

Взрывное вскипание металлов под действием наносекундного лазерного импульса

В.И.Мажукин, А.А.Самохин, М.М.Демин, А.В.Шапранов

В рамках численного молекулярно-динамического моделирования совместно с континуальным описанием системы электронов проводимости обнаружен эффект повторяющихся взрывных вскипаний при воздействии наносекундного лазерного импульса на металл. Этот эффект может быть использован, например, в качестве маркера, обозначающего приближение к области критических параметров облучаемого вещества.

Ключевые слова: наносекундное лазерное воздействие, взрывное вскипание, металлы, критические параметры.

Взрывное (объемное) вскипание характерно для случаев быстрого объемного энерговыделения в конденсированной среде, когда основную роль в образовании паровой фазы играет спонтанная гомогенная нуклеация в перегретой метастабильной жидкости [1]. В отличие от поглощающих диэлектрических жидкостей, реализация взрывного вскипания металла при лазерном воздействии осложняется большими значениями коэффициентов температуропроводности и поглощения, из-за чего, в частности, вопрос об экспериментальном наблюдении этого эффекта до настоящего времени остается фактически открытым, хотя его роль в околоскритическом неравновесном поведении вещества отмечалась неоднократно (см., напр., [2–5] и цитированную там литературу). В настоящей работе с помощью численного молекулярно-динамического моделирования показана возможность реализации режима с повторяющимися взрывными вскипаниями при наносекундном лазерном воздействии на металлы, в частности на алюминий.

Расчеты проводились для пленки, содержащей 500 тыс. атомов, толщиной 417 нм по оси x со свободными поверхностями и периодическими (период 6.43 нм) граничными условиями по осям z , y ; облучалась правая поверхность образца. Расчетная область по оси x составляла 866 нм. Частицы, достигавшие границ этой области, удалялись из расчета. Общая методика расчета аналогична известной комбинированной двухтемпературной модели [5–7]; детали молекулярно-динамических расчетов изложены также в [8–10].

Вычисления выполнены на суперкомпьютере К-100 ИПМ РАН с использованием самостоятельно разработанного параллельного кода для гибридных систем, включающих процессоры и графические ускорители. В коде реализованы широко применяемые алгоритмы [11]

В.И.Мажукин, М.М.Демин, А.В.Шапранов. Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, Россия, 125047 Москва, Мусская пл., 4; e-mail: shap@spnet.ru
А.А.Самохин. Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН, Россия, 119991 Москва, ул. Вавилова 38

Поступило в редакцию 22 января 2014 г.; после доработки – 3 марта 2014 г.

пространственной декомпозиции области с разбиением на подобласти с границами, перпендикулярными продольной оси мишени, автоматическая балансировка между этими подобластями, построение списка соседей для короткодействующего ЕАМ-потенциала [12]. Время расчета одного варианта на 12 графических процессорах составило в среднем 35 ч. В рассматриваемом случае коэффициент поглощения $\alpha \sim 8 \times 10^5 \text{ см}^{-1}$, что при интенсивности падающего излучения $I > 1.5 \times 10^8 \text{ Вт/см}^2$ и поглощательной способности облучаемой поверхности $A = 0.22$ обеспечивало скорость энерговыделения $\alpha AI > 10^{13} \text{ Вт/см}^3$. При меньших интенсивностях испарение за все время моделирования носило поверхностный характер, подобно тому, как это описано в работах [6, 7]. Для сокращения времени счета начальное равновесное состояние пленки выбиралось при достаточно большой температуре $T = 0.84T_{\text{cr}} \approx 6400 \text{ К}$, которой соответствует давление насыщения $P = 486 \text{ бар}$. В рамках данной модели критические параметры для алюминия составляют: $T_{\text{cr}} = 7600 \text{ К}$, $P_{\text{cr}} = 1400 \text{ бар}$, $\rho_{\text{cr}} = 0.48 \text{ г/см}^3$.

При $I = 2 \times 10^8 \text{ Вт/см}^2$ первое взрывное вскипание наблюдалось в момент $t = 0.710 \text{ нс}$ после начала нагрева, и этот процесс затем повторялся при $t = 1.17$ и 1.50 нс , а при $t = 1.80 \text{ нс}$ наблюдался «сдвоенный» взрыв с почти одновременным образованием двух фрагментов. Перед началом каждого вскипания вблизи облучаемой поверхности наблюдался заметный рост флуктуаций плотности в конденсированной фазе, при этом максимальная температура колебалась вблизи 7000–7100 К, немного увеличиваясь со временем. Счет данного варианта продолжался до $t = 1.96 \text{ нс}$. Различие между электронной температурой T_e и ионной T_i в рассматриваемом диапазоне воздействия является незначительным и сравнимо с величиной флуктуаций температуры ионов, определяемой в рамках метода молекулярной динамики.

На рис.1 показаны распределения температуры и плотности пленки и ее фрагментов в различные моменты времени (0.80, 1.40 и 1.92 нс) соответственно после первого, второго и четвертого-пятого вскипаний. Из результатов расчетов видно, что плотность отделившегося фрагмента через некоторое время проходит через максимум, заметно превышающий ее начальное значение в момент отлета, совпадающее с плотностью на правой поверхности

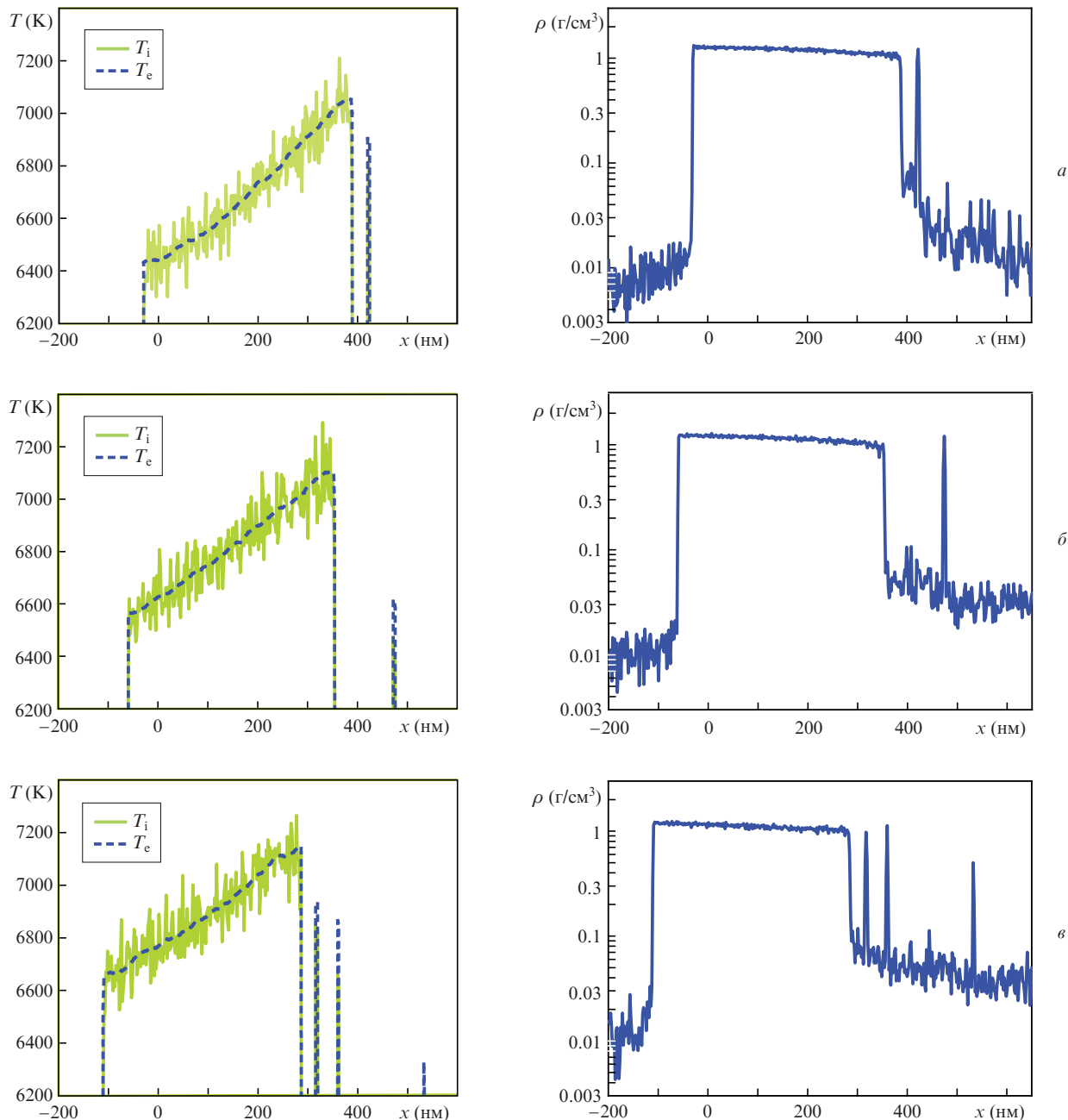


Рис.1. Распределения температуры (слева) и плотности (справа) в образце и расчетной области в моменты времени 0.80 (а), 1.40 (б) и 1.92 нс (в) после начала догрева образца. Излучение падает справа.

сти пленки. Такое поведение обусловлено понижением температуры фрагмента из-за изменения соотношения между поглощаемой фрагментом энергии и затратами на испарение. Увеличению плотности способствует также повышение давления на начальном этапе взрывного вскипания. Дальнейшее уменьшение плотности связано уже с нарушениями сплошности отделившегося слоя в основном из-за его общего истончения, поскольку характерные для процесса испарения неустойчивости [13] за столь короткие времена не успевают проявиться. Подчеркнем, что отрыв фрагмента от основной массы материала происходит за счет вскипания и образования полости с повышенным давлением, а не за счет инерции и отрицательного давления, которое возникает в волне разгрузки в результате воздействия более коротких лазерных импульсов и активно исследуется в последние годы [5].

Распределение температуры по толщине пленки примерно соответствует случаю квазистационарного испарения с учетом конечной толщины пленки, которая сравнима с характерной протяженностью температурного профиля в полупространстве, определяемой отношением χ/v , где χ – температуропроводность и v – скорость движения фронта испарения по материалу пленки [4]. Близость к стационарному режиму согласуется с фактом существенной зависимости момента первого вскипания t_1 от падающей интенсивности – в случае $I = 1.75 \times 10^8$ Вт/см² время t_1 возрастает до 1.04 нс против 0.71 нс при $I = 2 \times 10^8$ Вт/см².

При больших значениях безразмерного параметра ($\alpha\chi/v \gg 1$) величина температурного максимума, локализованного на длине поглощения под облучаемой поверхностью, оказывается малой, что в совокупности с близостью этого максимума к поверхности может значительно

ослабить проявление эффекта взрывного вскипания металла под действием лазерного излучения. Уменьшение температурного максимума происходит также из-за уменьшения теплоты испарения по мере приближения к критической температуре T_{cr} , после прохождения которой различие между конденсированной и паровой фазами исчезает. В закритическом режиме абляции взрывное вскипание как фазовый переход первого рода отсутствует.

Полученные в настоящей работы численные результаты демонстрируют, тем не менее, что этот эффект оказывается достаточно выразительным в околокритической области температур конденсированной фазы даже без учета возможного перехода металл–диэлектрик. Несмотря на относительно малую толщину отлетающего фрагмента (7 нм), скачок давления при взрывном вскипании металла превышает предшествующее ему давление отдачи за счет поверхностного испарения примерно на 30%–40%. В случае перехода металл–диэлектрик [2–4], который сопровождается уменьшением коэффициента поглощения α и температуропроводности χ , превышение максимума давления взрывного вскипания над предшествующим уровнем испарительного давления отдачи может быть больше. Увеличению перепада давления может способствовать также использование излучения с меньшим коэффициентом поглощения.

Заметим, что почти двукратный скачок давления, зарегистрированный по изменению скорости ударной волны над облучаемой мишенью, наблюдался недавно в эксперименте [14] и связывался авторами именно с взрывным вскипанием облучаемого металла. Необходимо иметь в виду, однако, что возрастание давления может быть вызвано также и появлением поглощающего плазменного слоя. Микросекундные колебания давления, связанные с возникновением плазмы над облучаемой поверхностью, наблюдались уже давно [15], однако о регистрации (суб) наносекундных пульсаций давления, обусловленных взрывным вскипанием, до сих пор, насколько нам известно, ничего не сообщалось.

Для выяснения роли различных механизмов в формировании давления отдачи требуются дальнейшие теоретические и экспериментальные исследования особенно

стей околокритического поведения металлов в условиях наносекундного лазерного воздействия. Целью таких исследований является, в том числе, и получение новой информации о критических параметрах металлов в дополнение к имеющимся и пока еще не очень хорошо определенным их значениям [5]. Результаты настоящей работы показывают, что обнаруженные в ходе численного моделирования особенности проявления взрывного вскипания могут быть использованы, например, при измерении давления отдачи, как экспериментальные маркеры, обозначающие достижение области критических параметров в условиях наносекундного лазерного воздействия на металлы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты № 13-02-01129 и 13-07-00597, 12-07-00436).

1. Скрипов В.П. *Метастабильная жидкость* (М.: Наука, 1972).
2. Батанов В.А., Бункин Ф.В., Прохоров А.М., Федоров В.Б. *ЖЭТФ*, **63**, 586 (1972).
3. Самохин А.А. *Квантовая электроника*, **1**, 2056 (1974).
4. Самохин А.А. *Труды ИОФАН СССР*, **13** (М.: Наука, 1988).
5. Wu C., Zhigilei L.V. *Appl. Phys.*, **114**, 11 (2013); DOI 10.1007/s00339-013-8086-4.
6. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Samokhin A.A., Ivochkin A.Yu. *Mathematica Montisnigri*, **27**, 65 (2013); <http://lppm3.ru/en/pub/journal>.
7. Мажукин В.И., Шапранов А.В., Самохин А.А., Ивочкин А.Ю. *Прикладная физика и математика*, № 5, 3 (2013).
8. Мажукин В.И., Шапранов А.В. Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, № 31 (М., 2012, с. 27); <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-31>.
9. Мажукин В.И., Шапранов А.В. Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, № 32 (М., 2012, с. 24); <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-32>.
10. Мажукин В.И., Шапранов А.В., Самохин А.А., Ивочкин А.Ю. *Математическое моделирование*, **26** (3), 125 (2014).
11. Brown W.M., Wang P., Plimpton S.J., Tharrington A.N. *Comp. Phys. Commun.*, **182**, 898 (2011).
12. Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K. *Appl. Surf. Sci.*, **255**, 9592 (2009).
13. Kartashov I. N., Samokhin A. A., Smurov I.Yu. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **38**, 3703 (2005).
14. Porneala C., Willis D.A. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **43**, 155503 (2009).
15. Жиряков Б.М., Попов Н.И., Самохин А.А. *ЖЭТФ*, **75**, 494 (1978).