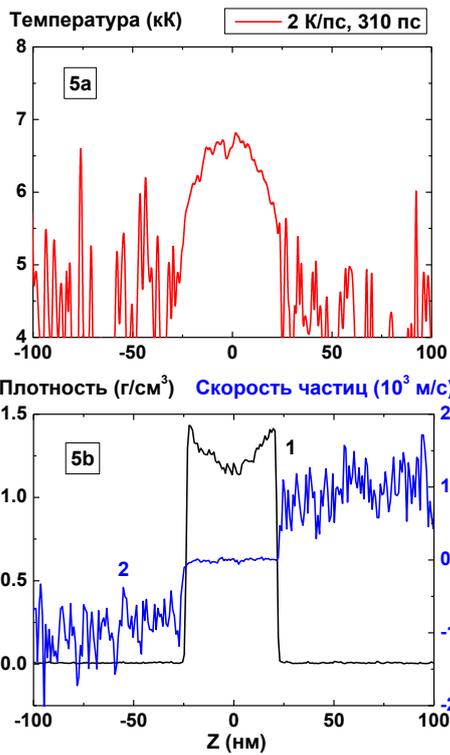


Рис. 5-6: Пространственные распределения температуры (5а-6а), плотности (5b-6b, кривая 1) и скорости частиц (5b-6b, кривая 2) в пленке в моменты времени 310, 800 пс при нагреве со скоростью 2 К/пс

**2 К/пс**

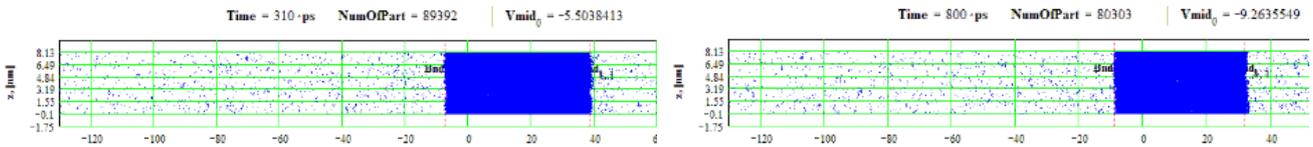


Рис. 7-8: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 310, 800 пс при нагреве со скоростью 2 К/пс

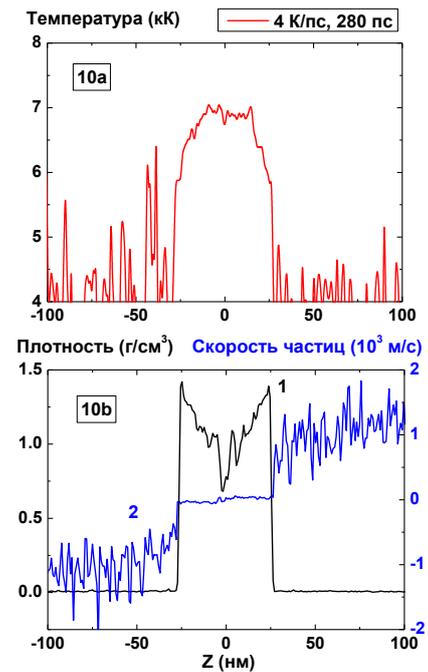
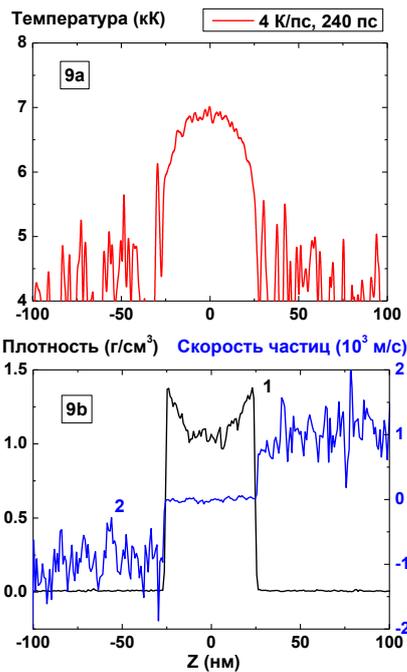


Рис. 9-10: Пространственные распределения температуры (9а-10а), плотности (9b-10b, кривая 1) и скорости частиц (9b-10b, кривая 2) в пленке в моменты времени 240, 280 пс при нагреве со скоростью 4 К/пс

### 4 K/ps

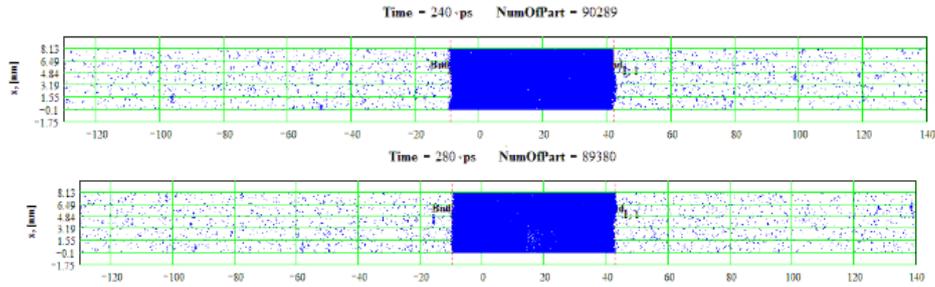


Рис. 11-12: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 240, 280 пс при нагреве со скоростью 4 К/пс

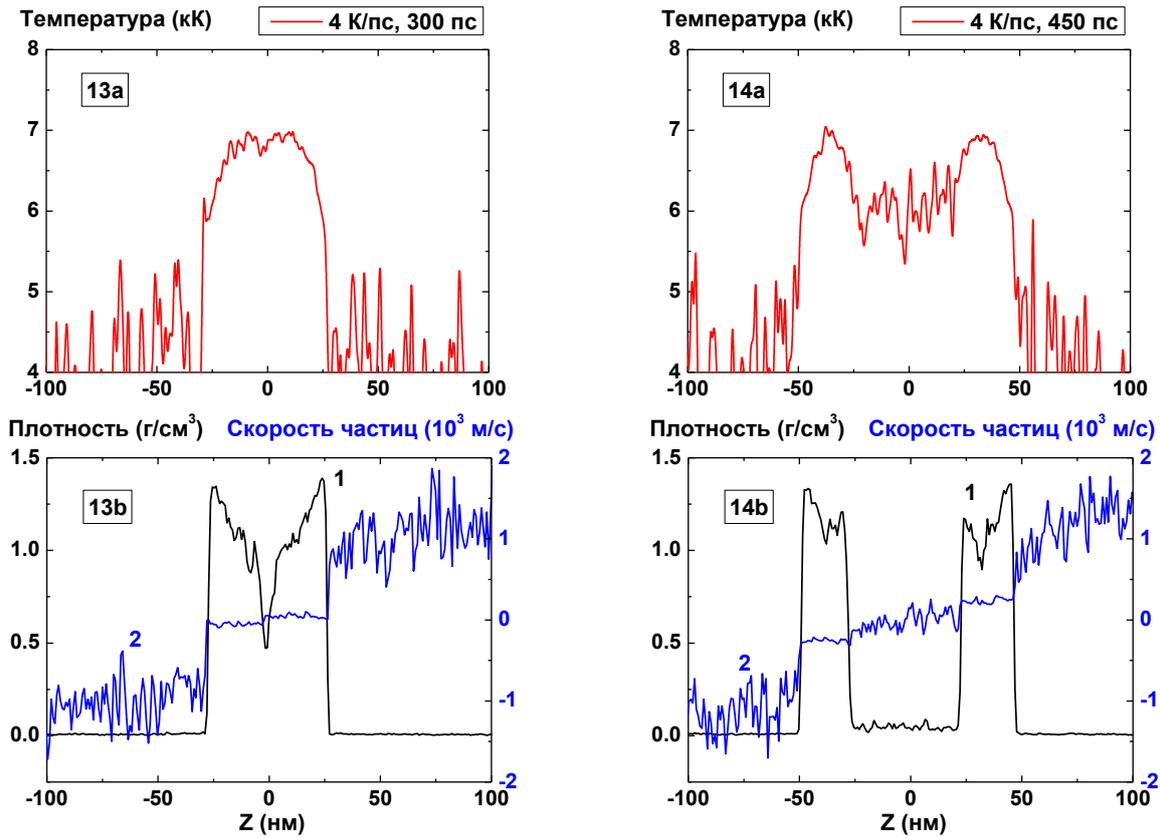


Рис. 13-14: Пространственные распределения температуры (13а-14а), плотности (13б-14б, кривая 1) и скорости частиц (13б-14б, кривая 2) в пленке в моменты времени 300, 450 пс при нагреве со скоростью 4 К/пс

### 4 K/ps

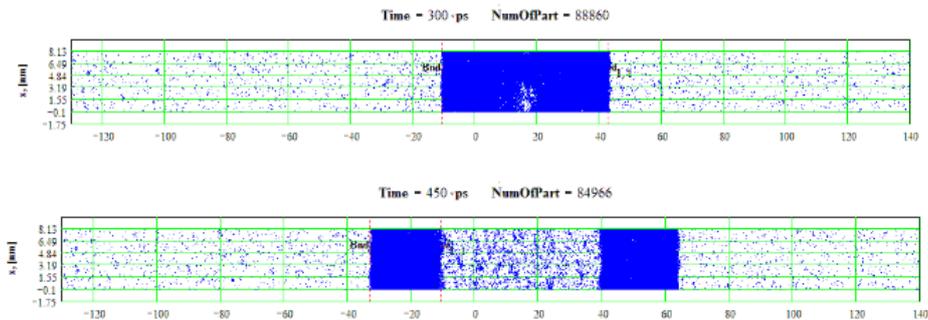


Рис. 15-16: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 300, 450 пс при нагреве со скоростью 4 К/пс

Отличительной особенностью дальнейшей эволюции является продолжающееся падение

плотности в центре пленки, которое сопровождается также ростом давления и заметным падением температуры в области ее предыдущего максимума. Такое поведение характерно для эволюции неустойчивого однофазного состояния вещества, переходящего в двухфазное из-за развивающегося процесса взрывного объемного вскипания.

В результате быстрого увеличения падения пленка в итоге распадается на два фрагмента, разделенных паровой полостью (Рис. 13-16). Средняя направленная по оси Z скорость частиц пара в этой полости заметно меньше по величине скоростей пара снаружи пленки, в то время как плотность пара внутри полости заметно больше ее величины снаружи пленки (Рис. 16). На рис. 14 видно также различие в знаке скоростей частиц правого и левого фрагмента, связанное с их разлетом из-за того, что давление пара в полости превышает наружное давление.

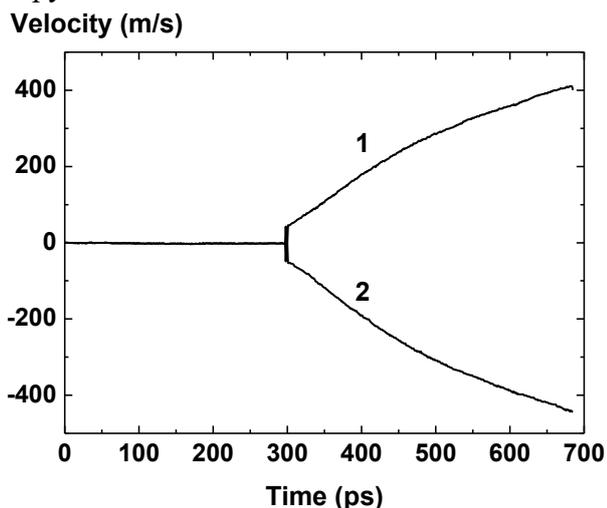


Рис. 17. Зависимость скорости от времени для правого (1) и левого (2) фрагментов расширяющейся пленки при скорости нагрева 4 К/сек.

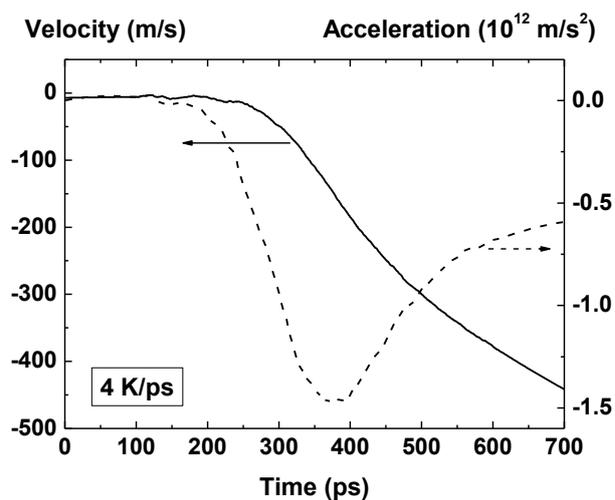


Рисунок 18: Зависимость скорости (сплошная линия) и ускорения (пунктирная линия) от времени левого (2) фрагмента при скорости нагрева 4 К/сек.

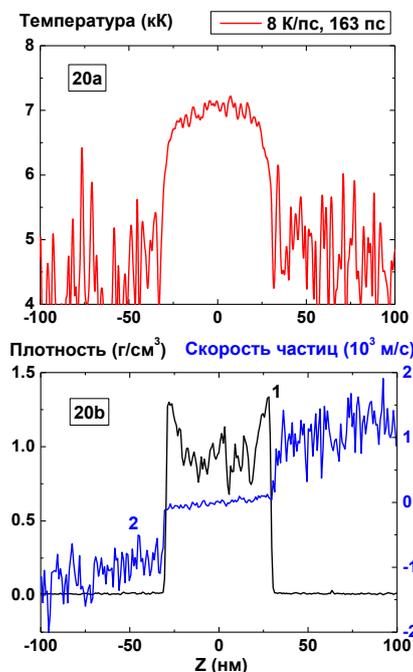
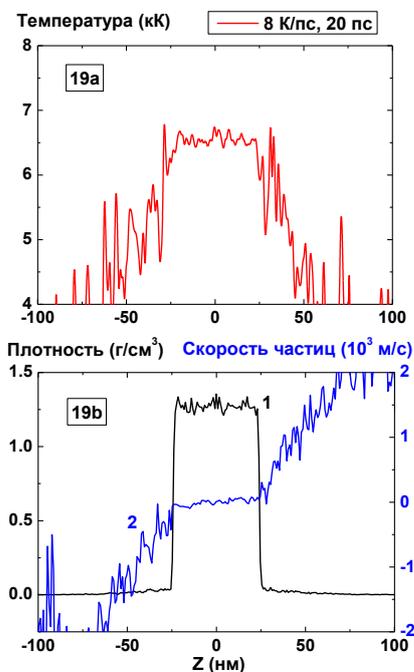


Рис. 19-20: Пространственные распределения температуры (19а-20а), плотности (19b-20b, кривая 1) и скорости частиц (19b-20b, кривая 2) в пленке в моменты времени 20, 163 пс при нагреве со скоростью 8 К/пс

### 8 K/ps

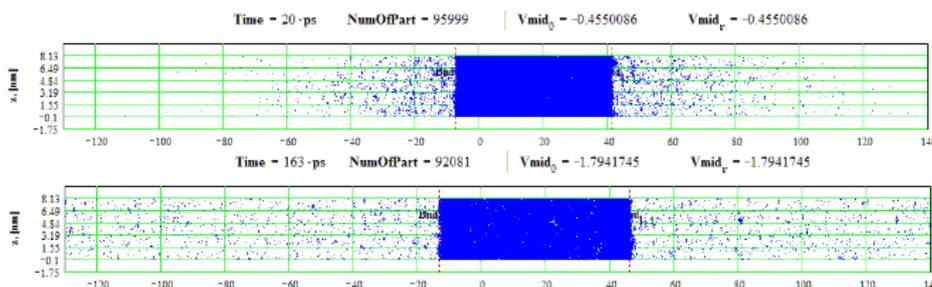


Рис. 21-22: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 20, 163 пс при нагреве со скоростью 8 К/пс

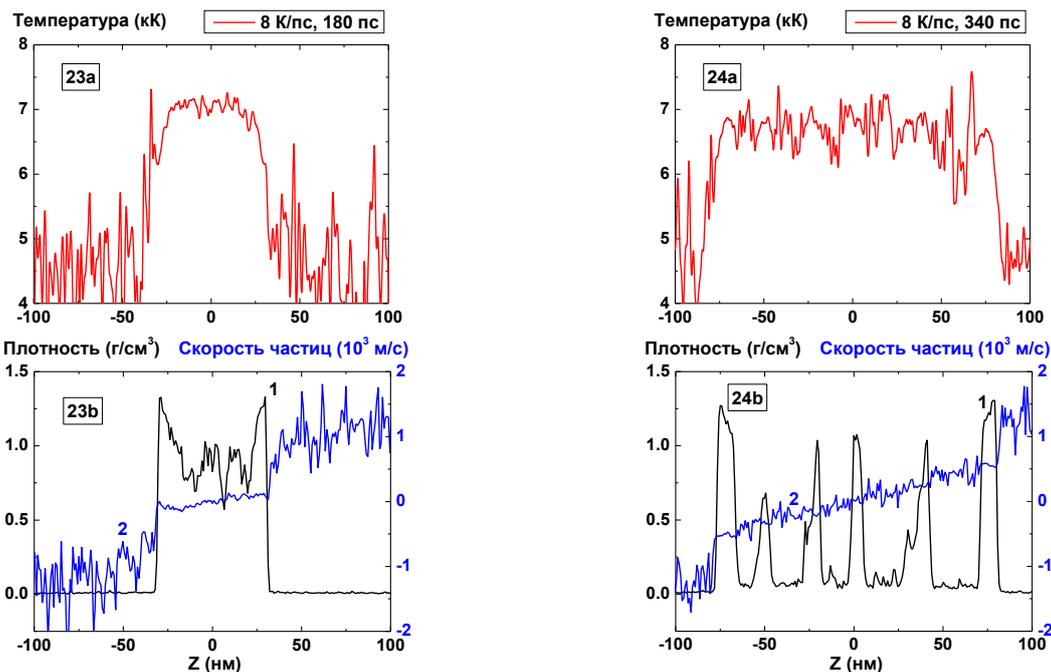


Рис. 23-24: Пространственные распределения температуры (23а-24а), плотности (23б-24б, кривая 1) и скорости частиц (23б-24б, кривая 2) в пленке в моменты времени 180, 340 пс при нагреве со скоростью 8 К/пс

### 8 K/ps

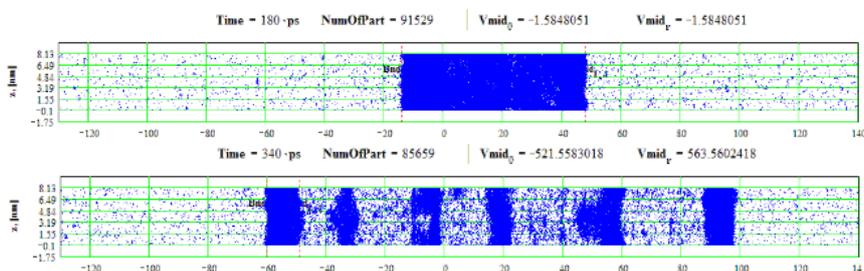


Рис. 25-26: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 180, 340 пс при нагреве со скоростью 8 К/пс

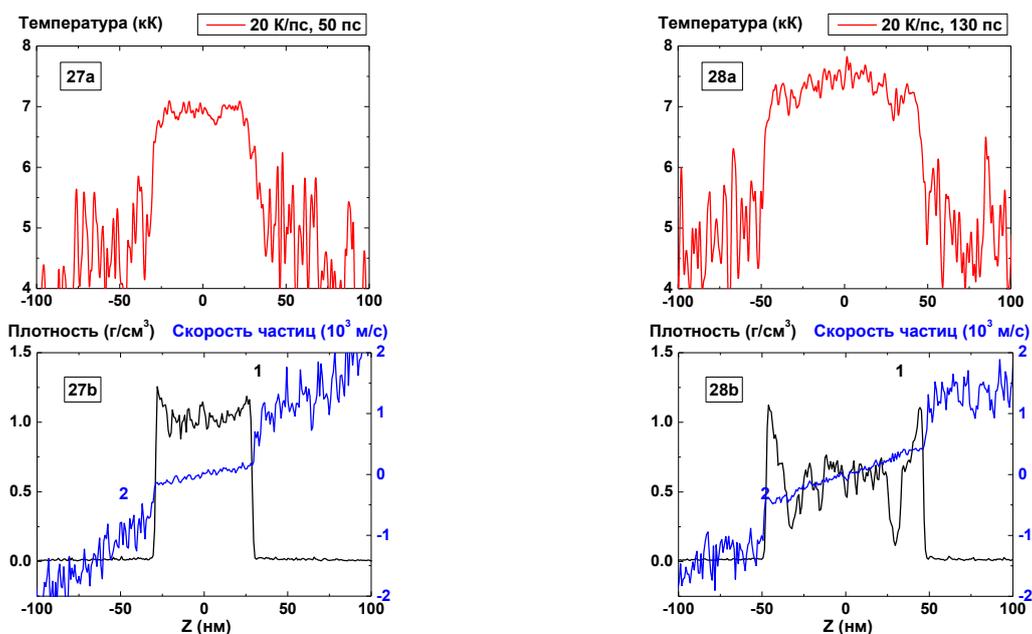


Рис. 27-28: Пространственные распределения температуры (27a-28a), плотности (27b-28b, кривая 1) и скорости частиц (27b-28b, кривая 2) в пленке в моменты времени 50, 130 пс при нагреве со скоростью 20 К/пс

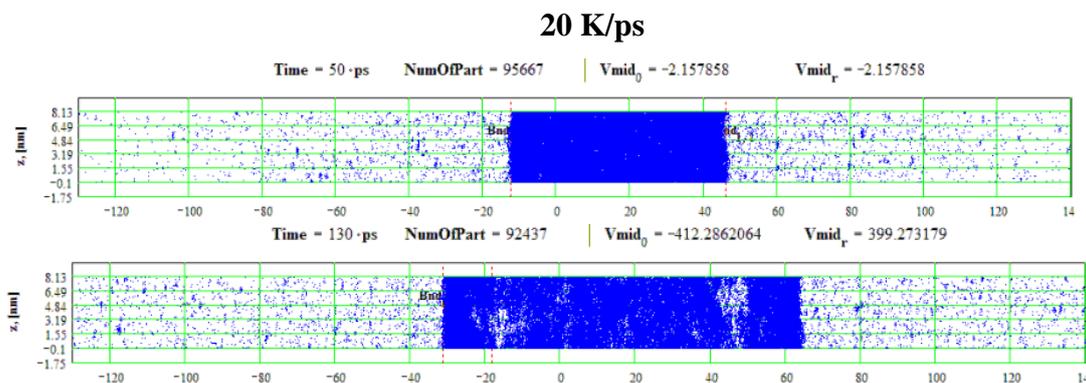


Рис. 29-30: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 50, 130 пс при нагреве со скоростью 20 К/пс

Поведение скорости разлетающихся фрагментов от времени показано на рис. 17. Скорость правого фрагмента по абсолютной величине оказывается несколько меньше левого из-за различия в их массах (центр масс системы покоится). Особый интерес представляет ускорение фрагментов в начальные моменты формирования паровой полости, поскольку это дает информацию о поведении давления во время взрывного вскипания. Однако из-за наличия больших флуктуаций точное количественное определение ускорения и соответствующего ему давления пока оказывается затруднительным.

На рис. 18 показано поведение скорости и ускорения в начальный момент формирования полости, определяемых по сплаженному усредненному движению наружных границ пленки. Максимальному значению ускорения в этом случае  $1.5 \cdot 10^{12} \text{ м/с}^2$  соответствует давление в полости  $P_m = \rho gh + P_0 \sim 500 \text{ атм}$ , где  $\rho = 1.2 \text{ г/см}^3$ ,  $h = 23 \text{ нм}$ ,  $P_0 \sim 100 \text{ атм}$  – давление на внешней границе фрагмента.

В этой оценке учитывается, что движение фрагмента обусловлено разностью давлений  $P_m$  внутри полости и снаружи пленки  $P_0$ . Молекулярно-динамические вычисления для  $P_m$  дают примерно такую же величину  $500 \text{ атм} \sim 0.35 P_c$ , где  $P_c \sim 1400 \text{ атм}$ . Определенный таким образом максимум давления взрывного вскипания оказывается меньше давления насыщения 700-770 атм, которое соответствует максимуму температуры пленки перед началом взрывного вскипания 6800-6900 К. Характерное время нарастания давления при взрывном

вскипания составляет величину порядка 0,1 нс, а длительность импульса давления превышает это значение в полтора-два раза.

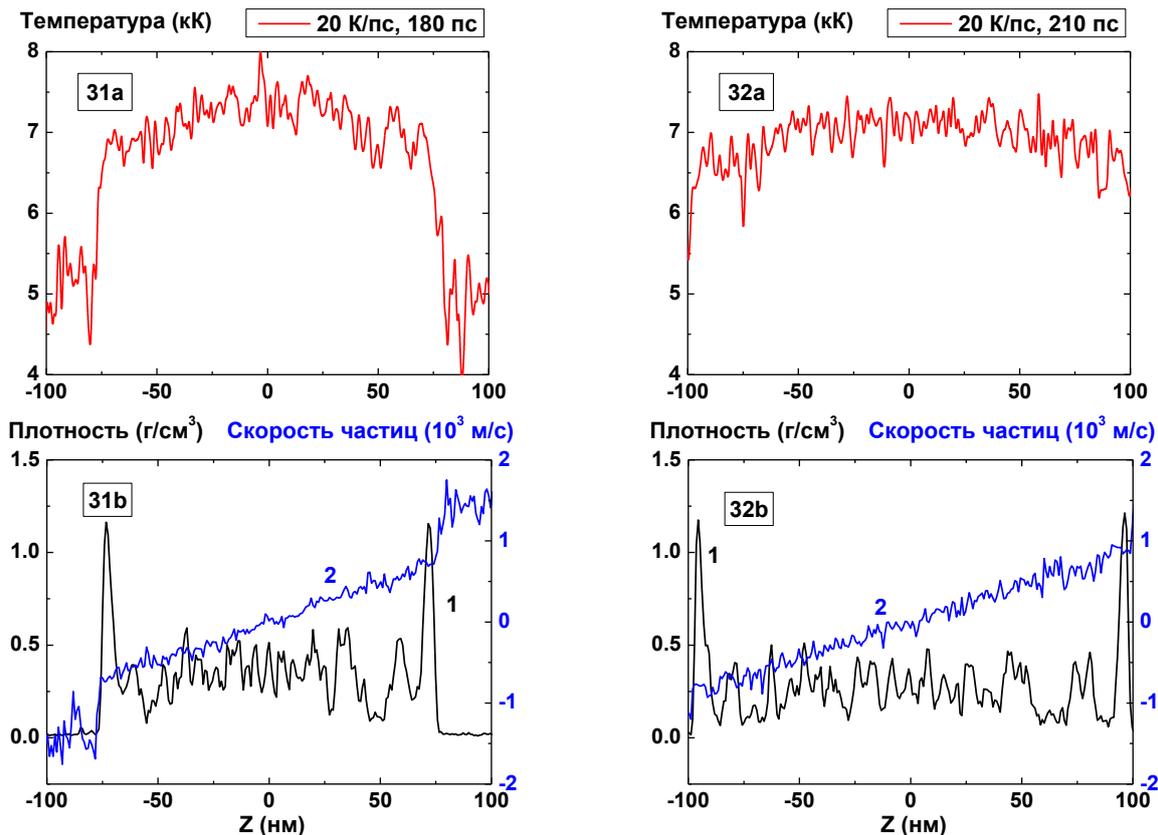


Рис. 31-32: Пространственные распределения температуры (31а-32а), плотности (31b-32b, кривая 1) и скорости частиц (31b-32b, кривая 2) в пленке в моменты времени 180, 210 пс при нагреве со скоростью 20 К/пс

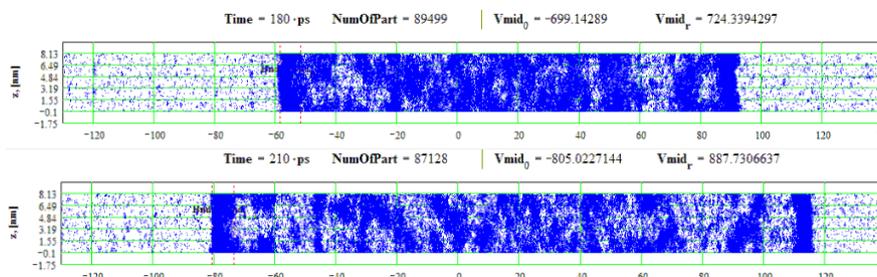


Рис. 33-34: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 180, 210 пс при нагреве со скоростью 20 К/пс

Заметим, что по причине стохастической природы процесса взрывного вскипания, связанного с неустойчивым развитием термодинамических флуктуаций, при одной и той же скорости нагрева могут наблюдаться различающиеся картины взрывного распада, из-за флуктуационного различия в начальных состояниях. В работе [5] это различие в случае нагрева со скоростью 4 К/пс приводило к распаду пленки не на два, а на три фрагмента, причем дополнительный фрагмент был значительно тоньше остальных и располагался примерно в середине паровой полости.

Дальнейшее повышение скорости нагрева до 8 К/пс приводило к более сложной многосвязной картине распределения плотности нагреваемой пленки после ее взрывного вскипания (рис. 19-26).

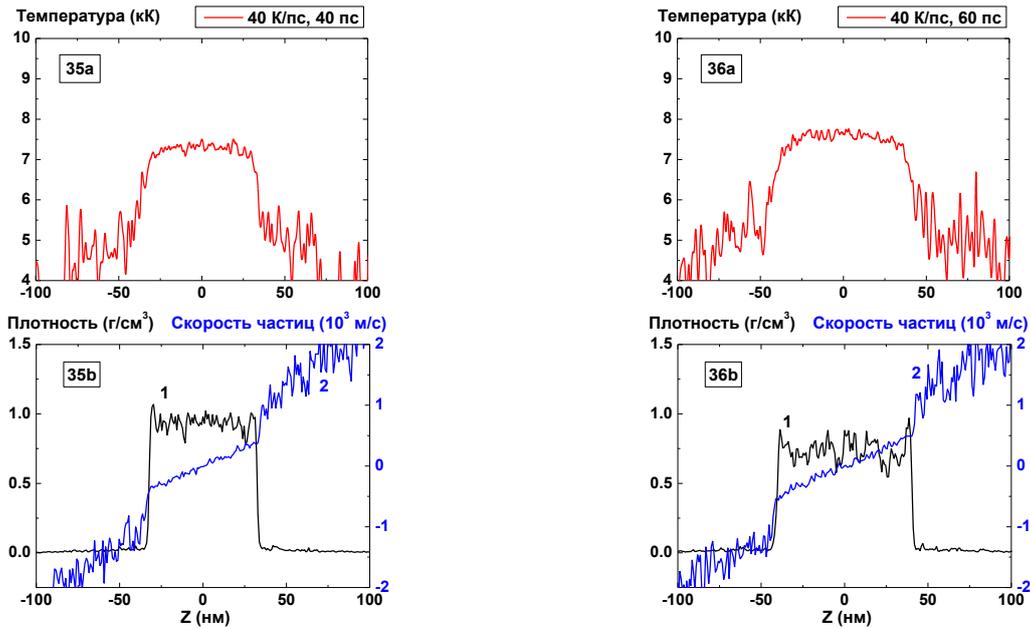


Рис. 35-36: Пространственные распределения температуры (35a-36a), плотности (35b-36b, кривая 1) и скорости частиц (35b-36b, кривая 2) в пленке в моменты времени 40, 60 пс при нагреве со скоростью 40 К/пс

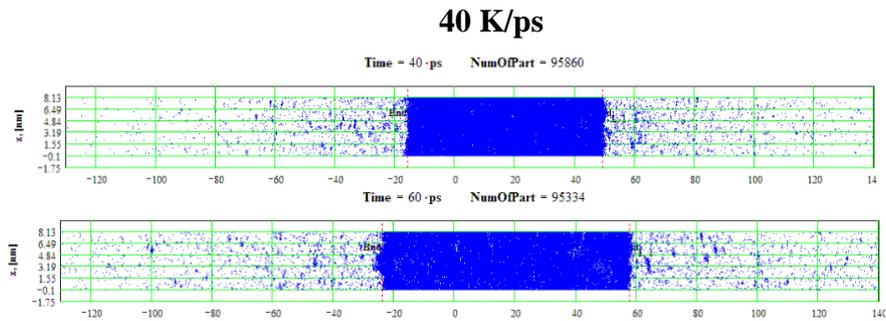


Рис. 37-38: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 40, 60 пс при нагреве со скоростью 40 К/пс

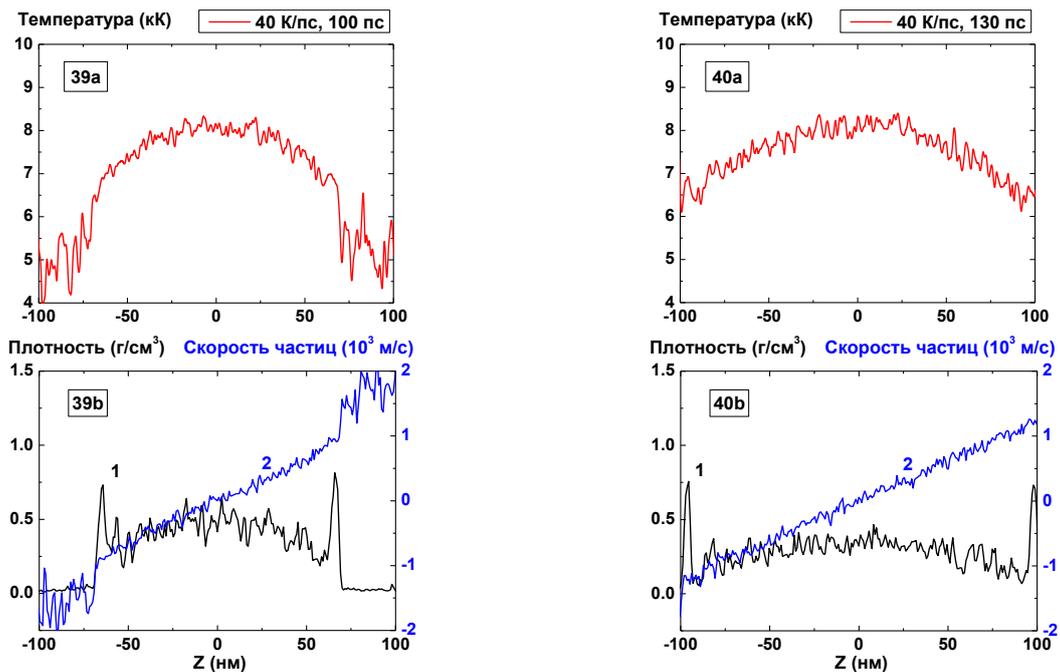


Рис. 39-40: Пространственные распределения температуры (39a-40a), плотности (39b-40b, кривая 1) и скорости частиц (39b-40b, кривая 2) в пленке в моменты времени 100, 130 пс при нагреве со скоростью 40 К/пс

### 40 K/ps

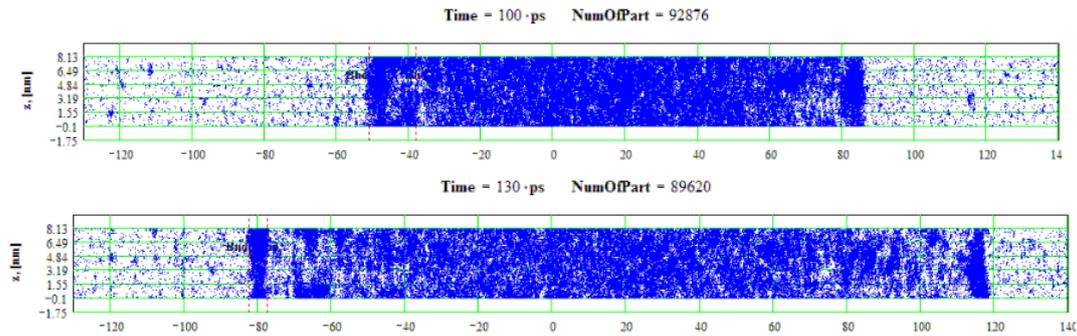


Рис. 41-42: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 100, 130 пс при нагреве со скоростью 40 К/пс

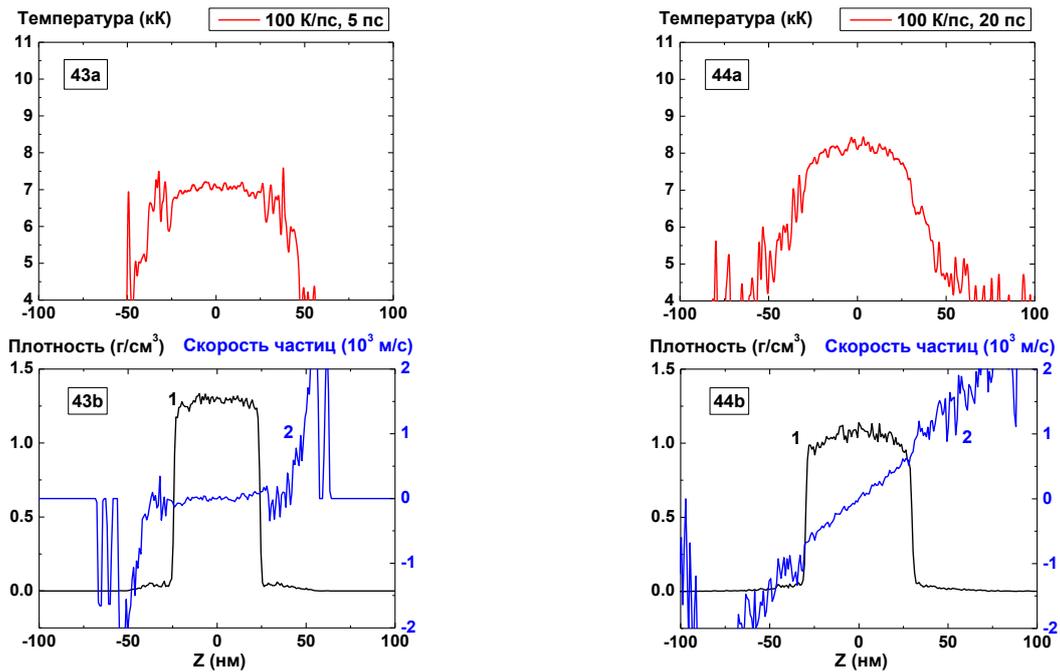


Рис. 43-44: Пространственные распределения температуры (43а-44а), плотности (43б-44б, кривая 1) и скорости частиц (43б-44б, кривая 2) в пленке в моменты времени 5, 20 пс при нагреве со скоростью 100 К/пс

### 100 K/ps

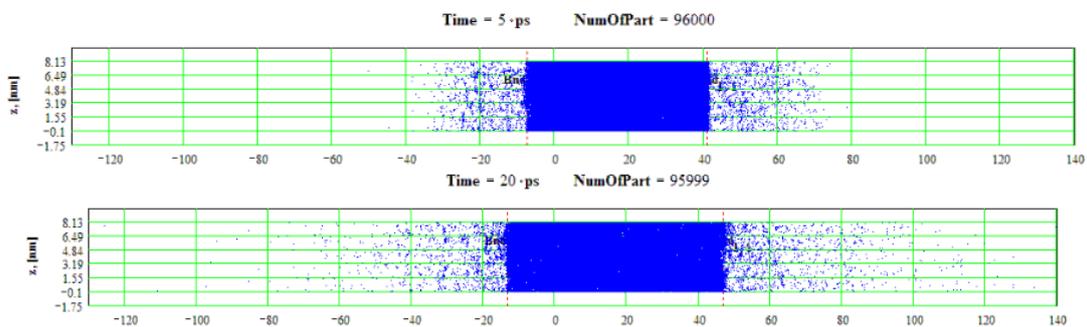


Рис. 45-46: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 5, 20 пс при нагреве со скоростью 100 К/пс

Начало взрывного распада пленки (180 пс) при  $T = 7000$  К, когда флуктуирующая плотность достигает значения  $0.7$  г/см<sup>2</sup>, смещается к более ранним временам в сравнении со случаем распада на два фрагмента (300 пс для 4 К/пс). При этом вогнутый профиль плотности пленки становится более широким вследствие увеличения количества больших флуктуаций, являющихся затравками для формирования фрагментов разлетающейся пленки.

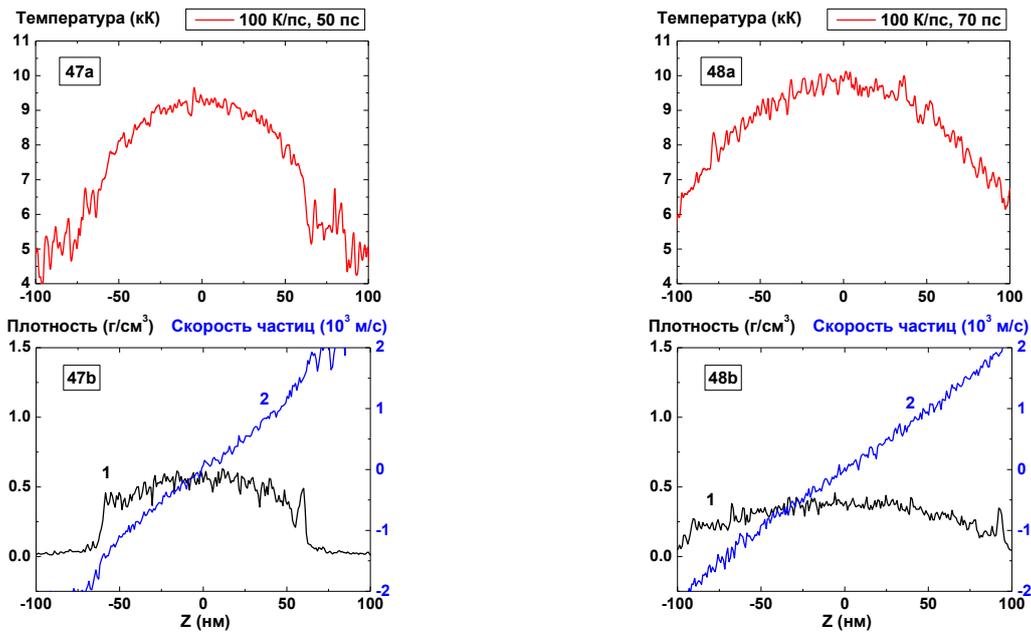


Рис. 47-48: Пространственные распределения температуры (47а-48а), плотности (47б-48б, кривая 1) и скорости частиц (47б-48б, кривая 2) в пленке в моменты времени 50, 70 пс при нагреве со скоростью 100 К/пс

### 100 К/пс

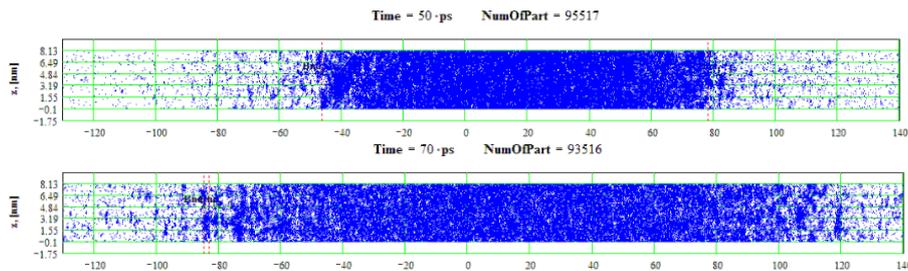


Рис. 49-50: Пространственные распределения частиц пленки в моменты времени 50, 70 пс при нагреве со скоростью 100 К/пс

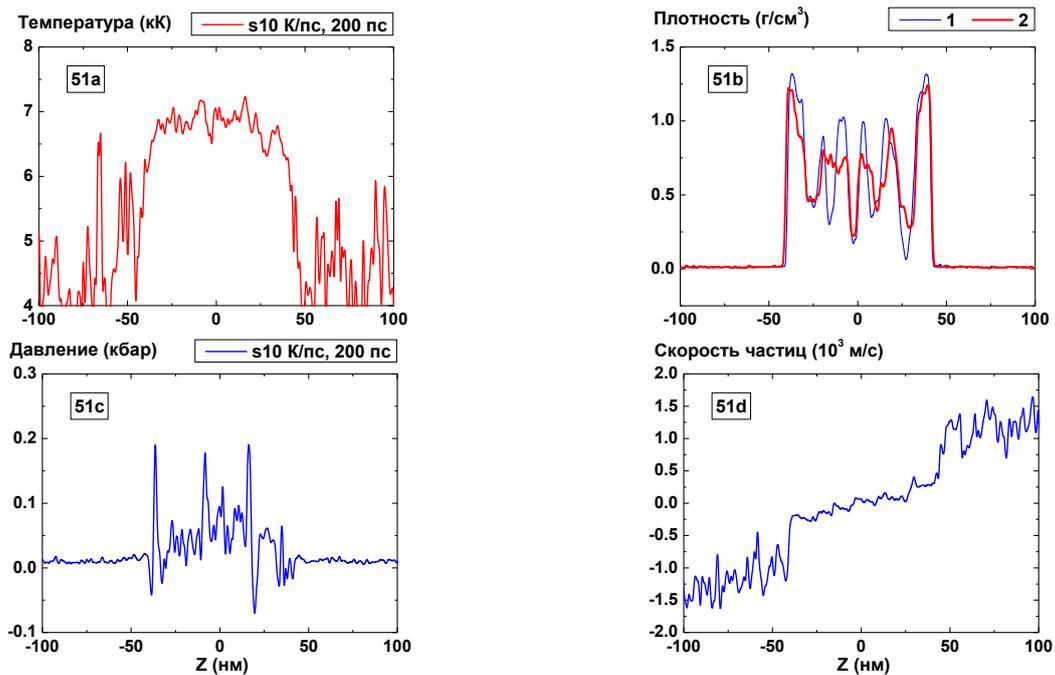


Рис. 51: Пространственные распределения температуры (51а), плотности (51б, кривая 1), давления (51с) и скорости частиц (51д) в пленке в момент времени 200 пс при нагреве со скоростью 10 К/пс и остановкой нагрева при  $t = 160$  пс. На Рис. 51б

также представлено распределение плотности в случае нагрева без остановки (кривая 2)

### 10K/ps, stop

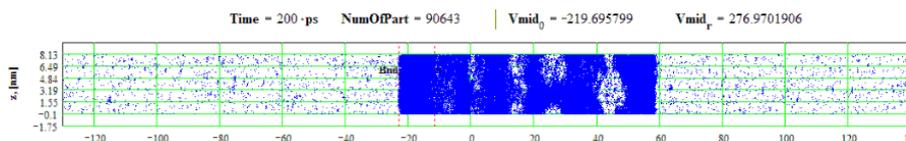


Рис. 52: Пространственное распределение частиц пленки в момент времени 200 пс при скорости нагрева 10 К/пс и отключением нагрева в момент времени  $t = 160$  пс

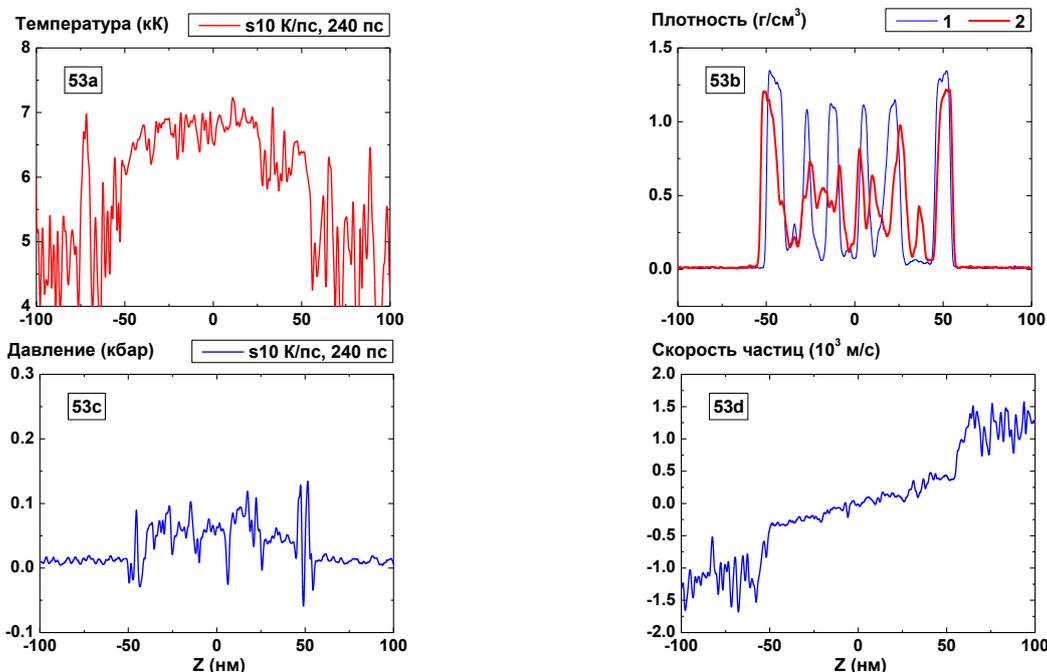


Рис. 53: Пространственные распределения температуры (53а), плотности (53б, кривая 1), давления (53с) и скорости частиц (53д) в пленке в момент времени 240 пс при нагреве со скоростью 10 К/пс и остановкой нагрева при  $t = 160$  пс. На Рис. 53б также представлено распределение плотности в случае нагрева без остановки (кривая 2)

### 10K/ps, stop

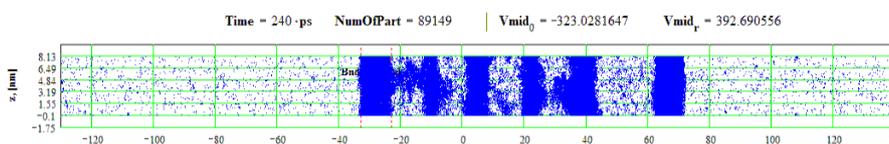


Рис. 54: Пространственное распределение частиц пленки в момент времени 240 пс при скорости нагрева 10 К/пс и отключением нагрева в момент времени  $t = 160$  пс

Появление таких флуктуаций приводит к понижению средней плотности пленки и, несмотря на испарение материала, к относительному увеличению ее толщины, которое видно на рис. 19-23, 25, пленки. Аналогичная эволюция наблюдается и при скорости нагрева 10 К/пс, однако количество фрагментов при этом увеличивается.

Отметим, что нагрев пленки касался только ее конденсированной части, в то время как источник нагрева не действовал в паровой фазе при всех ее плотностях не превышающих уровня 0.3 от максимального значения плотности конденсированной фазы в данной конфигурации.

Заметное изменение режима распада пленки по сравнению с описанным выше процессом взрывного вскипания наблюдается при увеличении скорости нагрева до 20 К/пс (Рис. 27-34). Вместо отдельных четких фрагментов пленка распадается первоначально на квазиоднородную среду с относительно большими флуктуациями плотности (Рис. 33-34). Вогнутый профиль плотности заметен только на начальном этапе (Рис. 27), а в последующие моменты от него остается только два четко выраженных уплотненных слоя на границах пленки.

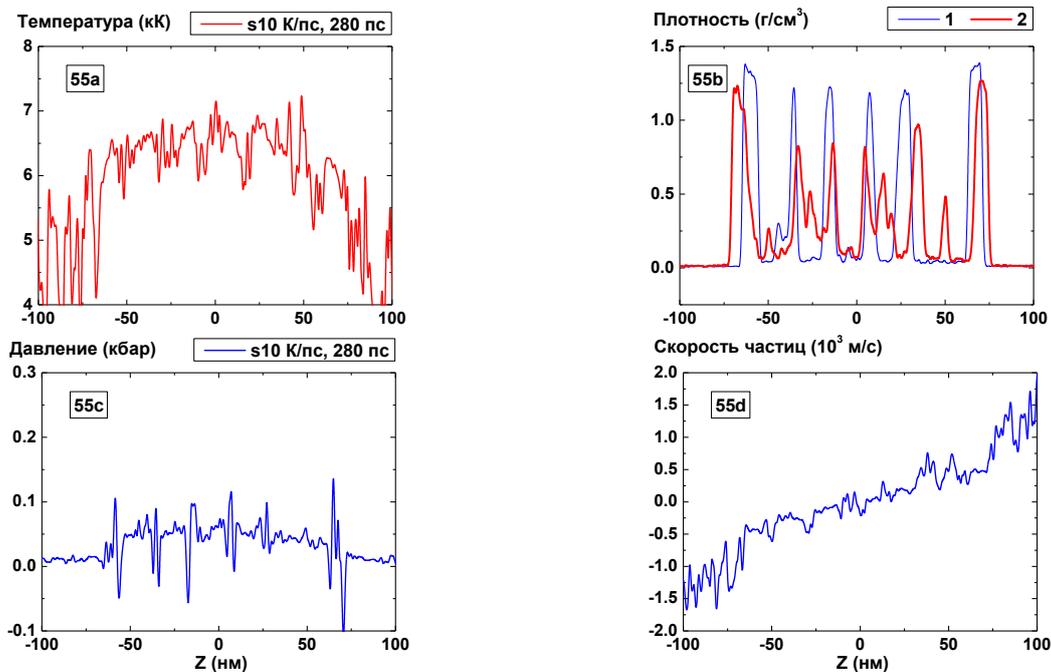


Рис. 55: Пространственные распределения температуры (55a), плотности (55b, кривая 1), давления (55c) и скорости частиц (55d) в пленке в момент времени 280 пс при нагреве со скоростью 10 К/пс и остановкой нагрева при  $t = 160$  пс. На Рис. 55b также представлено распределение плотности в случае нагрева без остановки (кривая 2)

### 10K/ps, stop

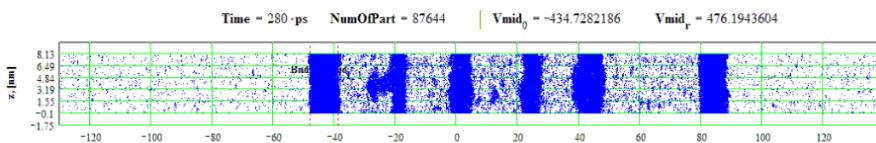


Рис. 56: Пространственное распределение частиц пленки в момент времени 280 пс при скорости нагрева 10 К/пс и отключением нагрева в момент времени  $t = 160$  пс

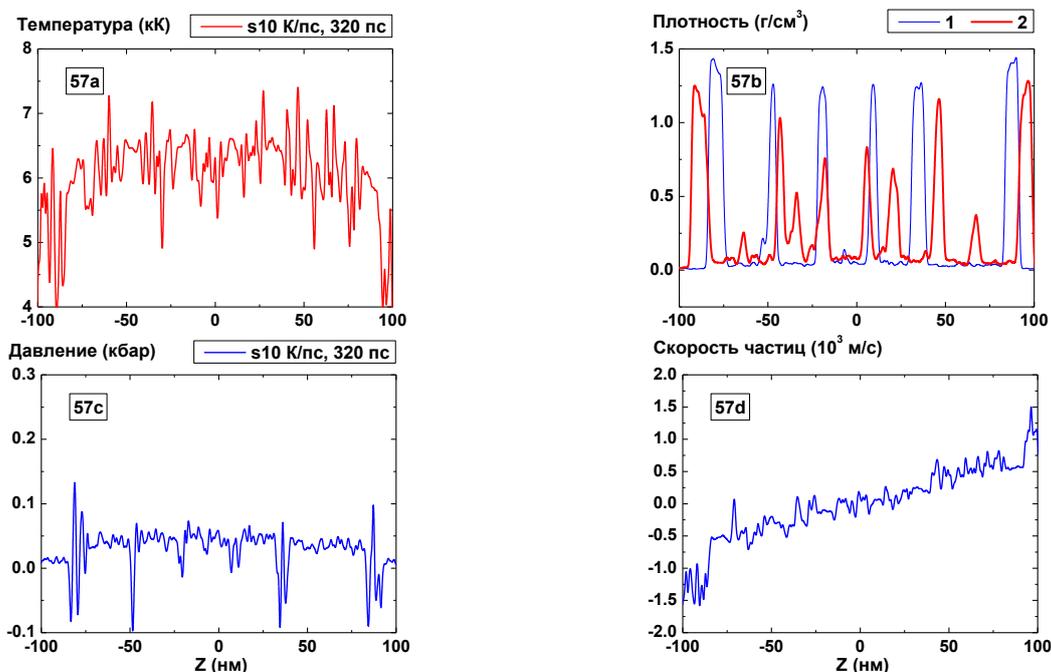


Рис. 57: Пространственные распределения температуры (57a), плотности (57b, кривая 1), давления (57c) и скорости частиц (57d) в пленке в момент времени 320 пс при нагреве со скоростью 10 К/пс и остановкой нагрева при  $t = 160$  пс. На Рис. 57b также представлено распределение плотности в случае нагрева без

остановки (кривая 2)

### 10K/ps, stop

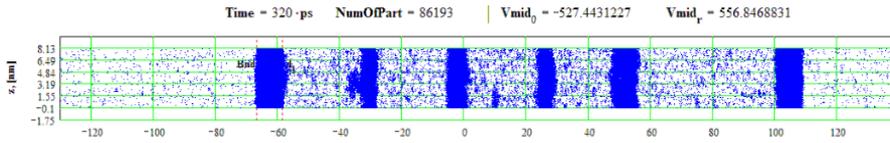


Рис. 58: Пространственное распределение частиц пленки в момент времени 320 пс при скорости нагрева 10 К/пс и отключением нагрева в момент времени  $t = 160$  пс

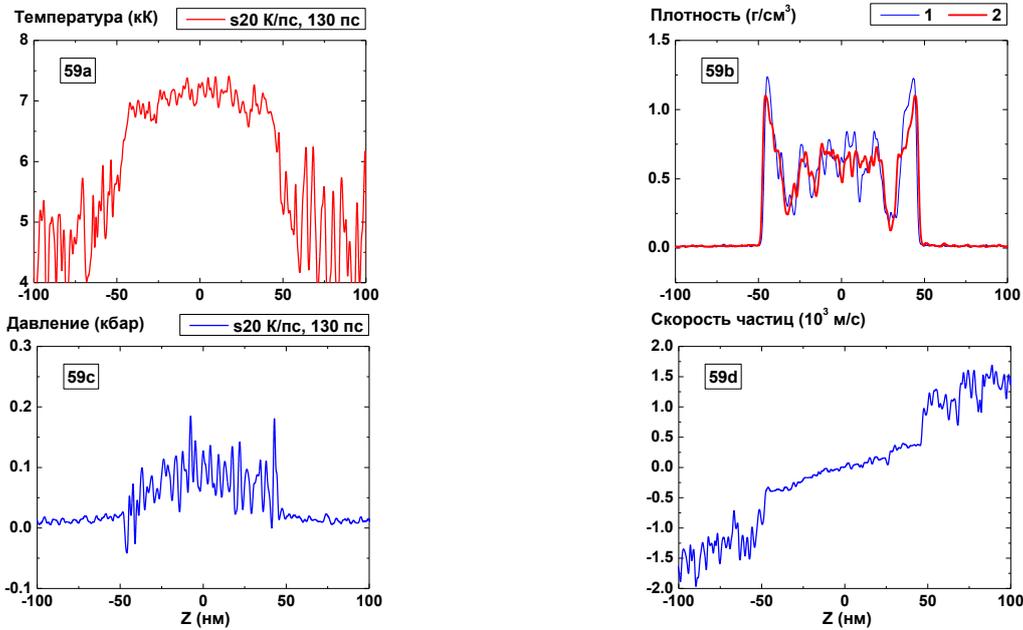


Рис. 59: Пространственные распределения температуры (59a), плотности (59b, кривая 1), давления (59c) и скорости частиц (59d) в пленке в момент времени 130 пс при нагреве со скоростью 20 К/пс и остановкой нагрева при  $t = 100$  пс. На Рис. 59b также представлено распределение плотности в случае нагрева без остановки (кривая 2)

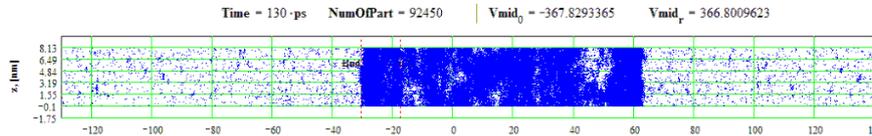


Рис. 60: Пространственное распределение частиц пленки в момент времени 130 пс при скорости нагрева 20 К/пс и отключением нагрева в момент времени  $t = 100$  пс

Распределение скорости частиц пленки заметно отличается от горизонтального уже при 50 пс, что свидетельствует о начале ее расширения при температуре  $\sim 7000$  К. На Рис. 28 температура пленки приближается к критической, но плотность остается еще несколько выше ее критического значения; скорости частиц пленки, характеризующие ее разлет, увеличиваются (наклон кривой скорости на Рис. 28б увеличивается).

Из этого же рисунка видно, как начинают формироваться упомянутые выше скачки плотности на границах пленки, где температура остается заметно ниже критической. Эти скачки, фактически, получаются в результате эволюции вогнутого профиля пленки, обусловленного поверхностным испарением.

Подобные скачки сохраняются и при увеличении скорости нагрева до 40 К/пс (Рис. 35-42), когда температура пленки достигает критического значения уже к 60 пс, и из-за быстрого нагрева начинает проявляться эффект инерционного удержания, в результате которого распределение плотности пленки вместо вогнутого оказывается выпуклым (за исключением краевых эффектов). Относительный разброс флуктуаций плотности в этом режиме уменьшается по сравнению с более медленными режимами нагрева, при которых происходит явно выраженный фазовый переход.

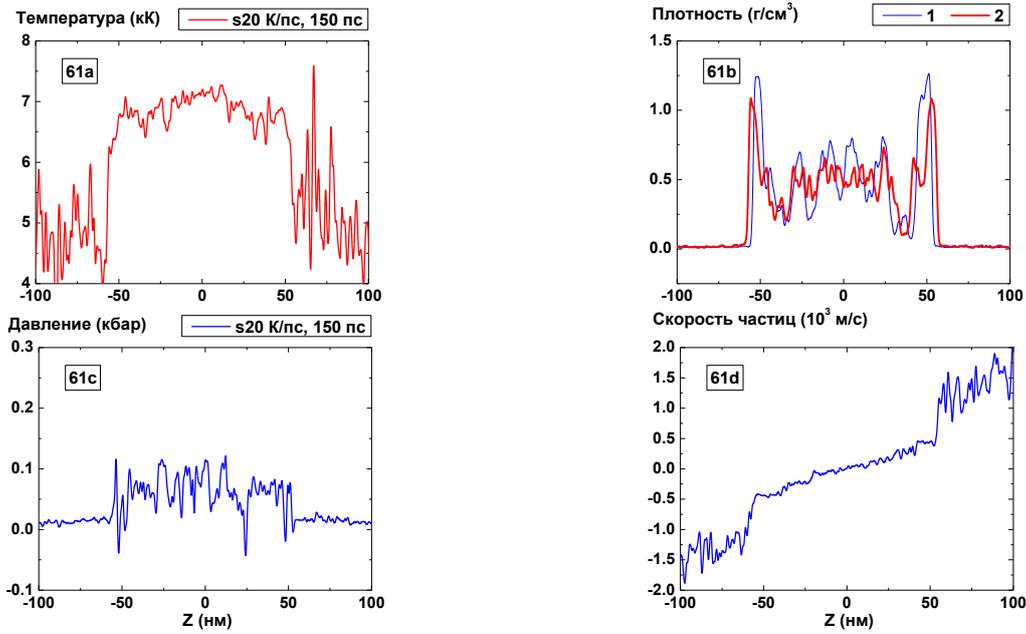


Рис. 61: Пространственные распределения температуры (61a), плотности (61b, кривая 1), давления (61c) и скорости частиц (61d) в пленке в момент времени 150 пс при нагреве со скоростью 20 К/пс и остановкой нагрева при  $t = 100$  пс. На Рис. 61b также представлено распределение плотности в случае нагрева без остановки (кривая 2)

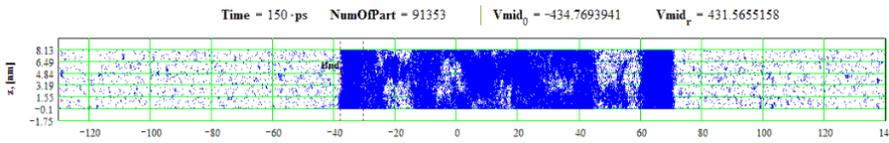


Рис. 62: Пространственное распределение частиц пленки в момент времени 150 пс при скорости нагрева 20 К/пс и отключением нагрева в момент времени  $t = 100$  пс

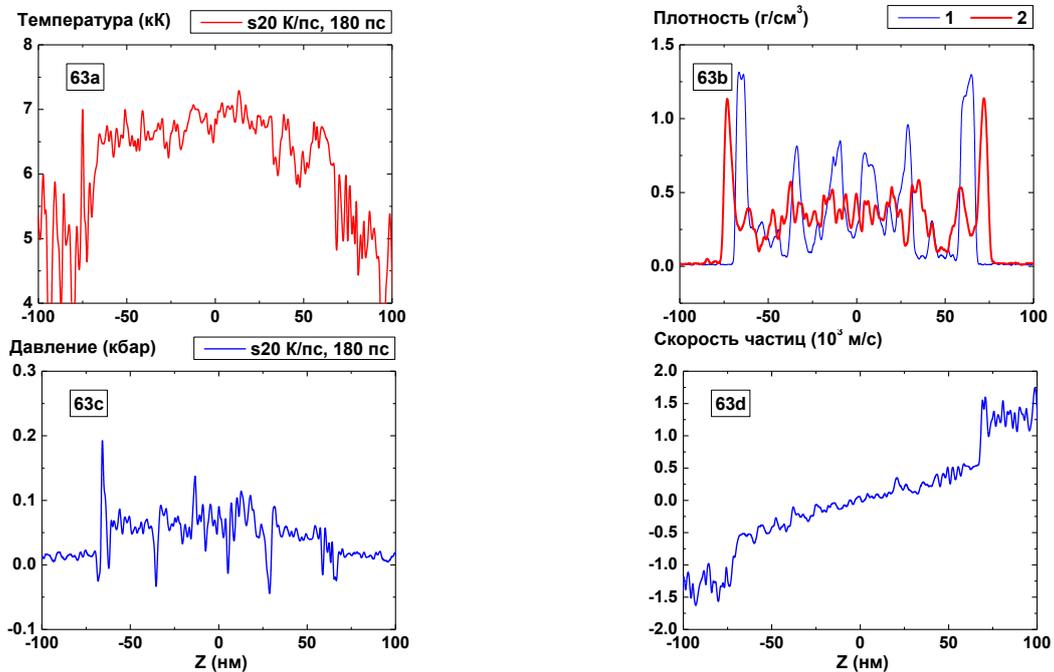


Рис. 63: Пространственные распределения температуры (63a), плотности (63b, кривая 1), давления (63c) и скорости частиц (63d) в пленке в момент времени 180 пс при нагреве со скоростью 20 К/пс и остановкой нагрева при  $t = 100$  пс. На Рис. 63b также представлено распределение плотности в случае нагрева без остановки (кривая 2)

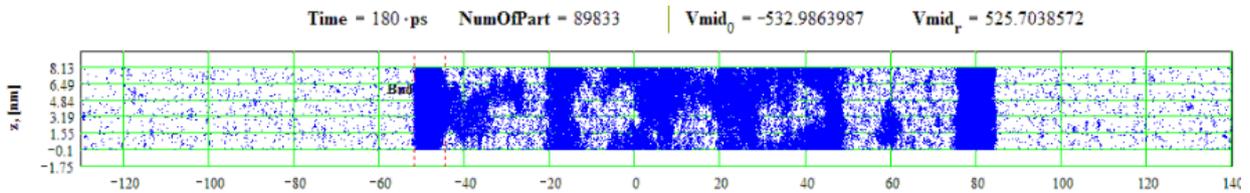


Рис. 64: Пространственное распределение частиц пленки в момент времени 180 пс при скорости нагрева 20 К/пс и отключением нагрева в момент времени  $t = 100$  пс

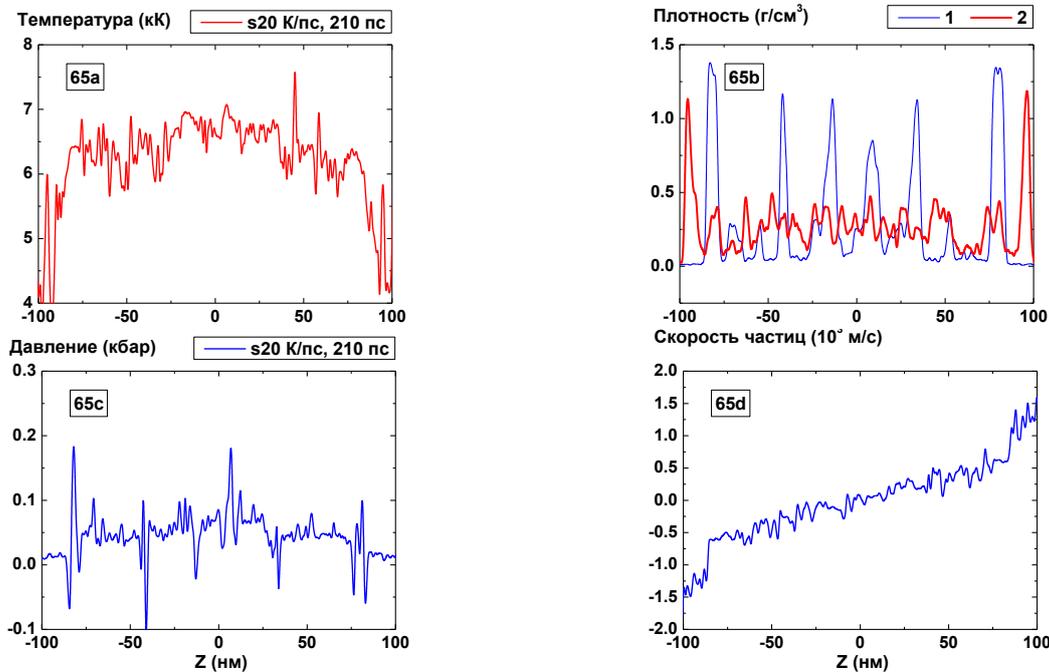


Рис. 65: Пространственные распределения температуры (65а), плотности (65b, кривая 1), давления (65с) и скорости частиц (65d) в пленке в момент времени 210 пс при нагреве со скоростью 20 К/пс и остановкой нагрева при  $t = 100$  пс. На Рис. 65b также представлено распределение плотности в случае нагрева без остановки (кривая 2)

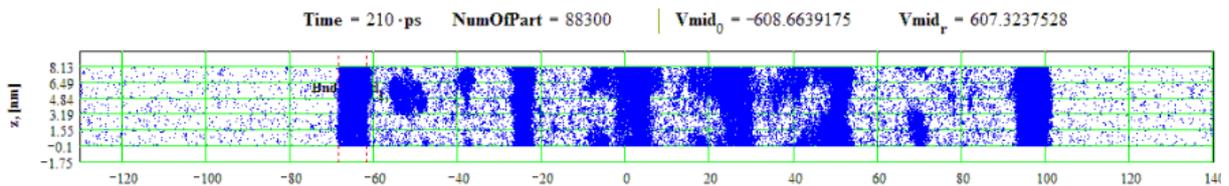


Рис. 66: Пространственное распределение частиц пленки в момент времени 210 пс при скорости нагрева 20 К/пс и отключением нагрева в момент времени  $t = 100$  пс

Разброс флуктуаций плотности становится еще меньше при скорости нагрева 100 К/пс (Рис. 43-50), когда температура пленки превышает критическую уже к 10 пс, а к 20 пс (Рис. 44) составляет примерно 8300 К при выпуклом профиле плотности и большом наклоне кривой распределения скоростей частиц пленки. Этот режим, в последующие времена, соответствует разлету закритического флюида, первоначальная толщина которого в виде конденсированной фазы составляла 48 нм. Повышенный градиент плотности вблизи краев этого разлетающегося слоя еще заметен на Рис. 47, однако краевые пики плотности, характерные для режимов 20 и 40 К/пс, здесь уже почти не заметны.

Как уже отмечалось во введении, картина процесса неравновесного фазового превращения существенно зависит от условий его реализации. Подобная зависимость от скорости нагрева продемонстрирована выше в диапазоне 2-100 К/пс.

Зависимость от длительности нагрева в рассматриваемых условиях иллюстрируют Рис.

51-67. Эволюция температуры, плотности, давления и распределение скоростей частиц в расчетной области, а также двумерная картина плотности показаны на рис. 51-58 в моменты времени 200, 240, 280, 320 пс в случае нагрева со скоростью 10 К/пс, которая выключается в момент  $t = 160$  пс. На кривую распределения плотности (рис. 51б, 53б, 55б, 57б) наложено распределение плотности для того же момента времени при продолжающемся нагреве. Аналогичные данные приведены на рис. 59-66 для моментов времени 130, 150, 180, 210 пс в случае нагрева со скоростью 20 К/пс, выключаемого при  $t = 100$  пс.

Основное отличие эволюции после выключения нагрева, по сравнению со случаем его продолжения, можно описать как переход траектории эволюции в область относительно меньшей неравновесности из-за уменьшения температуры. По этой причине в распределении плотности появляются участки с более резкими границами, хотя количество фрагментов при этом практически не меняется. Упорядочение образующихся фрагментов связано, по-видимому, с акустическими процессами в пленке на начальной стадии ее нагрева, т.е. с резким включением источника нагрева.

При скорости нагрева 4 К/пс его выключение в момент  $t = 180$  пс исключало возможность взрывного вскипания в исследуемом интервале времени до 730 пс, хотя пленка продолжала оставаться в перегретом метастабильном состоянии, поскольку давление в ней было ниже давления ее насыщенного пара из-за процесса поверхностного испарения.

## Выводы

Результаты приведенных выше исследований позволяют выделить четыре режима поведения пленки в условиях ее быстрого объемного субнаносекундного нагрева. При относительно медленном нагреве от начального состояния с равновесной температурой 6400 К в области времен до 0.8 нс наблюдается только поверхностное испарение пленки, которое стабилизирует ее максимальную температуру на уровне 6800 К. Увеличение скорости нагрева до 4 К/пс приводит к взрывному (объемному) вскипанию пленки примерно в момент  $t = 300$  пс с образованием двух ее фрагментов и растущей паровой полости между ними. Переход к диапазону нагрева 8-10 К/пс приводит к увеличению амплитуды и количества флуктуаций плотности перед началом образования паровой полости. В результате этого возрастает число фрагментов в процессе объемного вскипания, которое быстро растет с увеличением скорости нагрева. Такое поведение может быть связано с переходом от взрывного вскипания к спиноподобному распаду, который уже явно наблюдается при 20 К/пс, когда индивидуальные зародыши новой фазы уже практически неразличимы на фоне их общей совокупности. Отличительной особенностью режима спиноподобного распада является также сглаживание межфазных границ, которые становятся менее резкими по сравнению со случаем взрывного вскипания.

Верхняя граница для этого режима проявляется как уменьшение амплитуды флуктуаций плотности. В области сверхкритического разлета, наблюдаемой при скоростях нагрева 40 и 100 К/пс, флуктуации скорости относительно малы, что согласуется с режимом разлета сжатого неидеального флюидного состояния, в котором признаки двухфазности системы практически отсутствуют. Исключением являются пики (скачки) плотности на границах расширяющегося флюида, которые связаны с начальным этапом поверхностного испарения и с возможностью длительного существования квазистационарного состояния пленки с балансом подводимой энергии и затрат на поверхностное испарение.

Описанные выше особенности динамики неравновесного фазового превращения согласуются с эволюцией состояния пленки после прекращения ее нагрева, которая происходит при относительно меньшей степени неравновесности по сравнению со случаем продолжающегося нагрева пленки.

Для получения более точных количественных характеристик поведения давления в пленке при различных режимах ее испарения и соотнесения величин максимального давления в процессах взрывного вскипания и спиноподобного распада с критическим давлением требуются дальнейшие исследования.

Работа частично поддержана грантом РФФИ №13-02-01129а.

### Литература

- [1] L.V. Zhigilei, Z. Lin and D.S. Ivanov, “Atomistic modeling of short pulse laser ablation of metals: connections between melting, spallation, and phase explosion”, *J. Phys. Chem. C*, **113**, 11892-11906 (2009).
- [2] P. Lorazo, L.J. Lewis, M. Meunier, “Thermodynamic pathways to melting, ablation, and solidification in absorbing solids under pulsed laser irradiation”, *Physical Review B*, **73**, 134108 (2006).
- [3] S.I. Anisimov, V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, K. Nishihara, A.M. Oparin and Yu.V. Petrov, “Destruction of a solid film under the action of ultrashort laser pulse”, *JETP Lett.*, **77**, 606-610 (2003).
- [4] G.E. Norman, S.V. Strarikov and V.V. Stegailov, “Atomistic simulation of laser ablation of gold: effect of pressure relaxation”, *JETP*, **114**, 792-800 (2012).
- [5] V.I. Mazhukin, A.V. Shapranov, A.A. Samokhin, A.Yu. Ivochkin Mathematical modeling of non-equilibrium phase transition in rapidly heated thin liquid film // *Mathematica Montisnigri*, V. 27, 65 – 90, (2013)
- [6] T.H. Yang and C. Pan, “Molecular dynamics simulation of a thin water layer evaporation and evaporation coefficient”, *Intern. Journ. of Heat and Mass Transfer*, **48**, 3516-3526 (2005).