

УДК 519.6; 536.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗРЫВНОГО ВСКИПАНИЯ ТОНКОЙ ПЛЕНКИ ПРИ ОДНОРОДНОМ СУБНАНОСЕКУНДНОМ НАГРЕВЕ

© 2014 г. *В.И. Мажукин**, *А.В. Шапранов*, *А.А. Самохин¹*, *А.Ю. Ивочкин¹*

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва

¹ Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва

* vim@modhef.ru

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, проекты № 13-02-01129, №13-07-00597.

В рамках молекулярно-динамического подхода моделируется процесс взрывного вскипания тонкой пленки в условиях однородного субнаносекундного нагрева. Результаты расчетов показывают, что в этих условиях в развитии процесса взрывного вскипания существенную роль играет поверхностное испарение, приводящее за счет испарительного охлаждения к формированию неоднородного (выпуклого) температурного профиля в однородно нагреваемой пленке.

Ключевые слова: молекулярная динамика, объемный нагрев, поверхностное испарение, взрывное вскипание.

MODELING OF THIN FILM EXPLOSIVE BOILING PROCESS DURING HOMOGENEOUS SUB-SECOND HEATING

V.I. Mazhukin, *A.V. Shapranov*, *A.A. Samokhin¹*, *A.Yu. Ivochkin¹*

Keldysh Institute of Applied Mathematics, RAS, Moscow

¹ Prokhorov General Physics Institute, RAS, Moscow

The explosive boiling process of thin film is investigated in the framework of classical molecular dynamics simulation in the case of homogeneous sub-nanosecond heating. The results of calculations show that at these conditions the surface evaporation process considerably affects the explosive boiling picture due to surface vaporization cooling and formation of non-homogeneous (convex) spatial temperature distribution in the homogeneously heated film.

Key words: molecular dynamics, volume heating, surface evaporation, explosive boiling.

1. Введение

Взрывное вскипание может возникать при быстром вложении энергии в конденсированную среду, когда реализуется достаточно глубокий заход в область метастабильной фазы перегретой жидкости. Распад такой фазы и образование пара при достижении в жидкости температуры предельного перегрева (спинодали) происходит достаточно быстро и сопровождается резким ростом давления, чем и определяется название данного процесса.

Существенную роль при этом играют условия эксперимента. При равномерном объемном нагреве и давлениях ниже критического распад метастабильной фазы может происходить по всему нагреваемому объему за счет случайного образования сферических зародышей новой фазы. Иная ситуация реализуется при наличии температурной неоднородности, обусловленной, в частности, наличием свободных поверхностей, температура которых снижается за счет испарительного охлаждения, как это имеет место, например, при определенных режимах импульсного лазерного нагрева поглощающих сред (см., напр., [1, 2]).

Необходимо подчеркнуть, что в режиме взрывного вскипания образование полости происходит в области положительных значений давления – в отличие от случая откола, который начинает развиваться в области отрицательных давлений, возникающих при выходе сильной ударной волны на свободную поверхность или при непосредственном воздействии на поверхность очень короткого лазерного импульса, обеспечивающего в зоне откола большие величины отрицательного давления за счет термоакустического эффекта. Расширение полости и последующий отлет тонкого приповерхностного слоя материала при отколе происходит за счет сил инерции, тогда как в случае взрывного вскипания определяющую роль играет повышение давления в полости, возникающей из-за гомогенной нуклеации в перегретой фазе.

Разумеется, эти две ситуации соответствуют предельным случаям, между которыми существует промежуточная область, в которой одновременно играет роль и рост температуры до температуры предельного перегрева (спинодали) $T_l(P)$ при данной величине давления P и сброс давления, сопровождающийся понижением $T_l(P)$, что приводит к взрывному вскипанию или отколу (в области отрицательных давлений P). Результаты теоретических и экспериментальных исследований поведения вещества при быстром нагреве представлены, например, в [3-6] и цитированной там литературе.

В случае металлов коэффициент поглощения в оптическом диапазоне α составляет величину порядка $\leq 10^6 \text{ см}^{-1}$, что соответствует длине поглощения $\sim 10 \text{ нм}$. Для обеспечения звуковой разгрузки (выравнивания давления) по глубине прогрева l , обусловленной длиной поглощения или температуропроводностью, длительность нагревающего импульса должна превышать величину порядка l/c , где c – скорость звука в зоне прогрева. В то же время процесс нагрева должен быть достаточно быстрым, чтобы реализовать максимально глубокий (по температуре) заход в область метастабильности вблизи критической точки перехода жидкость-пар.

Возникает вопрос, при каких условиях в этом случае возможно формирование такого температурного профиля, который приведет к процессу взрывного вскипания с образованием нанополости в области нагрева, где достигается максимальная температура, и к сбросу более холодного поверхностного слоя. Целью данной работы является получение ответа на данный вопрос на примере анализа субнаносекундного объемного нагрева и взрывного вскипания тонкой жидкой пленки с помощью метода молекулярной динамики.

2. Постановка задачи

Моделирование процесса взрывного вскипания осуществлялось в рамках молекулярно-динамического подхода.

2.1. Математическая модель. В основе молекулярно-динамического подхода (МД) лежит модельное представление о многочастичной (атомно-молекулярной) системе, в которой все частицы представлены материальными точками, движение которых описывается в классическом случае уравнениями Ньютона.

Математическая модель состоит из системы дифференциальных уравнений, равных удвоенному числу $2N$ рассматриваемых частиц, потенциала межатомного взаимодействия $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, специфически определяемых начальных и граничных условий:

$$\begin{cases} m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i + \mathbf{F}_i^{ext}, \\ \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \end{cases} \quad i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где $m_i, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i$ – масса, радиус-вектор и скорость соответственно; потенциальная энергия взаимодействия системы из N частиц $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$; $\mathbf{F}_i = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i}$ – сила взаимодействия, \mathbf{F}_i^{ext} – внешние силы.

2.2. Начальные условия. Для решения системы уравнений (1) требуется знание координат и скоростей $(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i)|_{t=0}$ в начальный момент времени $t = 0$ всех N частиц. При моделировании процессов в конденсированных средах в начальный момент времени рассматриваемая среда будет представлять собой кристалл, поликристалл либо, как в данной работе, жидкость.

После задания координат и скоростей проводится релаксация моделируемого объекта для более точного выведения макроскопических параметров в начальные значения, а также установления стационарного состояния системы. Для моделирования жидкости бывает сложно задать идеально сбалансированные по кинетической и потенциальной энергиям координаты и скорости частиц. Это приводит к возникновению нежелательных акустических вибраций. Для их эффективного подавления в исходную систему уравнений (1) вводится трение [7]:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} - \beta \mathbf{v}_i, \\ \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \end{cases} \quad i = 1, \dots, N. \quad (2)$$

Совместное применение трения и термостата, возвращающего энергию в хаотическую составляющую движения частиц для удержания требуемой температуры, позволяет достаточно быстро вывести систему в стационарное состояние.

Кроме того, в процессе релаксации, давление (напряжения) в системе с помощью баростата также может быть выведено на требуемый для дальнейшего моделирования уровень.

2.3. Граничные условия. Система (2) представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений. Для ее решения требуются только начальные условия. Граничные условия отсутствуют. Однако при моделировании объектов сформированных

системой частиц часто возникают дополнительные требования, которые могут быть удовлетворены наложением условий на границах объекта.

Так при рассмотрении процессов в тонкой пленке толщиной H и бесконечной по направлениям координатных осей X и Y для моделирования выделяется конечная расчетная область с размерами по осям $L_x \times L_y \times L_z$, которая содержит часть пластины $L_x \times L_y \times H$. Чтобы смоделировать взаимодействие с частью, не вошедшей в расчетную область, вдоль координатных осей X и Y используют периодические граничные условия с периодами L_x и L_y соответственно.

Периодические граничные условия по x подразумевают, что частицы с координатой x в пределах $0 \leq x < L_x$ точно воспроизводят частицы $kL_x \leq x < (k+1)L_x$ для любых целых $k \neq 0$. То есть частица, покидающая расчетную область через верхнюю границу $x = L_x$, заменяется на частицу с таким же значением скорости, но вошедшую в расчетную область через нижнюю границу $x = 0$.

Второй важный аспект периодических граничных условий – сила и потенциальная энергия взаимодействия для частиц из приграничных областей [7]: $0 \leq x < r_{cr}$ и $(L_x - r_{cr}) \leq x < L_x$, где r_{cr} – радиус обрезания потенциала (предполагается, что силами взаимодействия на расстояниях $r > r_{cr}$ можно пренебречь).

Взаимодействие частицы i , координата x_i которой находится в интервале $(L_x - r_{cr}) \leq x_i < L_x$ с частицами, находящимися за пределами расчетной области $L_x \leq x'_j < (L_x + r_{cr})$, моделируется с использованием частиц $0 \leq x_j < r_{cr}$ из расчетной области, радиус-векторы которых корректируются следующим образом при расчете силы взаимодействия $\mathbf{F}_{ij} = \mathbf{F}_{(\dots r'_j \dots)}(\mathbf{r}_i)$:

$$\mathbf{r}'_j = \mathbf{r}_j + \mathbf{e}_x L_x, \quad (3)$$

где \mathbf{e}_x – единичный орт оси X .

Очевидно, все вышесказанное в равной степени относится и к периодическим граничным условиям вдоль координатной оси Y .

Вопрос о погрешности, вносимой периодическими граничными условиями, связан с искажением, вносимым в затухание фононных мод в кристалле. Очевидно, увеличение расстояния между границами уменьшает влияние на спектр фононных мод.

2.4. Потенциал взаимодействия. Ключевым элементом метода молекулярной динамики является выбор потенциала взаимодействия частиц. Используются два подхода к выбору потенциала межатомных и межмолекулярных взаимодействий: так называемый “первопринципный” подход и метод полуэмпирических потенциалов.

Эмпирические и полуэмпирические потенциалы являются хорошим вариантом для систем в определенном диапазоне условий, когда, имея некоторое число подгоночных параметров модели, можно весьма точно воспроизвести всю совокупность измеренных экспериментально величин, таких как энергия связи атомов, поверхностная энергия, энергия дефектов структуры, упругие модули, теплофизические характеристики. Однако параметризация потенциала для системы в одном состоянии может оказаться неудачной

для той же системы в другом состоянии. Поэтому для эмпирических и полуэмпирических потенциалов всегда остается открытым вопрос о пределах их применимости в конкретных ситуациях.

В 80-х годах прошлого века для материалов с металлической связью был предложен потенциал «погруженного атома» (*Embedded Atom Model – EAM*) [8-9]. В нем вклад в энергию произвольно расположенных ядер от взаимодействия с электронами, согласно квантовомеханической теории функционала электронной плотности, может быть записан как однозначный функционал полной электронной плотности (функционал погружения). При этом полная электронная плотность в металле представляется линейной суперпозицией вкладов отдельных атомов, причем электронная плотность, создаваемая одним атомом, сферически симметрична. Таким образом, полная энергия системы состоит из двух слагаемых – энергии парного взаимодействия атомов и энергии взаимодействия каждого атома с электронной плотностью, создаваемой другими атомами:

$$U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N f(\rho_i), \quad (4)$$

где $\varphi(r_{ij})$ – парный потенциал, $f(\rho_i)$ – функция “погружения” i -го атома, ρ_i – суммарная электронная плотность для i -го атома, создаваемая сферически симметричными функциями одноэлектронной плотности $n(r_{ij})$ других атомов.

В рассматриваемой задаче в качестве потенциала использовался полуэмпирический потенциал “погруженного атома”, приведенный в [10]. В качестве парной части в [10] использовалась полиномиальная зависимость:

$$\varphi(r) = \begin{cases} 0, & r \geq r_c, \\ \left(\frac{1}{a_1 r^2} - a_2 \right) (a_1 r^2 - a_1 r_c^2)^{10} \left[(a_1 r^2 - a_1 r_c^2)^6 + a_3 (a_1 r^2)^6 \right], & r < r_c. \end{cases} \quad (5)$$

Для функций “погружения” и одноэлектронной плотности использовались аналитические выражения

$$f(\rho) = \frac{b_1 \rho \cdot [b_2 + (b_3 + \rho)^2]}{1 + b_4 \rho}, \quad n(r) = \begin{cases} 0, & r \geq r_c, \\ \frac{c_1 \cdot (r^2 - r_c^2)^2}{1 + (c_2 r^2)^3}, & r < r_c, \end{cases} \quad (6)$$

где $r_c = 0.6875$ нм – радиус обрезания потенциала, $a_1 - a_3$, $b_1 - b_4$, $c_1 - c_2$ – подгоночные параметры.

Параметризация данного потенциала была выполнена на основе механических характеристик алюминия. Для оценки его применимости к решению теплофизических задач в [11, 12] результаты расчетов, получающиеся с его помощью, сравнивались с реальными тепловыми характеристиками, такими как температура плавления, удельная теплота плавления, теплоемкость, коэффициент теплового расширения.

3. Вычислительный алгоритм

Существенной особенностью молекулярно-динамического моделирования является необходимость расчета траекторий огромного количества частиц. Так для кубика из алюминия (гранцентрированная решетка с постоянной $a=0.405$ нм) с ребром $L=0.1$ мкм оценка числа частиц $N = 4L^3/a^3 \approx 6 \cdot 10^7$.

3.1. Разностная аппроксимация. Как оптимальный компромисс между вычислительной эффективностью и требованиями точности, устойчивости широкое распространение в молекулярно-динамическом моделировании получил алгоритм Верле [13] в его наиболее удобной так называемой скоростной форме. Предлагаемая далее его модификация содержит в отличие от оригинала еще трение. Для системы уравнений (2) с вязкостью может быть записана следующая конечно-разностная аппроксимация:

$$\frac{\mathbf{v}^{k+1} - \mathbf{v}^k}{\Delta t} = \frac{\mathbf{a}^k + \mathbf{a}^{k+1}}{2} - \beta \frac{\mathbf{v}^{k+1} + \mathbf{v}^k}{2} \Rightarrow \mathbf{v}^{k+1} \left(1 + \frac{\beta \Delta t}{2} \right) = \overbrace{\mathbf{v}^k \left(1 - \frac{\beta \Delta t}{2} \right)}^{\mathbf{v}_*^{k+1/2}} + \frac{\mathbf{a}^k \Delta t}{2} + \frac{\mathbf{a}^{k+1} \Delta t}{2}, \quad (7)$$

$$\frac{\mathbf{r}^{k+1} - \mathbf{r}^k}{\Delta t} = \mathbf{v}_*^{k+1/2} \Rightarrow \mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{r}^k + \mathbf{v}_*^{k+1/2} \Delta t = \mathbf{r}^k + \mathbf{v}^k \Delta t + \frac{(\mathbf{a}^k - \beta \mathbf{v}^k) \Delta t^2}{2}.$$

Здесь верхний индекс k – номер шага по времени, $\mathbf{a} = \mathbf{F}/m$ – ускорение, индекс i (номер частицы) опущен. Определение промежуточной скорости в полцелый момент времени:

$$\mathbf{v}_*^{k+1/2} = \mathbf{v}^k \left(1 - \frac{\beta \Delta t}{2} \right) + \frac{\mathbf{a}^k \Delta t}{2} \quad (8)$$

эквивалентно разностной аппроксимации

$$\frac{\mathbf{v}_*^{k+1/2} - \mathbf{v}^k}{\Delta t/2} = \mathbf{a}^k - \beta \mathbf{v}^k. \quad (9)$$

В итоге вычислительный алгоритм Верле в скоростной форме для системы (2) с вязкостью формулируется следующим образом. Предполагая, что все величины известны на момент времени t_k , переход к следующему моменту времени $t_{k+1} = t_k + \Delta t$ производится по формулам

$$\mathbf{v}_*^{k+1/2} = \mathbf{v}^k \left(1 - \frac{\beta \Delta t}{2} \right) + \frac{\mathbf{a}^k \Delta t}{2}, \quad \mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{r}^k + \mathbf{v}_*^{k+1/2} \Delta t, \quad (10)$$

$$\mathbf{a}^{k+1} = -\frac{\text{grad}(U^{k+1})}{m}, \quad \mathbf{v}^{k+1} = \frac{\mathbf{v}_*^{k+1/2} + \frac{\mathbf{a}^{k+1} \Delta t}{2}}{1 + \frac{\beta \Delta t}{2}}.$$

Схема Верле не является консервативной в смысле точного выполнения закона сохранения энергии в разностном виде. Однако статистически для системы частиц этот закон выполняется вполне удовлетворительно.

3.2. Вычисление макроскопических величин. В ходе молекулярно-динамического моделирования конденсированной среды достаточно быстро устанавливается локальное термодинамическое равновесие. Так характерное время установления локально-равновесного распределения в кристалле алюминия составляет единицы пикосекунд. Исходя из этого, с помощью процедуры осреднения [7] определяются основные термодинамические величины – давление (напряжения в кристалле) и температура, также скорость и плотность. Для пространственного осреднения вся совокупность рассматриваемых атомов разбивалась на ячейки, внутри которых осуществлялось осреднение хаотических составляющих.

3.3. Физические и вычислительные параметры. В начальный момент времени система приводилась в равновесное состояние при заданных температуре (6400К) и плотности (1.43 г/см³).

Размеры счетной области по осям Y, Z , на которых задавались периодические граничные условия, составляли примерно $d=4$ нм и 67 нм по оси X , перпендикулярной плоскости пленки. Граничные условия по оси X соответствовали либо непроницаемой, либо полностью прозрачной границе. Атом, достигавший прозрачную границу, удалялся из расчетной области, чем моделировалось испарение в вакуум (без учета возможного обратного потока). Начальная толщина пленки составляла $h=23.5$ нм. Общее начальное число частиц было равно 12000, а масса отдельной частицы была равна массе алюминия.

С геометрической точки зрения такая постановка похожа, например, на использованную в работе [14], где моделировался процесс испарения в вакуум водяной пленки толщиной ~ 5 нм (1000 молекул) с температурой $< \sim 480$ К $\sim 0.8 T_c$ (для воды критическая температура $T_c=647$ К) на интервале времен $t < \sim 3$ нс без дополнительного подвода тепла. Однако взрывное вскипание в условиях работы [14] не наблюдалось.

Обычно быстрый нагрев конденсированной среды осуществляется с помощью концентрированного потока энергии, например, от источника лазерного излучения, энергия которого первоначально передается электронной подсистеме, а затем решетке. Для упрощения задачи и ускорения расчета процесс нагрева здесь моделируется просто как увеличение кинетической энергии атомов, поскольку рассмотрение вопроса о динамике термализации поглощенной энергии электромагнитного поля не является целью данной работы.

Такой подход в данном случае является оправданным, поскольку используемые времена нагрева (сотни пикосекунд) велики по сравнению с характерным временем термализации (пикосекунды). Кроме того, в качестве начального условия использовалось уже нагретое состояние жидкой пленки с температурой ~ 6400 К $\sim 0.84 T_c$, примерно в два раза превышающей нормальную температуру кипения и на 10^3 К меньше критической температуры T_c . Отметим также, что начальной толщине пленки соответствует характерное время разгрузки давления $h/c \sim 10^{-11}$ с при скорости звука $c \sim 2 \cdot 10^5$ см/с.

Исследуемая жидкость имеет температуропроводность, характерную для диэлектриков, поскольку вклад электронов проводимости в этот процесс не учитывается. Этот вклад может стать малым по сравнению с решеточным (диэлектрическим), например, в случае реализации перехода металл-диэлектрик в околоскритической области, на возможность которого было впервые обращено внимание в [15]. В настоящее время вопрос о поведении электронов проводимости для большинства металлов при понижении их

плотности остается открытым из-за трудностей его экспериментального и теоретического исследования. Отметим, что при рассматриваемых температурах плотность жидкой пленки оказывается почти вдвое меньше плотности алюминия вблизи точки плавления.

Численное интегрирование уравнений движения осуществляется с помощью скоростной схемы Верле (10) с шагом по времени $\Delta t = (1 \div 2) \cdot 10^{-15}$ с.

Для пространственного усреднения температуры и скорости использовались ячейки толщиной 3 нм, а для плотности и давления 0.8234 нм.

4. Результаты и обсуждение

На рис. 1а показано мгновенное начальное состояние жидкой пленки, которая находится в замкнутой полости (границы вдоль оси X непроницаемы) в равновесии со своим насыщенным паром при средней температуре 6400 К. Здесь и в дальнейшем никакого усреднения по времени не производится.

В момент $t=0$ начинается нагрев пленки с постоянным темпом ε увеличения кинетической энергии каждой частицы, соответствующим 10 К/пс для теплоемкости Дюлонга-Пти (8 К/пс для реальной теплоемкости исследуемой жидкости), и одновременно делаются прозрачными границы по оси X . Такому темпу нагрева $\varepsilon = 4 \cdot 10^{-10}$ Вт/част. соответствует объемная мощность энерговыделения $\varepsilon N / d^2 h = \alpha I$, которая может обеспечиваться интенсивностью излучения $I = 1.3 \cdot 10^8$ Вт/см² при $\alpha = 10^5$ см⁻¹.

Открытие полости приводит с течением времени к уменьшению концентрации испаренных частиц над поверхностью пленки за счет прекращения обратного потока, который имеет место в случае насыщенного пара в замкнутой полости. Это различие плотности пара видно из сравнения рис. 1а с рис. 1б, на котором показано состояние пленки к моменту $t = 106$ пс. Относительно большие флуктуации температуры в газовой фазе по сравнению с конденсированным состоянием обусловлены, в частности, различием в плотности этих сред.

Соответствующие рис. 1а-в профили температуры, плотности и скорости частиц показаны на рис. 2-4. Общая толщина пленки на рис. 1б и рис. 3б за счет теплового расширения превышает исходную на рис. 1а и рис. 2б примерно на 3%. При этом надо учесть, что к этому моменту число частиц пленки уменьшилось на 10%, то есть реальное тепловое расширение (при неизменном числе частиц) составило бы $\sim 13\%$ от исходного размера. Такое расширение согласуется с различием средней плотности на рис. 2б и рис. 3б.

Это расширение (изменение плотности) неоднородно по толщине пленки, что отчетливо видно из рис. 3б. Такая неоднородность связана, в частности, с формированием температурного профиля (рис. 3а), который, в отличие от рис. 2а, имеет выраженный максимум примерно в середине пленки, сформировавшийся в результате испарительного охлаждения ее поверхностей.

Формирование подобного профиля приводит к тому, что распад метастабильной перегретой жидкости и формирование паровой полости начинается в центральной области пленки. На рис. 1в показано состояние образовавшейся полости к моменту $t = 200$ пс, когда пленку уже можно считать распавшейся на две части, поскольку плотность в ее центральной части (полости) оказалась значительно меньше исходной (рис. 4б), а размер полости близок к толщине правого фрагмента $h_r \sim 9$ нм. Толщина левого фрагмента $h_l \sim 13$ нм превосходит величину h_r и его смещение относительно исходного положения центра массы пленки по этой причине оказывается меньше, чем у правого фрагмента.

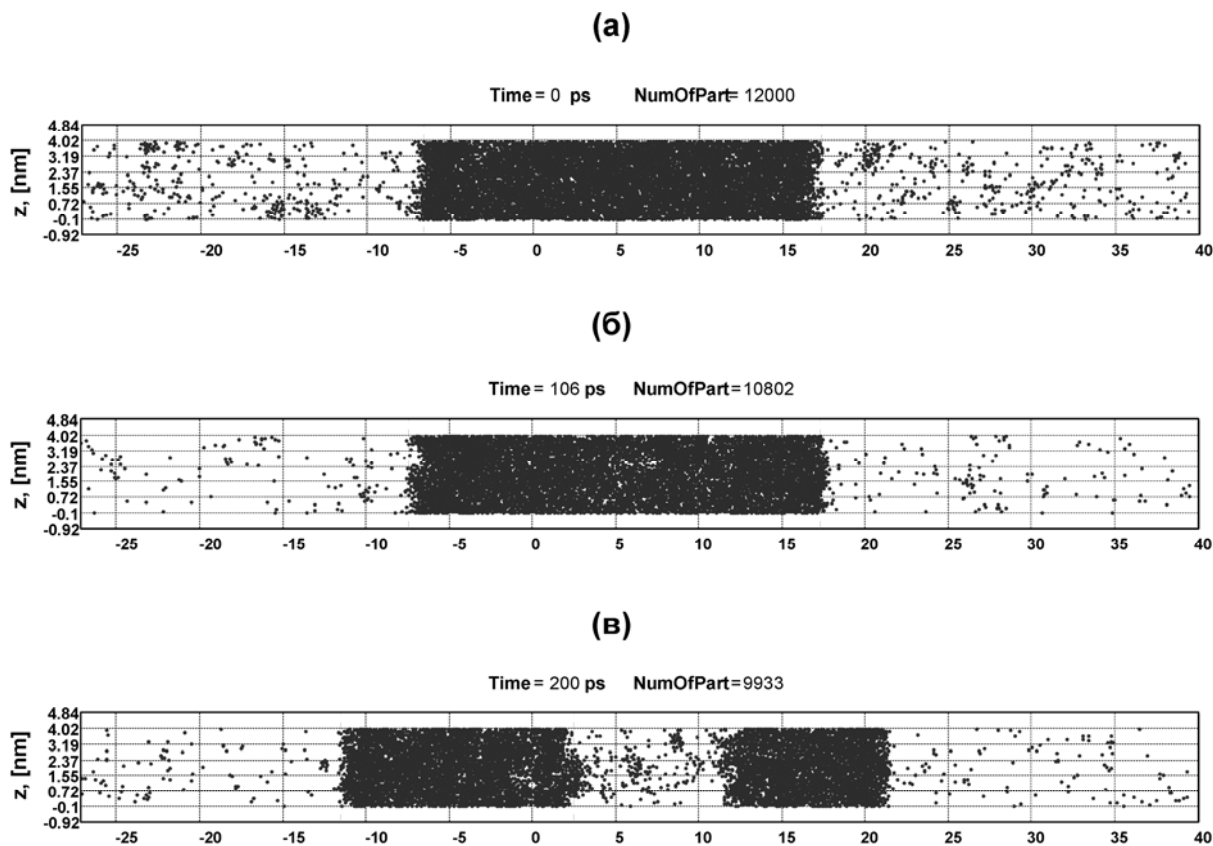


Рис.1. Пространственное расположение частиц пленки и пара в различные моменты времени с момента начала моделирования: (а) – 0 пс, (б) – 106 пс, (в) – 200 пс.

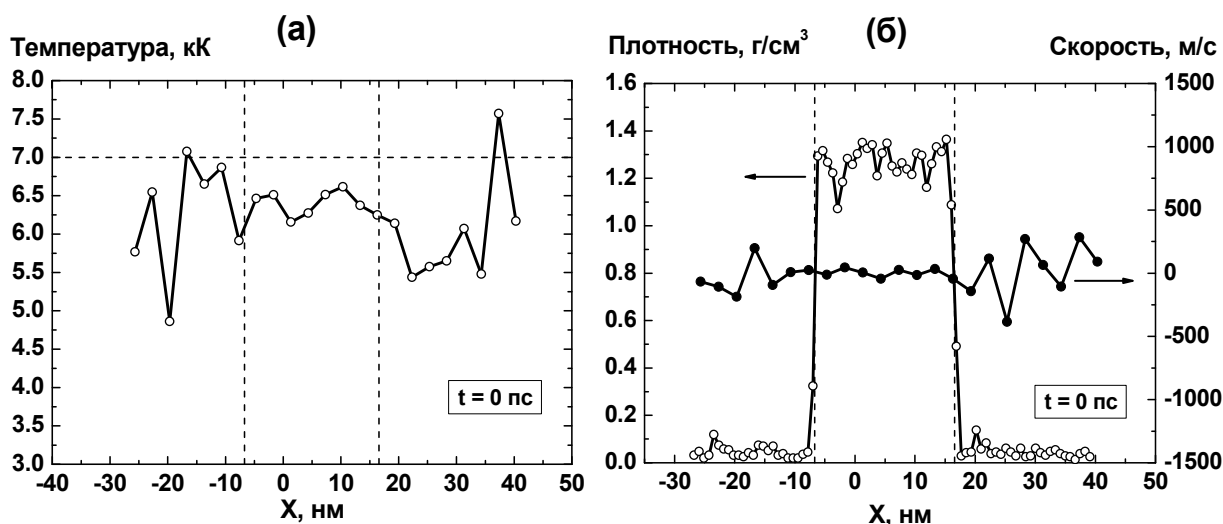


Рис.2. Пространственное распределение температуры (а), плотности и скорости частиц (б) пленки и пара в момент времени $t = 0$ пс с начала нагрева.

Распределение температуры для этого момента времени $t = 200$ пс показано на рис.4а. Падение температуры внутри полости связано с испарительным процессом при ее расширении, поскольку при отсутствии такого расширения температура частиц в полости не отличалась бы от температуры фрагментов пленки.

Заметим, что это падение температуры наблюдается здесь несмотря на то, что в рассматриваемой модели все частицы в газовой и конденсированной фазе нагреваются с одинаковой скоростью. Такие условия в экспериментах без образования плазмы обычно не реализуются, поскольку нагрев идет преимущественно через конденсированную фазу. Результаты расчетов без нагрева паровой фазы будут приведены позднее.

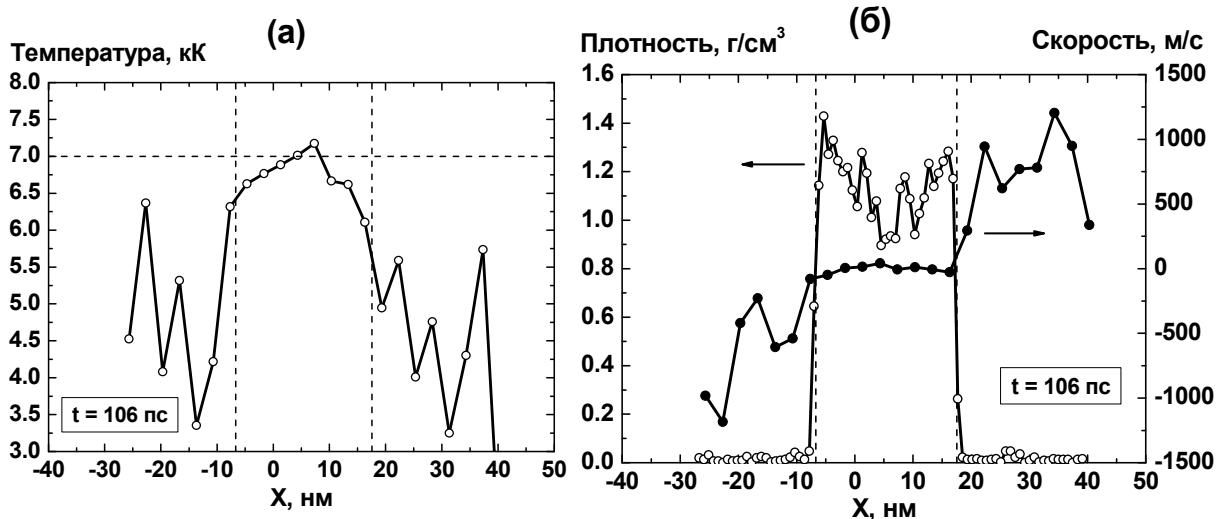


Рис.3. Пространственное распределение температуры (а), плотности и скорости частиц (б) пленки и пара в момент времени $t = 106$ пс с начала нагрева.

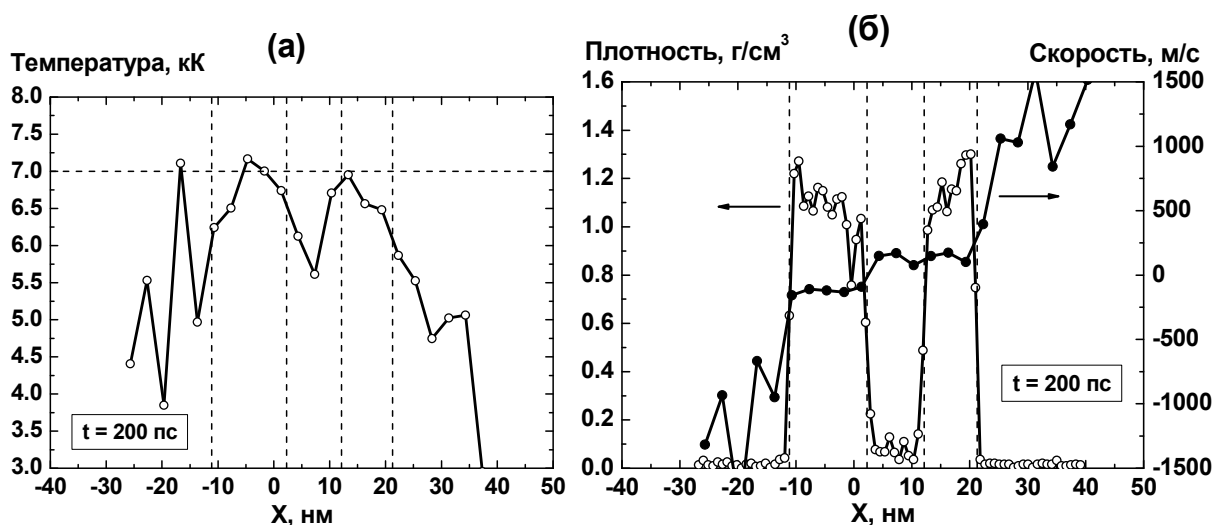


Рис.4. Пространственное распределение температуры (а), плотности и скорости частиц (б) пленки и пара в момент времени $t = 200$ пс с начала нагрева.

На рис.2б–рис.4б вместе с распределением плотности показано также пространственное распределение z -компоненты средней скорости частиц. В начальный момент ($t=0$ пс) скорость частиц в среднем близка к нулю, причем ее флуктуации в газовой фазе значительно больше, чем в конденсированной. В момент $t=106$ пс (рис.3) средняя скорость частиц в пленке остается малой, а в газовой фазе она значительно возрастает по направлению от поверхности пленки – справа от пленки ее величина положительна, слева – отрицательна. В образовавшейся полости ($t=200$ пс) средняя скорость частиц пара положительна и близка к скорости движения отлетающего правого фрагмента, масса которого меньше массы левого фрагмента, имеющего отрицательную среднюю скорость.

Различие в массе и толщине фрагментов оказывает влияние на их эволюцию при данном режиме нагрева из-за различия в относительной роли поверхностного испарения при разных объемах, как это видно уже из рис.4а,б. Температура левого фрагмента оказывается несколько выше, а плотность его несколько ниже, чем у более тонкого правого фрагмента. В итоге с течением времени это приводит к дополнительному взрывному вскипанию левого фрагмента, которое более подробно будет описано отдельно.

По кинетике разлета фрагментов пленки и их массе можно, в принципе, восстановить эволюцию давления в полости. При данной постановке задачи, когда все частицы греются с одинаковой интенсивностью, полость расширяется с постоянным ускорением, что соответствует постоянству результирующей силы, действующей на разлетающиеся фрагменты. Изменение скорости правого фрагмента при $t > t_1$, где $t_1 = 140$ пс обозначает момент начала образования полости, определяется формулой: $v = a \cdot (t - t_1)$ с ускорением $a = 2.7 \cdot 10^{12} \text{ м/с}^2$, которому соответствует эффективное давление $P = 360$ атм.

Особый интерес представляет поведение скорости (ускорения) фрагмента в самом начале процесса взрывного вскипания вблизи t_1 , однако определение этих характеристик сталкивается с определенными затруднениями, обусловленными, в том числе и случайной (флуктуационной) природой этого процесса. Непосредственное вычисление давления по известным формулам также приводит к слишком большим флуктуациям, не позволяющим сделать надежный вывод о поведении этой величины.

Заключение

Полученные результаты математического моделирования взрывного вскипания однородно нагреваемой тонкой жидкой пленки показывают, что в рассматриваемых условиях однородного субнаносекундного нагрева на пространственно-временное развитие исследуемого эффекта существенное влияние оказывает процесс поверхностного испарения, который приводит к поверхностному охлаждению и формированию выпуклого температурного профиля внутри пленки. Процесс взрывного вскипания начинается вблизи максимума температурного профиля и приводит к распаду пленки на два фрагмента с несколько различными массами. Это различие, предположительно, может быть связано со случайным (флуктуационным) характером развития процесса.

Дальнейшая эволюция этих фрагментов также демонстрирует существенную роль поверхностного испарения в этих условиях, что проявляется в повторном развитии взрывного вскипания в более массивном фрагменте из-за зависимости относительной роли поверхностного испарения и объемного нагрева от толщины пленки (или ее фрагмента). Очевидно, с уменьшением толщины пленки при одной и той же интенсивности нагрева ε рост ее температуры будет замедляться.

Исследование поведения фрагментов позволяет определить действующие на них силы и уточнить затем эффективные испарительные граничные условия, необходимые для континуального описания испарительного процесса в рамках газо- и гидродинамики [16, 17]. Вопрос о поведении давления на начальном этапе взрывного вскипания в рассматриваемых условиях пока остается открытым.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самохин А.А. Фазовые переходы первого рода при действии лазерного излучения на поглощающие конденсированные среды // Действие лазерного излучения на поглощающие конденсированные среды (Труды ИОФАН; Т. 13). – М.: Наука, 1990, 119 с.
2. Самохин А.А. О некоторых особенностях развитого испарения конденсированных сред лазерным излучением // Квантовая электроника, 1974, т.1, №9, с.2056-2059.
3. Zhigilei L.V., Lin Z., Ivanov D.S. Atomistic modeling of short pulse laser ablation of metals: connections between melting, spallation, and phase explosion // J. Phys. Chem. C, 2009, v.113, p.11892-11906.
4. Lorazo P., Lewis L.J., Meunier M. Thermodynamic pathways to melting, ablation, and solidification in absorbing solids under pulsed laser irradiation // Physical Review B, 2006, v.73, p.134108.
5. Норман Г.Э., Стариков С.В., Стегайлов В.В. Атомистическое моделирование лазерной абляции золота: эффект релаксации давления // ЖЭТФ, 2012, т.141, №5, с.910-918.
6. Ионин А.А., Кудряшов С.И., Селезнев Л.В., Сеницын Д.В., Бункин А.Ф., Леднев В.Н., Першин С.М. Термическое плавление и абляция кремния фемтосекундным лазерным излучением // ЖЭТФ, 2013, т.143, №3, с.403-422.
7. Мажукин В.И., Шапранов А.В. Молекулярно-динамическое моделирование процессов нагрева и плавления металлов. I. Модель и вычислительный алгоритм. – М.: Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 2012, препринт №31, 27 с.
8. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities and other defects in metals // Phys. Rev. B, 1984, v.29, p.6443-6453.
9. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Phys. Rev. B, 1986, v.33, p.7983-7991.
10. Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K. Two-temperature relaxation and melting after absorption of femtosecond laser pulse // Appl. Surf. Sci., 2009, v.255, №24, p.9592-9596.
11. Мажукин В.И., Шапранов А.В. Молекулярно-динамическое моделирование процессов нагрева и плавления металлов. II. Вычислительный эксперимент. – М.: Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 2012, препринт №32, 24 с.
12. Мажукин В.И., Шапранов А.В., Пережигин В.Е. Математическое моделирование теплофизических свойств, процессов нагрева и плавления металлов методом молекулярной динамики // Mathematica Montisnigri, 2012, v.24, p.47–66.
13. Verlet L. Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev., 1967, v.159, p.98-103.
14. Yang T.H., Pan C. Molecular dynamics simulation of a thin water layer evaporation and evaporation coefficient // Intern. Journ. of Heat and Mass Transfer, 2005, т.48, с.3516-3526.
15. Ландау Л.Д., Зельдович Я.Б. О соотношении между жидким и газообразным состоянием у металлов // ЖЭТФ, 1944, т.14, с.32-35.
16. Kartashov I.N., Samokhin A.A., Smurov I.Yu. Boundary conditions and evaporation front instabilities // J. Phys. D: Appl. Phys., 2005, v.38, p.3703–3714.
17. Mazhukin V.I., Samokhin A.A. Boundary conditions for gas-dynamical modeling of evaporation process // Mathematica Montisnigri, 2012, v.24, p.8–17.

Поступила в редакцию 15.03.2013.