

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ УНИТАРНОЕ ПРЕДПРИЯТИЕ
ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ АВТОМАТИКИ
им. Н.Л. ДУХОВА

На правах рукописи

Ильницкий Денис Константинович

**Численное моделирование процессов деформации и
разрушения материалов при импульсных нагрузках**

Специальность 01.02.04 – механика деформируемого твердого тела

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физико-математических наук,
Иногамов Наиль Алимович

Москва 2019

Оглавление

Введение	5
1 Упругое поведение ионной подсистемы при воздействии ультракороткого лазерного импульса	20
1 Модель и уравнения	31
2 Сдвиговое напряжение в твердом теле до его плавления в двухтемпературной стадии и распространение волны сжатия из жидкости в твердое тело	37
3 Опрокидывание и последующая эволюция скачка упругого напряжения	44
4 Сравнение результатов 2Т-НД-Elast, 2Т-НД, MD и результатов экспериментов (верификация и валидация модели) .	45
5 Учет динамики дислокаций и гомогенной нуклеации в ионной подсистеме	50
6 Выводы по Главе 1	55
2 Динамика тонкой пленки (10-100 нм), напыленной на подложку, при фемтосекундном лазерном воздействии	57
1 Отслаивание пленки от субстрата и формирование купола	59
2 Математическая модель	61

3	Режимы движения пленки на стеклянной подложке	63
4	Колебательный режим	65
5	Деламинация пленки	68
5.1	Скорость центра масс пленки после отделения от подложки	73
6	Порог абляции и разрушение пленки	75
7	Выводы по Главе 2	83
3	Моделирование инициирования анизотропного ВВ при низкоинтенсивных механических воздействиях	84
1	Модель Зерилли	85
2	Модель Гушанова	88
3	Применение конечно элементного метода кристаллической пластичности	91
4	Выводы по Главе 3	102
	Заключение	105
	Список литературы	107

Список использованных обозначений

УКЛИ – ультракороткий лазерный импульс

УВ – ударная волна

WDM – warm dense matter(горячее плотное вещество)

pump-probe – метод эксперимента с использованием импульса накачки и зондирующего импульса

HEL – Hugoniot Elastic Limit(динамический предел упругости)

МД – метод молекулярной динамики

УРС – уравнение состояния

DFT – метод функционала плотности

CPFEM – конечно-элементный метод кристаллической пластичности

ВВ – взрывчатое вещество

Введение

Актуальность темы исследования

Изучение процессов, происходящих в конденсированных материалах, под действием импульсных нагрузок имеет важное практическое значение. С их помощью осуществляется большое количество технологических процессов, таких как: обработка материалов, сварка, сверление, формирование поверхностей, упрочнение, разрушение и инициирование взрывчатых превращений в энергетических материалах. Такие нагрузки часто встречаются в повседневной эксплуатации различных конструкций, поэтому описание поведения материалов при подобных воздействиях важно для различных приложений. С точки зрения фундаментальной науки изучение поведения вещества под действием мощных импульсных воздействий, таких как ударные волны, также представляет большой интерес. Ударные волны переводят материал в сильно сжатое состояние, позволяют достичь высоких скоростей деформации и вызвать фазовые переходы и полиморфные превращения в нем. Генераторами ударных волн обычно выступают взрывчатые вещества либо металлические пластины, разогнанные ими и соударяющиеся с мишенью. Такие импульсные нагрузки характеризуются давлениями порядка до сотен и тысяч ГПа и длительностями от десятков наносекунд и более. Изобретение лазеров

позволило сократить время воздействия импульса до субпикосекундного диапазона и улучшить пространственно-временные масштабы диагностики изучаемых процессов, при этом достигаемые давления получаются порядка сотен ГПа.

В данной работе рассматриваются два типа импульсных нагрузок: ультракороткий лазерный импульс и механический удар телом,двигающимся со скоростью порядка десятков и сотен метров в секунду.

Ультракороткий (субпикосекундный) лазерный импульс примечателен тем, что позволяет вложить огромную энергию в материал за очень короткий временной промежуток. За время воздействия импульса не успевает происходить выравнивание энергий между электронной и ионной подсистемами (время выравнивания порядка пикосекунд). При этом по отдельности и электроны, и ионы находятся в тепловом равновесии, поэтому для каждой подсистемы можно ввести свою температуру. Нагреваемое вещество находится в сильно неравновесном состоянии, в англоязычной литературе называемом устоявшимся термином Warm Dense Matter (теплое(либо горячее) плотное вещество - плотность порядка твердотельной, а температура порядка единиц эВ (1 электронвольт ≈ 11600 К) - а в нашем случае еще более тонкая разновидность этого состояния - сильно нагретый электронный газ и холодная ионная решетка). При ультракоротком лазерном воздействии в нем происходит целый каскад процессов: сильный нагрев электронной подсистемы, перенос тепла вглубь образца за счет электронной теплопроводности, нагрев ионной подсистемы за счет электрон-ионного теплообмена, и затем, после окончания электрон-ионной релаксации (выравнивание температур), упруго-пластические деформации и откольные явления в ионной подсистеме, и

для корректного описания этих явлений требуется учет всех вышеописанных процессов.

В диссертационной работе рассматривается поведение ионной подсистемы при воздействии ультракороткого лазерного импульса. Этот импульс создает ударную волну, которая переводит вещество в одноосно деформированное состояние. Длительность нахождения материала в сжатом состоянии обычно порядка нескольких десятков пикосекунд. За это время оно не успевает вызвать движение дислокаций, а, соответственно, пластической деформации. Наблюдается своеобразное явление: распространение упругих волн с большой амплитудой порядка десяти ГПа. Эта картина сильно отличается от привычной, когда при микросекундном импульсном воздействии (например, механический удар) достаточной амплитуды по мишени бежит упругий предвестник амплитудой порядка десятой части ГПа, а за ним сильная пластическая волна. Впервые упругие волны большой амплитуды были получены экспериментально в работах [7, 8]. Тогда исследователи хотя и экспериментально зафиксировали скорости, соответствующие распространению упругих, а не ожидаемых в рамках привычных представлений пластических волн, объяснили наблюдаемое различие несовершенством измерительной техники либо процессами, приводящими к выходу из строя экспериментальной аппаратуры. В дальнейшем, к этому вопросу вернулись в работах [5, 16, 17, 18, 19]. В работе [17] проводилось моделирование эксперимента по лазерному воздействию на алюминиевую мишень методом молекулярной динамики, а в работе [16] экспериментально измеряли скорости распространения ударных волн, и окончательно убедились в существовании упругих волн большой амплитуды.

Метод молекулярной динамики широко используется для описания поведения процессов происходящих при высокоскоростных деформациях материалов и обладает хорошей точностью. Но имеет и некоторые недостатки, во-первых он очень трудоемкий и требует наличия больших вычислительных ресурсов, во-вторых позволяет моделировать поведение системы только достаточно малого размера (1 мкм в одном измерении), а в третьих не может учитывать в рассматриваемых задачах такие процессы как нагрев электронного газа, электронную теплопроводность, электрон-ионный теплообмен и т.д. В связи с этим возникла необходимость описания упругих волн большой амплитуды при воздействии ультракоротких лазерных импульсов на монокристаллы металлов в рамках механики сплошной среды, что позволило бы достаточно быстро рассчитывать все эти явления с учетом поведения электронной подсистемы. Хотя двухтемпературная модель для описания процессов, происходящих при воздействии лазерного импульса на вещество известна достаточно давно, в ней обычно полностью игнорировалось описание упруго-пластических свойств материалов, поэтому и необходимо было восполнить этот пробел, с условием того, что экспериментально наблюдалось упругое поведение материи при таком нагружении.

Ультракороткие лазерные импульсы также широко используются в различных технологических процессах для модификации поверхностей и формирования различных поверхностных наноструктур. К наиболее известным приложениям относятся: формирование решеток из полых бугорков на поверхности пленки; структурирование пленок для биоприложений и микроэлектроники; получение миниатюрных струй для усиления электрического поля, которые получают при выплескивании рас-

плавленного металла и последующим их охлаждением, и т.д. [40]-[44]. Для теоретического описания этих процессов необходимо учитывать взаимосвязанные тепловые и механические явления, которые могут приводить к вскипанию, плавлению и рекристаллизации расплавленных металлов, появлению упругих волн большой амплитуды, внутренним повреждениям материалов и т.д. Образование растягивающих напряжений внутри фронтального слоя, нагретого лазером, имеет важнейшее значение для понимания нуклеации, кавитации и фронтального (со стороны облучающего лазера) откола, которые часто называются абляцией (удаление массы) в лазерной физике. Откол и движение оторванных слоев позволяет объяснить появление интерференционных колец Ньютона [45, 46], возникающих из-за интерференции диагностического лазерного импульса между дном кратера и границами отколовшегося слоя. Разрыв свободной плоской пленки, быстро нагретой лазером, является наиболее простым примером лазерного откола [47]-[53], в котором порог абляции F_a определяет динамику этой пленки. Но возникает другая физически важная проблема, часто возникающая в приложениях: как эта картина меняется в случае пленок, нанесенных на подложку? Хотя некоторые исследователи рассматривали данную проблему в упрощенном варианте аналитическими методами, либо методом молекулярной динамики в приближении абсолютно жесткой подложки, до сих пор не было рассмотрения этой задачи с полным учетом механического поведения стеклянной подложки, ее взаимодействия с металлической пленкой, отрыва пленки от подложки, а также разрушения пленки. Эта проблема рассмотрена в диссертации.

В диссертации также рассматриваются деформации энергетиче-

ских материалов (взрывчатые вещества, пороха, пиротехнические составы) при достаточно слабых механических воздействиях, например, удар стального шара массой несколько десятков грамм, летящего со скоростью до сотни метров в секунду. Несмотря на слабость таких воздействий, они могут вызвать инициирование взрывчатых превращений в энергетических материалах. Данная задача имеет важное прикладное значение, поскольку позволяет осуществлять прогноз безопасности конструкций, содержащих взрывчатые вещества к различным механическим воздействиям. Эта проблема достаточно давно изучается разными группами исследователей как экспериментально, так и теоретически [71, 74, 75, 69, 67]. Разработан целый набор тестовых экспериментов [69, 67] для определения степени безопасности конструкций, содержащих ВВ. Обычно для описания инициирования превращений в энергетических материалах используют феноменологические модели с достаточно большим набором плохо определяемых параметров, которые калибруются по результатам экспериментов. Однако до сих пор при построении подобных моделей не учитывалась анизотропия механических свойств отдельных кристаллов ВВ, а также взаимодействие отдельных зерен материала. Хотя учет этих свойств материалов может привести к описанию локализации пластического течения, а, соответственно, неравномерного нагрева ВВ, которое может инициировать реакции его химического разложения. Возникла задача описания инициирования ВВ низкоскоростным ударом с учетом анизотропии материала. Для нее впервые использовался конечно-элементный метод кристаллической пластичности [72], разработанный для описания квазистатической деформации металлов с учетом анизотропии зерен материала и их взаимодействия друг с другом.

Цели работы

Целью данной диссертационной работы является развитие математических моделей описания поведения материалов под действием импульсных нагрузок, включающих в себя:

1) описание поведения монокристаллов металлов при субпикосекундном лазерном воздействии с учетом их упругих свойств

2) учет наличия сил адгезии между пленкой и подложкой, а также возможность внутреннего разрушения пленки и ее отрыва от подложки в системах тонкая металлическая пленка-стеклянная подложка, подвергаемых облучению ультракороткими лазерными импульсами

3) учет анизотропных свойств отдельных кристаллов энергетических материалов и их взаимодействия друг с другом при механическом нагружении слабой интенсивности.

Положения, выносимые на защиту

1) Для корректного описания распространения упругих волн большой амплитуды в монокристаллах металлов при воздействии ультракоротких лазерных импульсов необходимо дополнить существующие двухтемпературные математические модели слагаемыми, учитывающими упругие свойства ионной подсистемы.

2) При облучении ультракороткими лазерными импульсами тонких металлических пленок (10 - 100 нм), расположенных на толстых стеклянных подложках (несколько мкм), существуют три режима движения пленки в зависимости от поглощенной энергии излучения: колебания, отрыв ее целиком и внутреннее разрушение пленки.

3) Иницирование ВВ за счет локализации пластического течения при механических ударах слабой интенсивности возможно моделировать с помощью конечно элементного метода кристаллической пластичности, который позволяет учитывать анизотропные свойства отдельных кристаллов ВВ, а также их взаимодействие.

Научная новизна работы

Впервые в существующие двухтемпературные математические модели конденсированной среды, описывающие ультракороткие лазерные воздействия, были добавлены слагаемые, отвечающие за прочностные свойства материалов. Данная модификация позволила описать множество экспериментов по генерации упругих волн большой амплитуды в металлических пленках, что до этого не удавалось сделать в рамках континуального моделирования.

Подробное численное описание влияния стеклянной подложки на динамическое поведение тонкой металлической пленки, находящейся на ней, при ее лазерном облучении с учетом отрыва и разрушения пленки также является новым. Ранее исследования ограничивались аналитическим рассмотрением упрощенных задач либо рассматривались свободные пленки.

Впервые для моделирования иницирования анизотропного ВВ применен конечно элементный метод кристаллической пластичности. Такой подход позволяет рассмотреть напрямую влияние анизотропии кристаллов материалов и их взаимодействия на локализацию пластического течения без введения дополнительных предположений.

Личный вклад

Результаты, составляющие основное содержание диссертации, получены автором самостоятельно.

Теоретическая и практическая значимость работы

Учет упругих свойств ионной среды в рамках подхода двухтемпературной механики сплошной среды позволяет быстро и точно численно описывать эксперименты по ультракороткому воздействию лазерного излучения на вещество.

Многие технологические процессы модификации поверхностей материалов при их обработке ультракоротким лазерным излучением, проводятся с тонкими пленками из металла, напыленными на диэлектрическую подложку. В рамках подхода механики сплошных сред создана математическая модель, позволяющая описывать различные моды движения этой пленки, в зависимости от вложенной энергии.

При хранении и эксплуатации различных конструкций, содержащих энергетические вещества (твердые ракетные топлива, ВВ) важно учитывать возможность их инициирования механическим ударом небольшой амплитуды. Предложен метод описания данных процессов, учитывающий анизотропию механических свойств отдельных зерен материала и их взаимодействие.

Методология и методы исследования

Исследования основаны на численном решении классических законов сохранения массы, импульса и энергии, законов термодинамики и

дополнительном учете законов движения элементарных носителей пластичности (дислокаций).

Достоверность результатов

Достоверность результатов диссертации обусловлена их согласием с экспериментальными данными и результатами моделирования, проведенных методом молекулярной динамики.

Апробация работы

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях: XV, XVII и XIX Харитоновских тематических научных чтениях (г. Саров, 2013, 2015, 2017), XI и XII Забабахинских научных чтениях (г. Снежинск, 2012, 2014), 10 Всероссийской школе-семинаре "Аэротермодинамика и физическая механика классических и квантовых систем" (г. Москва, 2016), III Международная конференция "Лазерные, плазменные исследования и технологии" (г. Москва, 2017), International Conference on High Energy Density Physics (Франция, г. Сент-Мало, 2013), New Models and Hydrocodes for Shock Wave Processes (Чехия, г. Пардубице, 2014), International Conference "Turbulent Mixing and Beyond-Non Equilibrium Transport across the scales" (Италия, г. Триест, 2017).

Доклады по диссертации в целом были сделаны в 2018-2019 гг. на научных семинарах кафедры газовой и волновой динамики МГУ (рук. академик РАН Нигматулин Р.И.), кафедры теории пластичности МГУ (рук. чл.-корр. РАН Ломакин Е.В.), кафедры механики композитов МГУ (рук. проф. Горбачёв В.И.), кафедры теории упругости МГУ (рук. проф.

Георгиевский Д.В.), Научного центра волновых исследований ИОФ РАН (рук. д.ф.-м.н. Шафеев Г.А.) и Центра фундаментальных и прикладных исследований ВНИИА (рук. д.ф.-м.н. Андрияш А.В.).

Публикации

По теме диссертации опубликовано 17 статей, из них 14 в рецензируемых научных изданиях, цитируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI. Список публикаций приведен в конце автореферата.

Статьи в рецензируемых научных изданиях, рекомендуемых для защиты в диссертационном совете МГУ

1) D. Ilnitsky, N. Inogamov, V. Zhakhovsky, Response of explosive HMX to low-velocity impact: modeling by the crystal plasticity finite element method J. Phys.: Conf. Ser. 941(1):012052 (2018)

2) D. Ilnitsky, S. Dyachkov, N. Inogamov, V. Zhakhovsky, Mechanical anisotropy of energetic polycrystals as possible initiation mechanism, J. Phys.: Conf. Ser. 1147:012040 (2019)

3) S. Grigoryev, B. Lakatosh, M. Krivokorytov, V. Zhakhovsky, S. Dyachkov, D. Ilnitsky, K. Migdal, N. Inogamov, A. Vinokhodov, V. Kompanets, Yu. Sidelnikov, V. Krivtsun, K. Koshelev, V. Medvedev, Expansion and Fragmentation of a Liquid-Metal Droplet by a Short Laser Pulse, Physical Review Applied, 10(6)(2018)

4) D.K. Ilnitsky, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, Dynamics of laser ablation at the early stage during and after ultrashort pulse, J. Phys.: Conf. Ser. 774:012101 (2016)

5) D.K. Ilnitsky, V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky,

Yu.V. Petrov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, S.I. Anisimov, Two-temperature hydrodynamics of laser-generated ultrashort shock waves in elasto-plastic solids, *J. Phys. Conf. Ser.* 500:032021 (2014)

6) N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Y.V. Petrov, V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, D.K. Ilnitsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, T. Kawachi, A.Y. Faenov, T.A. Pikuz, M. Baba, Y. Minami and T. Suemoto, Rarefaction after fast laser heating of a thin metal film on a glass mount, *AIP Conf. Proc.* 1793, 070012 (2017)

7) V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, D.K. Ilnitsky, K.P. Migdal, V.V. Shepelev, Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation, *AIP Conf. Proc.* 1793, 100038 (2017)

8) Bruno Albertazzi, Norimasa Ozaki, Vasily Zhakhovsky, Anatoly Faenov, Hideaki Habara, Marion Harmand, Nicholas Hartley, Denis Ilnitsky, Nail Inogamov, Yuichi Inubushi, Tetsuya Ishikawa, Tetsuo Katayama, Takahisa Koyama, Michel Koenig, Andrew Krygier, Takeshi Matsuoka, Satoshi Matsuyama, Emma McBride, Kirill Petrovich Migdal, Guillaume Morard, Haruhiko Ohashi, Takuo Okuchi, Tatiana Pikuz, Narango Purevjav, Osami Sakata, Yasuhisa Sano, Tomoko Sato, Toshimori Sekine, Yusuke Seto, Kenjiro Takahashi, Kazuo Tanaka, Yoshinori Tange, Tadashi Togashi, Kensuke Tono, Yuhei Umeda, Tommaso Vinci, Makina Yabashi, Toshinori Yabuuchi, Kazuto Yamauchi, Hirokatsu Yumoto and Ryosuke Kodama, Dynamic fracture of tantalum under extreme tensile stress, *Science Advances*, vol. 3, no. 6(2017)

9) K.P. Migdal , Yu.V. Petrov, D.K. Il'nitsky, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, K.V. Khishchenko, D.V. Knyazev, P.R. Levashov, Heat

conductivity of copper in two-temperature state, *Appl. Phys. A* 122(4), 408 (2016)

10) S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, A.A. Yurkevich, D.K. Ilnitsky, N.A. Inogamov, M.B. Agranat, Ablation of gold irradiated by femtosecond laser pulse: Experiment and modeling, *J. Phys.: Conf. Ser.* 774, 012097 (2016)

11) N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, D.K. Ilnitsky, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Tomita, T. Kawachi, Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump—X-ray probe experiment, *Appl. Phys. B* 119(3), 413-419 (2015)

12) N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, Y.V. Petrov, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, D.K. Ilnitsky, Y.N. Emirov, P.S. Komarov, C.W. Miller, I.I. Oleynik, M.B. Agranat, A.V. Andriyash, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Electron-Ion Relaxation, Phase Transitions, and Surface Nano-Structuring Produced by Ultrashort Laser Pulses in Metals, *Contrib. Plasma Phys.*, 53(10), 796-810 (2013)

13)N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, Y.V. Petrov, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, K.P. Migdal, D.K. Ilnitsky, Y.N. Emirov, K.V. Khishchenko, P.S. Komarov, V.V. Shepelev, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, I.I. Oleynik, V.E. Fortov, Ultrashort laser-matter interaction at moderate intensities: two-temperature relaxation, foaming of stretched melt, and freezing of evolving nanostructures, *Proc. SPIE*, 9065, 906502 (2013)

14) Н.А. Иногамов, В. В. Жаховский, Ю.В. Петров, В.А. Хохлов, С.И. Ашитков, К.П. Мигдал, Д. К. Ильницкий, Ю.Н. Эмиров, П.С. Комаров, М.Б. Агранат, С.И. Анисимов, В.Е. Фортов, Действие ультрако-

роткого лазерного импульса на металлы: двухтемпературная релаксация, вспенивание расплава и замораживание разрушающейся нанопены, Оптический журнал, 81(5), 5-26 (2014)

Другие научные труды

15) V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.V. Shepelev, D.K. Ilitsky, Thin 10-100 nm film in contact with substrate: Dynamics after femtosecond laser irradiation, J. Phys.: Conf. Ser. 653, 012003 (2015)

16) K.P. Migdal, D.K. Ilitsky, Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, Equations of state, energy transport and two-temperature hydrodynamic simulations for femtosecond laser irradiated copper and gold, J. Phys.: Conf. Ser. 653, 012086 (2015)

17) Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, В.А. Хохлов, К.В. Хищенко, Ю.В. Петров, Д.К. Ильницкий, К.П. Мигдал, Роль геометрических параметров при фемтосекундной лазерной абляции, Физико-химическая кинетика в газовой динамике, т. 15, вып. 5 (2014)

В статьях, выполненных в соавторстве и относящихся к первым двум главам диссертации [3] - [17], автору принадлежат все результаты, посвященные численному моделированию поведения материала под действием лазерного излучения в рамках континуального подхода, чему и посвящена настоящая диссертация. Автор также принимал участие в обсуждении полученных результатов и написании этих статей. Остальные соавторы занимались проведением экспериментов, моделированием изучаемых процессов методом молекулярной динамики, получением теплофизических параметров электронной подсистемы, а также табличных уравнений состояний ионной подсистемы, если, конечно, не использова-

лись общепризнанные аналитические зависимости.

В статьях [1], [2], относящихся к третьей главе, автору принадлежит принципиальная идея работ, постановка задачи, математическое моделирование, соавторы принимали участие в обсуждении полученных результатов.

Благодарности

Автор считает своим приятным долгом выразить благодарность научному руководителю ВНИИА А.В. Андрияшу, своему непосредственному руководителю С.Е. Куратову, научному руководителю диссертационной работы Н.А. Иногамову, своим коллегам В.В. Жаховскому, К.П. Мигдалу, С.А. Дьячкову, К.Е. Городничеву, П.П. Захарову, соавторам В.А. Хохлову и Ю.В. Петрову, профессору А.Б. Киселеву, а также своим оппонентам С.Г. Пшеничному, А.А. Груздкову и В.В. Стегайлову.

Глава 1

Упругое поведение ионной подсистемы при воздействии ультракороткого лазерного импульса¹

Изучением высокоскоростного деформирования материалов интенсивно занимаются с сороковых годов двадцатого века [1]. После изобретения лазеров эти источники мощного излучения стали широко использоваться для возбуждения ударных волн в материалах. В диагностических системах, позволяющих наблюдать скорость движения свободной поверхности нагружаемого образца, лазеры нашли также широкое применение (системы VISAR - Doppler Velocity Interferometer System for Any Reflector и ORVIS - Optically Recording Velocity Interferometer System [1, 4]). Вышеуказанные системы имеют исключительное значение для диагностики импульсных явлений в наносекундном и микросекундном диапазоне времени. Освоение фемтосекундных источников лазерного излучения позволило радикально улучшить пространственно-

¹Основные результаты этой главы опубликованы в статьях [3], [5], [8], [9], [11], [14], [16], [17] из списка публикаций, приведенного во Введении.

временные масштабы нагружения и диагностики. С их помощью диапазон достигаемых давлений расширился до 1-3 Мбар (1 Мбар = 100 ГПа). Исключительно важное значение имеет экспериментальная методика на их основе ("pump-probe"), позволяющая изучать быстропротекающие процессы в нагружаемых фемтосекундным импульсом материалах на субпикосекундных масштабах времен. Типичная схема эксперимента "pump-probe" показана на Рис. 1.1.

Генерация процессов и их измерение проводятся с помощью пары ультракоротких импульсов, действующих на основе принципа стробоскопа. Первым действует мощный нагревающий импульс (pump), а вторым - слабый зондирующий импульс (probe). Импульсы накачки и диагностики получают из одного исходного импульса путем его деления. Они идут по путям разной оптической длины и попадают на мишень в разные моменты времени. Задержка по времени прибытия t_{delay} зондирующего импульса относительно импульса накачки регулируется за счет контролируемого оптического пути. Таким образом получают набор по t_{delay} значений фазы и амплитуды зондирующего импульса, отраженного от места воздействия нагревающего импульса. Фазы и амплитуды импульса дают информацию об изменении оптических характеристик материала во времени, по ним судят об эволюции вещества в зоне нагрева. Также зондирующие импульсы можно направлять на тыльную (не облученную) сторону образца материала, что позволяет получать временную зависимость смещения и массовой скорости этой поверхности.

Фемтосекундные эксперименты позволяют изучить начальные этапы формирования скачков уплотнения. Такие измерения невозможно осуществить в рамках традиционных экспериментальных методик

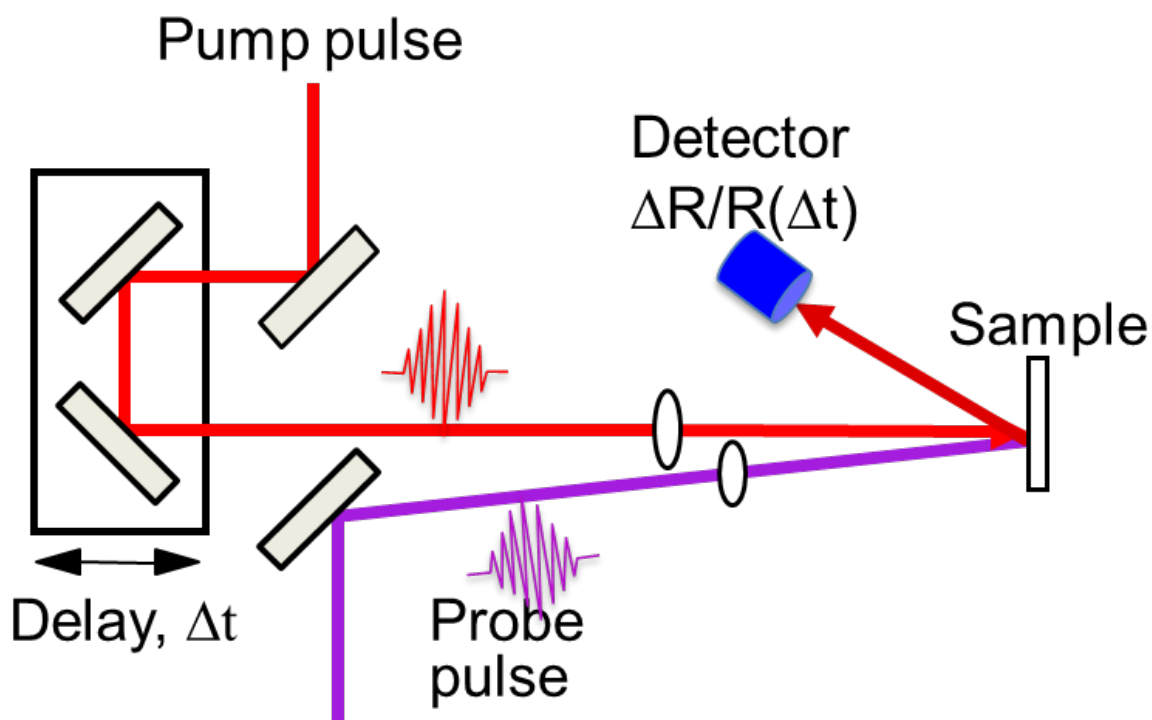


Рис. 1.1. Типичная схема эксперимента [6]. Зондирующий импульс можно также направлять на тыльную сторону образца.

(наносекундные лазеры, ударники и т.п.), которые работают в других пространственно-временных масштабах. В результате были получены данные по поведению материалов при высоких темпах деформации $\dot{V}/V \approx 10^9 \text{ с}^{-1}$.

Опишем основные процессы, происходящие при облучении мощным лазерным импульсом материала [2, 3]. Вся энергия лазерного излучения поглощается электронным газом в узком приповерхностном слое материала. При этом ионная подсистема остается холодной, поскольку время выравнивания энергий между электронной и ионной компонентами намного больше, чем время воздействия импульса. Далее начинаются процессы электронной теплопроводности вглубь образца и выравнивание электронной и ионной температур (электрон-ионный теплообмен).

Это неравновесное двухтемпературное состояние с горячими электронами и холодными ионами длится несколько пикосекунд после облучения и получило обозначение 2T -WDM (warm dense matter). Основы теории двухтемпературного состояния были заложены в [2, 3], где решались уравнения теплопроводности для ионной и электронной температуры с учетом обмена энергией между ними. Далее эта модель была расширена за счет учета гидродинамических эффектов в решетке в работах [10, 11]. В этих работах не учитывались упруго-пластические свойства ионной решетки, поскольку считалась, что нагрев и большие давления переводят ее в состояние идеальной жидкости. Это приближение было оправдано для описания явлений, рассматриваемых в тех работах.

Обычная картина прохождения ударных волн в сплошных средах описывается переходом из начального термодинамического состояния вещества в конечное на ударной адиабате Гюгонио [1, 12, 13]. Для твердых тел существуют две ветви ударной адиабаты (упругая и пластическая), которые соединяются в точке перегиба σ_{HEL} или HEL (Hugoniot elastic limit) (Рис. 1.2 и 1.3 взяты из [14]), выше которой недостижимы устойчивые упругие состояния. Для ударных волн интенсивностью меньше HEL, образуется упругая волна, которая движется со скоростью соответствующей наклону линии Рэлея, соединяющей начальное и конечное состояние материала на адиабате Гюгонио. При повышении интенсивности УВ образуются как упругие так и пластические волны с различными точками начальных и конечных состояний и, соответственно, разными скоростями распространения. Поскольку считается, что амплитуда упругой волны не может превышать HEL, а на амплитуду пластической волны таких ограничений нет, при дальнейшем повышении амплитуды падаю-

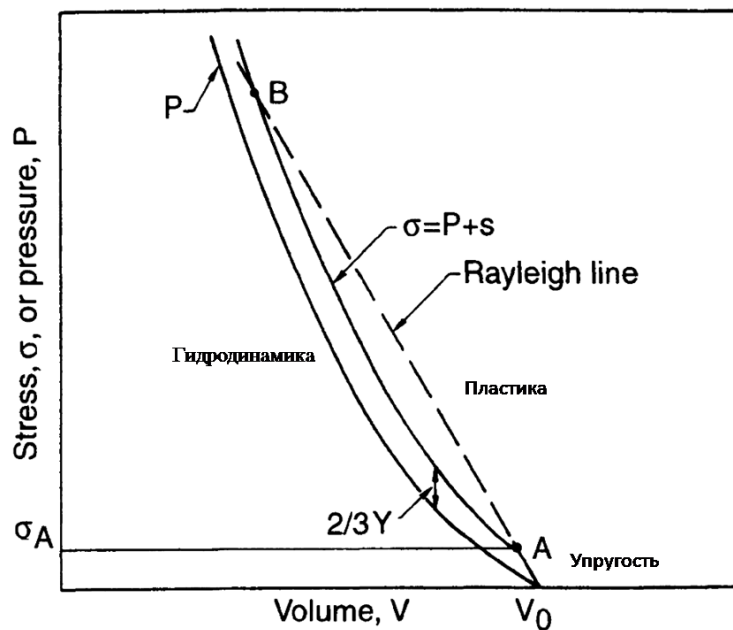


Рис. 1.2. Диаграмма деформирования упруго-пластических тел[14], $\sigma_A = \sigma_{HEL}$ - динамический предел упругости, Y - предел текучести.

щей УВ возникает ситуация, при которой более быстрая пластическая волна догоняет и поглощает упругий предвестник, и в системе остается одна сильная пластическая волна.

Однако, как известно, упруго-пластические превращения не могут происходить мгновенно, а имеют свое характерное время релаксации τ_p . В работе [15] с использованием соотношения Орована была проведена оценка времени релаксации для меди $\tau_p \approx 100$ пс. Если время сжатия меньше времени релаксации $t_c \ll \tau_p$, то материал остается в упругом состоянии. При увеличении прикладываемого давления время релаксации уменьшается τ_p , но остается конечным. Таким образом, можно ожидать существования в сжатом материале метастабильных упругих состояний выше HEL пока не произойдет релаксация напряжений за счет пластических переходов.

Первые наблюдения по распространению упругих волн большой

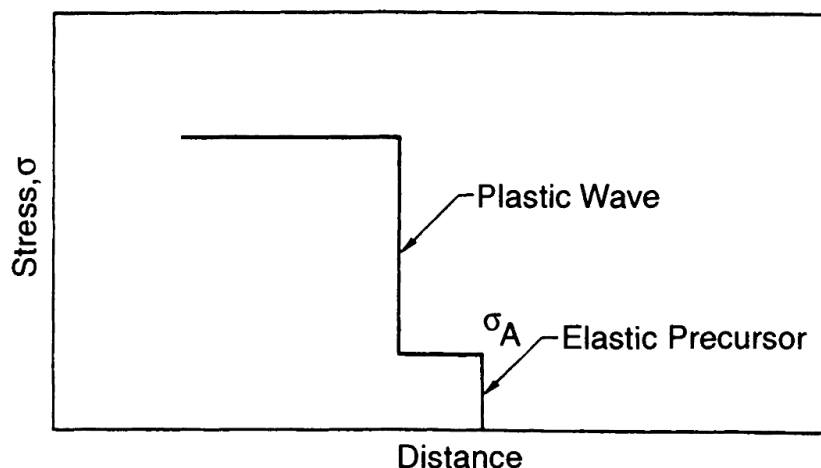


Рис. 1.3. Пространственный профиль упруго-пластической волны[14], $\sigma_A = \sigma_{HEL}$ - динамический предел упругости.

амплитуды в кристаллах алюминия и никеля были проведены в [7, 8]. Однако исследователи, получив сильное превышение скорости распространения волны над скоростью пластической волны, объяснили данный результат погрешностью наблюдений. В дальнейшем, результаты об упругом поведении кристалла при ультракоротком ударном сжатии получили подтверждение в работах [16, 17, 19]. Было обнаружено продолжение упругой ударной адиабаты далеко за принимаемое обычно значение динамического предела упругости (HEL - Hugoniot Elastic Limit) p_{HEL} . Значение p_{HEL} для различных материалов приведены, например, в [1, 4]. Доказательство того, что в фемтосекундных опытах распространяются именно мощные упругие скачки, опирается на согласие между экспериментом [16] и теорией [17].

Суть изучаемых процессов хорошо поясняет Рис. 1.4 [18]. На нем показана плоскость $(V/V_0, p)$, где V_0 - удельный объем перед фронтом волны. Точка $(1,0)$ на этой плоскости представляет состояние невозмущенного кристалла перед волной. В экспериментах достаточно больших

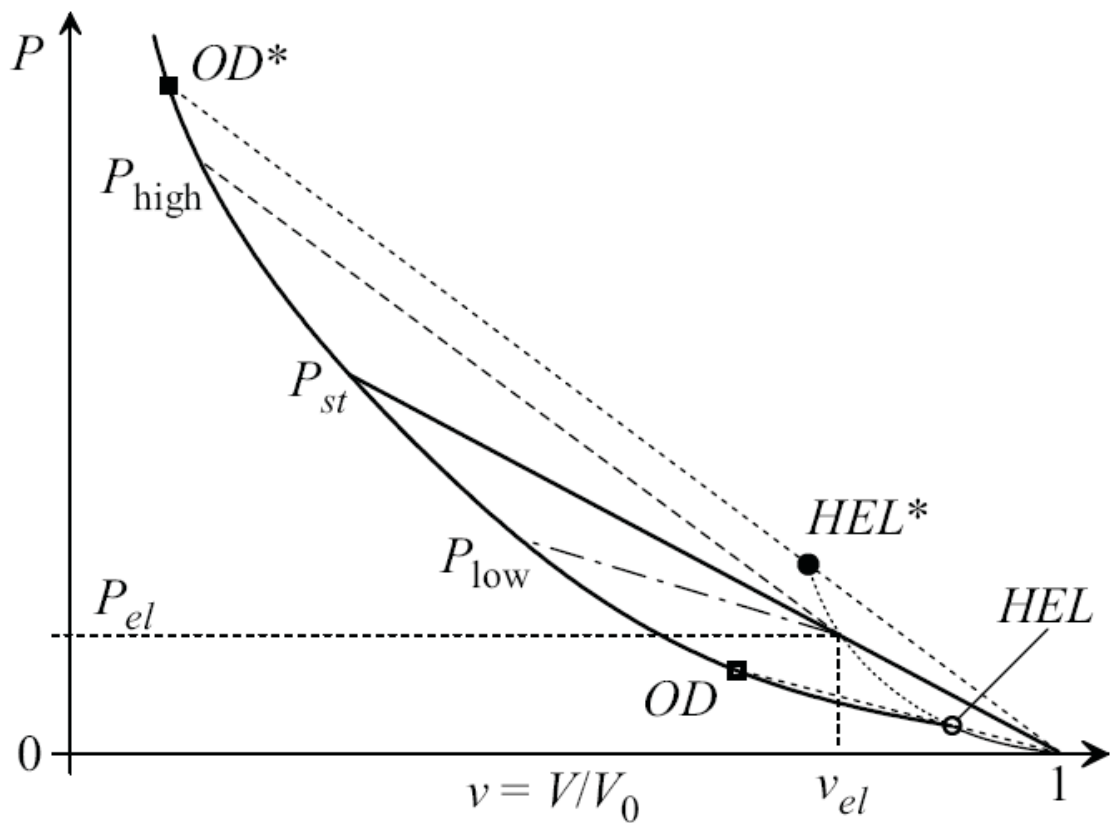


Рис. 1.4. Схема взаимного расположения упругой и пластической ударных адиабат[18]. Метастабильный (по отношению к зарождению дислокаций) участок HEL-HEL* упругой ударной адиабаты изображен пунктиром. При $p_{high} > p_{st}$ пластический скачок догоняет упругий предвестник, а при $p_{low} < p_{st}$ пластический фронт отстает от упругого. Это следует из наклона соответствующих прямых Рэлея.

пространственных масштабов (от долей мм и больше) упругая ударная адиабата ограничена отрезком кривой между точками (1,0) и HEL. Точка HEL соответствует обычному значению динамического предела упругости [1] (для различных марок алюминия $p_{HEL} \approx 0.04 - 1$ ГПа). В работах [16, 17] доказано существование продолжения упругой адиабаты при $p > p_{HEL^*}$. Это продолжение соответствует пунктирной кривой, соединяющей точки HEL и HEL* на Рис. 1.4. Как показано в работах [25, 26], это продолжение заканчивается в точке HEL* с давлением $p_{HEL^*} \approx 33$ ГПа для ударного сжатия в направлении 111. В [25, 26] рассматриваются монокристаллы алюминия с концентрацией вакансий в расчете на один атом от нуля до 10^{-3} . Вариация этой концентрации не сказывается на значении p_{HEL^*} .

В работах [25, 26] обнаружено существование нового режима распространения УВ (см. ниже режим III). С учетом этого в классификации волн выделяются четыре режима:

(I). При достаточно малых давлениях распространяется чисто упругая стационарная УВ. Прямая Рэлея соединяющая начальное (1,0) и конечное состояния перед и за фронтом волны, является отрезком прямой между точкой (1,0) на рис. 1.4 и точкой с давлением в диапазоне $0 < p < p_{HEL}$ на упругой ветви ударной адиабаты. Стационарность волны означает, что, во-первых, развитие во времени получается параллельным переносом профиля волны, и, во-вторых, скорость распространения и наклон прямой Рэлея не меняются со временем. За фронтом волны вещество остается в упругом состоянии.

(II). С ростом давления возникает нестационарный двухволновой, в котором распространяются упругий предвестник и следующая за ним

медленная пластическая ударная волна[1, 4]. Расстояние между предвестником и пластическим фронтом растет, поскольку скорость предвестника выше. На плоскости $(V/V_0, p)$ на Рис. 1.4 режим II оставлен из двух прямых Рэлея. Одна прямая соединяет точки $(1,0)$ и HEL, а другая - точки HEL и (v, p) , $v = V/V_0$. Состояние (v, p) в диапазоне давлений $p_{HEL} < p < p_{OD}$ находится на отрезке пластической ветви ударной адиабаты между точками HEL и OD, см. Рис. 1.4. Точка на этом отрезке представляет пластически деформированное состояние за пластической УВ. Наклон прямой $(1,0)$ -HEL выше, чем наклон прямой HEL- (v, p) . В точке OD при $p \rightarrow p_{OD}$ эти наклоны сравниваются, поскольку три точки $(1,0)$, HEL и OD на рис. 1.4 лежат на прямой. Анализу пластической адиабаты в окрестности точки OD посвящена работа [28]. В работе [29] рассмотрены медленные пластические волны (скорость поршня $u_p \sim 100\text{м/с}$) при давлении p_p за пластическим фронтом, лишь немного превышающих p_{HEL} .

(III). Стационарная одноволновая двухзонная конфигурация соответствует прямой, проходящей через три точки $(1,0)$, (v_{el}, p_{el}) и p_{st} на рис. 1.4. Точка p_{st} принадлежит пластической ударной адиабате. При постоянном давлении на поршне p_{st} , которое лежит в пределах $p_{OD} < p_{st} < p_{OD}^*$, ширина упругой зоны d_{el} между упругим и пластическим фронтами не меняется со временем. В этом режиме скорости упругого и пластических фронтов равны и, соответственно, имеются две стационарные зоны сжатия - упругая и пластическая. Так как подобная двухзонная конфигурация движется как единое целое и не изменяется во времени, то она должна рассматриваться как стационарная одноволновая. На рис. 1.4 состояние вещества в упругой зоне представлено точ-

кой e_l с координатами (v_{el}, p_{el}) . Это состояние находится на найденном в статьях [16, 17] продолжении упругой адиабаты выше HEL (жирная пунктирная линия на рис. 1.4). Упругое вещество жестче пластически деформированного, соответственно упругая адиабата идет круче пластической. Поэтому прямая $(1,0)$ - e_l - p_{st} сначала пересекает упругую ударную адиабату. При дальнейшем повышении давления на поршне $p_{st} \rightarrow p_{OD}^*$ толщина d_{el} упругой зоны в двухзонной структуре уменьшается. При этом давление p_{el} в упругой зоне стремится к предельному значению p_{HEL}^* . Прямой, проходящей через три точки $(1,0)$, HEL^* и OD^* , соответствует волна, в которой толщина упругой зоны d_{el} становится порядка межатомного расстояния.

(IV). При высоком постоянном давлении на поршне $p_p > p_{OD}^*$ по веществу бежит чисто пластическая волна, в которой практически отсутствует упругая зона. В этом режиме волна образует стационарную одноволновую конфигурацию. Ее прямая Рэлея проходит выше точки HEL^* на рис.1.4.

Прежняя классификация состояла из трех режимов: I, II и IV. Поясним причины, по которым режим III оставался неизвестным. Скорость УВ D растет с давлением поршня p_p на участке давлений I. При увеличении p_p в диапазоне II ($p_{HEL} < p_p < p_{OD}$) скорость упругого предвестника D_{HEL} фиксирована, а скорость пластического фронта $D_{pl}(p)$ возрастает с p_p . Соответственно расстояние между фронтами растет медленнее при увеличении p_p . Другими словами, скорость расширения упругой зоны со временем, $D_{HEL} - D_{pl}(p)$, убывает и обращается в нуль при $p_p \rightarrow p_{OD}$. При этом считалось, что при $p_p > p_{OD}$ (то есть выше точки OD на рис. 1.4) скорость пластической УВ начинает превышать предельную ско-

рость D_{HEL} распространения упругого сигнала, и пластический скачок полностью поглощает упругий. Поэтому полагали, что с ростом давления происходит переход в точке OD из режима II в режим IV с одноволновой конфигурацией без упругой зоны. Из расчетов [25, 26] следует, что это не так - имеется промежуточный режим III с конечной упругой зоной.

Все численные результаты, описывающие поведение упругих волн большой амплитуды и образование двухзонной волновой структуры, о которых говорилось выше, были получены из расчетов методом молекулярной динамики [23]. Метод МД заключается в численном интегрировании классических уравнений движения Ньютона для каждой частицы системы. Силы, действующие на частицы, вычисляются как производные соответствующего потенциала межчастичного взаимодействия. Метод молекулярной динамики достаточно точно описывает быстропротекающие процессы в тонких слоях материалов (около 1 мкм), но требует больших вычислительных затрат и соответствующих супер компьютеров. Также метод МД не позволяет описывать двухтемпературное состояние материала (поведение электронной подсистемы и ее взаимодействие с решеткой), поэтому расчеты обычно начинаются с момента полной релаксации электронной температуры. Все расчеты методом молекулярной динамики, используемые в этой работе, если не сказано иное, проведены Жаховским В.В.

В тоже время существуют гидродинамические коды [5, 18], которые позволяют детально описывать двухтемпературное состояние системы. Они позволяют получить результаты расчета за небольшое время при использовании персонального компьютера, поскольку решают систему уравнений одномерной гидродинамики. В них для ионной части мож-

но использовать широкодиапазонное уравнение состояния [21, 22]. Для электронной же подсистемы все термодинамические свойства и коэффициент электрон-ионного обмена рассчитываются квантово-механическим методом DFT (метод функционала плотности). Расчеты свойств электронного газа, используемые при моделировании в данной работе, получены Мигдалом К.П. и подробно описываются в его диссертации [20]. Но при сравнении результатов моделирования эксперимента методом молекулярной динамики и двухтемпературной гидродинамики обнаружилось сильное запаздывание УВ, полученной из гидродинамических расчетов по сравнению с результатами эксперимента и результатами МД (Рис.1.5 из [5]).

Возникла задача об улучшении двухтемпературной континуальной модели за счет учета упругих свойств ионной подсистемы. Такая модификация позволила бы более точно описывать эксперименты.

1 Модель и уравнения

При воздействии ультракороткого лазерного импульса металл переходит в двухтемпературное состояние, в котором температура электронной подсистемы значительно превышает температуру ионов. В данном состоянии металл находится несколько пикосекунд, затем температуры выравниваются. Нужно исследовать процессы, происходящие до выравнивания температур, поскольку именно они формируют слой нагреваемого вещества, который влияет на последующее распространение возмущения вглубь материала. Для этого используется двухтемпературный гидродинамический подход, берущий свое начало в двухтемператур-

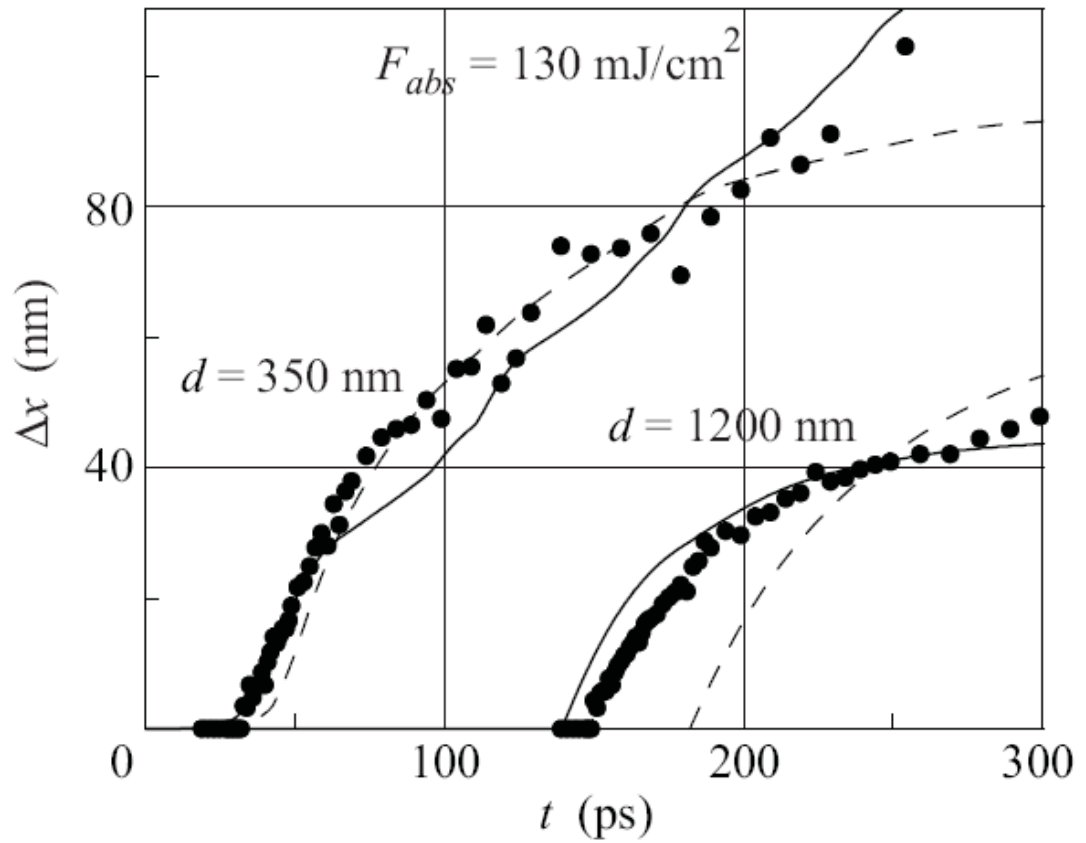


Рис. 1.5. Сопоставление теории и опытов из [5]. Сплошные кривые - МД, штриховые - 2Т-гд, точки - эксперимент. Показаны зависимости смещений тыльной поверхности пластин двух разных толщин от времени. Наблюдается сильное запаздывание результатов 2Т-гд от МД и эксперимента для толстой пластины.

ной модели [2, 3], которая потом была расширена для учета гидродинамических явлений [10, 11].

Рассмотрим задачу о взаимодействии единичного ультракороткого лазерного импульса с металлической фольгой. Поскольку в экспериментах характерная ширина пятна на поверхности металла на порядки превосходит глубину прогрева, будем использовать одномерное приближение. Выберем ось x направленной перпендикулярно облучаемой поверхности внутрь пленки. Введем массовую лагранжеву координату m :

$$dm = \rho dx, m = \int_{x_0}^x \rho dx \quad (1.1)$$

Тогда одномерная система уравнений двухтемпературной гидродинамики в выбранном лагранжевом представлении с учетом поглощения лазерного излучения, электронной теплопроводности и электрон-ионной релаксации примет следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\rho} \right) = \frac{\partial u}{\partial m}, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial m} = 0, \quad (1.3)$$

$$u = \frac{\partial x}{\partial t}, \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial \epsilon_e}{\partial t} + P_e \frac{\partial u}{\partial m} = \frac{\partial}{\partial m} \left(\kappa \rho \frac{\partial T_e}{\partial m} \right) - \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i) + J_L, \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial \epsilon_i}{\partial t} + P_i \frac{\partial u}{\partial m} = \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i) \quad (1.6)$$

Баланс энергии в двухтемпературном приближении $T_e > T_i$ разделяется на два независимых уравнения энергии для электронной и ионной подсистемы (e+i) по сравнению с однотемпературным приближением, в котором $T_e = T_i = T$. Уравнения 2Т приближения плавно переходят в 1Т уравнения внутри 2Т гидродинамического кода по мере установления

равновесия в двухтемпературной системе. В уравнении для ионной энергии ионной теплопроводностью пренебрегаем, поскольку в наших задачах электронная теплопроводность в десятки раз больше ионной. Для учета гидродинамических движений, как видно, к закону сохранения энергии добавляются выражения сохранения массы и импульса, а также дополнительные слагаемые в закон сохранения энергии ($p_e u_x, p_i u_x$ - работа расширения, здесь $u_x \equiv \partial u / \partial x$). Далее для описания распространения упругих волн добавляется учет изотропных упругих свойств кристалла.

Система уравнений в таком случае, записанная в напряжениях и деформациях выглядит следующим образом:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) = \frac{\partial v}{\partial m} \quad (1.7)$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{\partial \sigma}{\partial m} \quad (1.8)$$

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (1.9)$$

$$\frac{dE_e}{dt} + P_e \frac{\partial v}{\partial m} = \frac{\partial}{\partial m} \left(\kappa_e \rho \frac{\partial T_e}{\partial m} \right) - \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i) + J_L \quad (1.10)$$

$$\frac{dE_i}{dt} - \sigma_i \frac{\partial v}{\partial m} = \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i) \quad (1.11)$$

$$\sigma = -P_e + \sigma_i \quad (1.12)$$

$$\sigma_i = -P_i + s_i \quad (1.13)$$

$$\frac{ds_i}{dt} = \frac{4}{3} \mu \dot{\epsilon} \quad (1.14)$$

$$\dot{\epsilon} = \rho \frac{\partial v}{\partial m}, \quad (1.15)$$

здесь ρ - плотность материала, v - массовая скорость, σ - полное напряжение, E_e и E_i - удельная внутренняя энергия электронной и ионной подсистем, соответственно, P_e и P_i - давления электронного газа и ион-

ной подсистемы, σ_i - напряжение ионной подсистемы, s_i - девиатор ионной подсистемы, ϵ - относительная деформация, μ - модуль сдвига, x - эйлерова координата, κ_e - коэффициент теплопроводности электронного газа, α_{ei} - коэффициент электрон-ионного теплообмена, J_L - лазерный источник нагрева.

Для девиатора выбрано выражение соответствующее одноосной упругой деформации, в этом случае модуль всестороннего сжатия эффективно увеличивается [12]:

$$K_{el} = K + \frac{4}{3}\mu. \quad (1.16)$$

Модуль сдвига μ составляет значительную величину по сравнению с модулем всестороннего сжатия K , следовательно, упругая скорость звука $c_{el} = \sqrt{(K + 4\mu/3)/\rho}$ значительно больше объемной скорости звука $c_{pl} = \sqrt{K/\rho}$. Для алюминия и никеля эти параметры: $K, \mu[GPa], c_{el}, c_{pl}[km/s] = (76, 26, 6.4, 5.3)$ и $(180, 76, 5.3, 4.5)$, соответственно. Видна большая разница в скоростях распространения упругих и объемных волн, что и должно объяснить невозможность описания экспериментов без учета упругих свойств при континуальном подходе.

Для свободной пленки граничные условия берутся как:

$$\sigma|_L = 0 \quad (1.17)$$

$$\sigma|_R = 0 \quad (1.18)$$

$$\kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial m}|_L = 0 \quad (1.19)$$

$$\kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial m}|_R = 0, \quad (1.20)$$

$$(1.21)$$

равенство нулю напряжений на границах и равенство нулю электронных

тепловых потоков. Начальные условия - нулевые напряжения и комнатная равновесная температура. Лазерный источник нагрева брался в виде гауссова по времени и спадающему по экспоненциальному закону по толщине пленки, и соответствовал экспериментам.

Энергия поглощенного лазерного излучения J_L единицей лагранжевой координаты в единицу времени:

$$J_L = \frac{F_{abs}}{\tau_L \delta \sqrt{\pi} \rho} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau_L^2}\right) \exp\left(-\frac{x(m, t) - x(m_0, t)}{\delta}\right), \quad (1.22)$$

где F_{abs} - энергия лазерного излучения, поглощенная единицей облученной поверхности, δ - толщина скин-слоя, $x(m, t)$ - траектория лагранжевой частицы с координатой m , m_0 - лагранжева координата поверхности металла, на которую падает излучение, τ_L - длительность лазерного импульса.

Данная система уравнений решалась неявным конечно-разностным методом [24] с расщеплением по физическим процессам. Для подавления осцилляций на фронте ударной волны вводилась искусственная вязкость. Программная реализация этого численного алгоритма в дальнейшем будет называться 2Т-HD-Elast, без учета упругих свойств - 2Т-HD. Далее рассмотрим описание моделирования воздействия УКЛИ на металлы с помощью данных расчетных кодов.

2 Сдвиговое напряжение в твердом теле до его плавления в двухтемпературной стадии и распространение волны сжатия из жидкости в твердое тело

Рис. 1.6 - 1.8 представляет результаты моделирования кодом 2Т-ND-Elast действия ультракороткого лазерного импульса (УКЛИ) на алюминиевую пленку, расположенную на стеклянной подложке. Параметры УКЛИ брались следующие: длительность $\tau_L = 100$ фс, поглощенная энергия $F_{abs} = 0.13$ Дж/см², глубина скин-слоя 15 нм. Время отсчитывалось от положения максимума гауссовского УКЛИ, координата $x = 0$ соответствует начальному положению границы алюминий-стекло. Стекло расположено ближе к источнику лазерного излучения, т.е. в области $x < 0$. Граница стекло-алюминий движется влево во время действия лазерного нагрева. Стекло предполагается не проводящим тепло, акустический импеданс Z стекла - немного ниже импеданса алюминия. Мы пренебрегаем этой разницей и используем широкодиапазонный УРС алюминия для описания поведения стекла. На ранних двухтемпературных стадиях вся поглощенная металлом энергия осаждается во внутреннюю электронную энергию E_e , см. Рис. 1.6.

Рис. 1.7 показывает процесс упругого растяжения алюминия за счет теплового расширения, формирования отрицательного напряжения и релаксации этого напряжения за счет плавления. Показаны характеристики процесса на три момента времени. Конечный интервал времени необходим для нагрева ионной подсистемы до температур, превышающих температуру плавления, которые соответствуют показанным давлениям. В течение этого промежутка времени нагретая твердая фаза

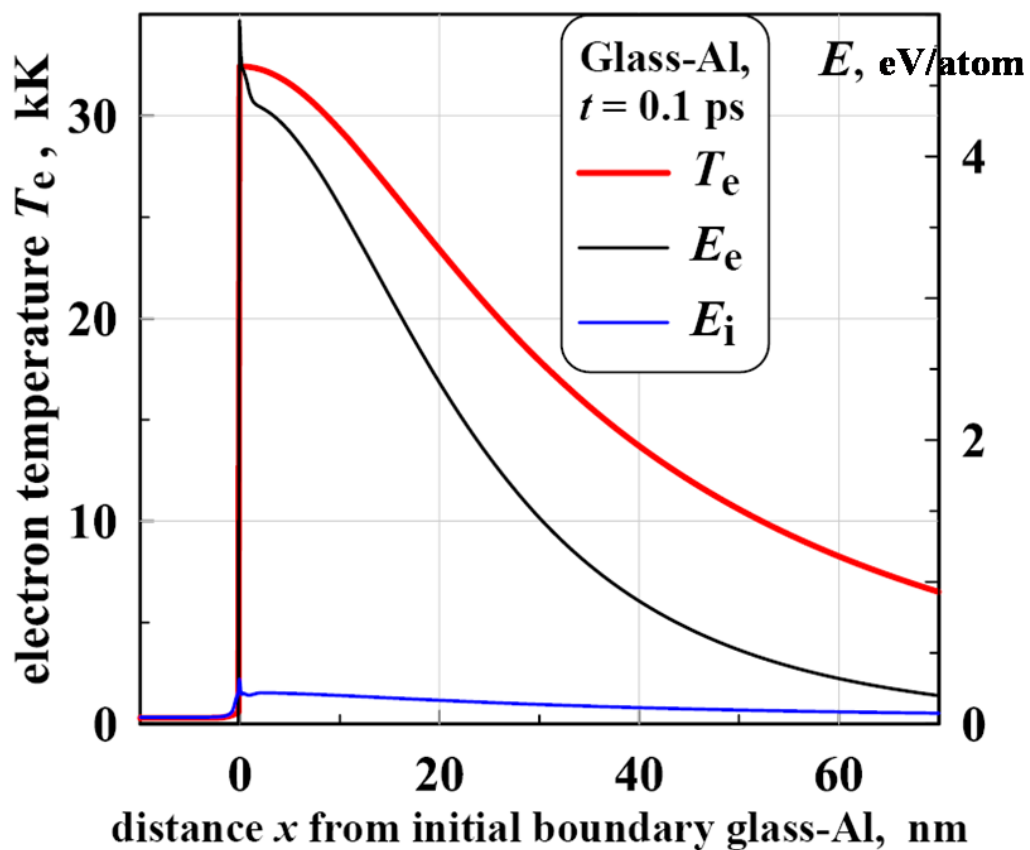


Рис. 1.6. Пространственные распределения температуры и энергии в конце действия лазерного импульса, при котором достигаются максимальные значения термодинамических величин.

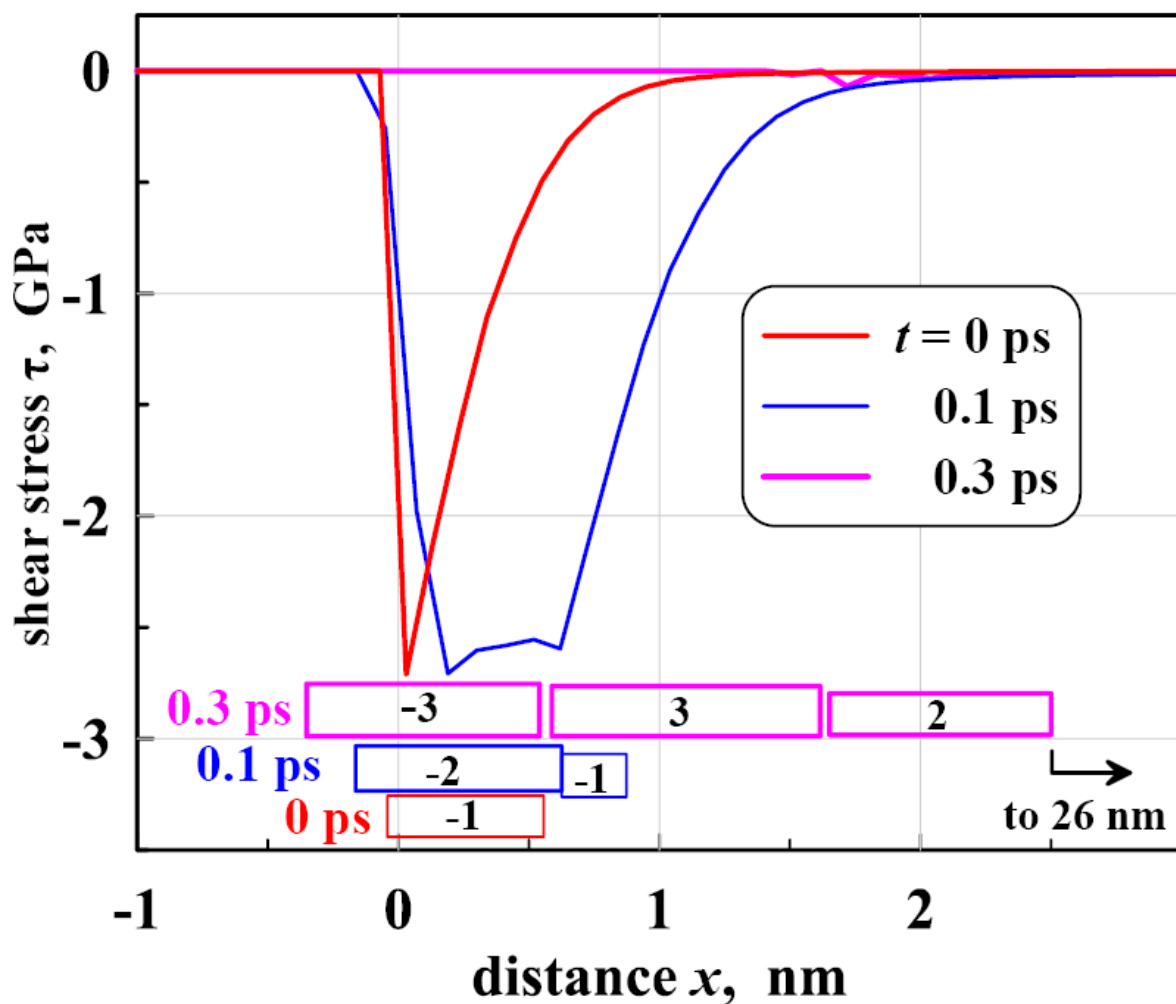


Рис. 1.7. Нагрев кристаллической решетки электрон-ионным теплообменом, расширение алюминиевого образца по направлению к стеклу, появление отрицательного сдвигового напряжения (когда продольное напряжение p_{xx} меньше поперечного p_{\perp}), плавление твердого тела и обнуление сдвиговых напряжений.

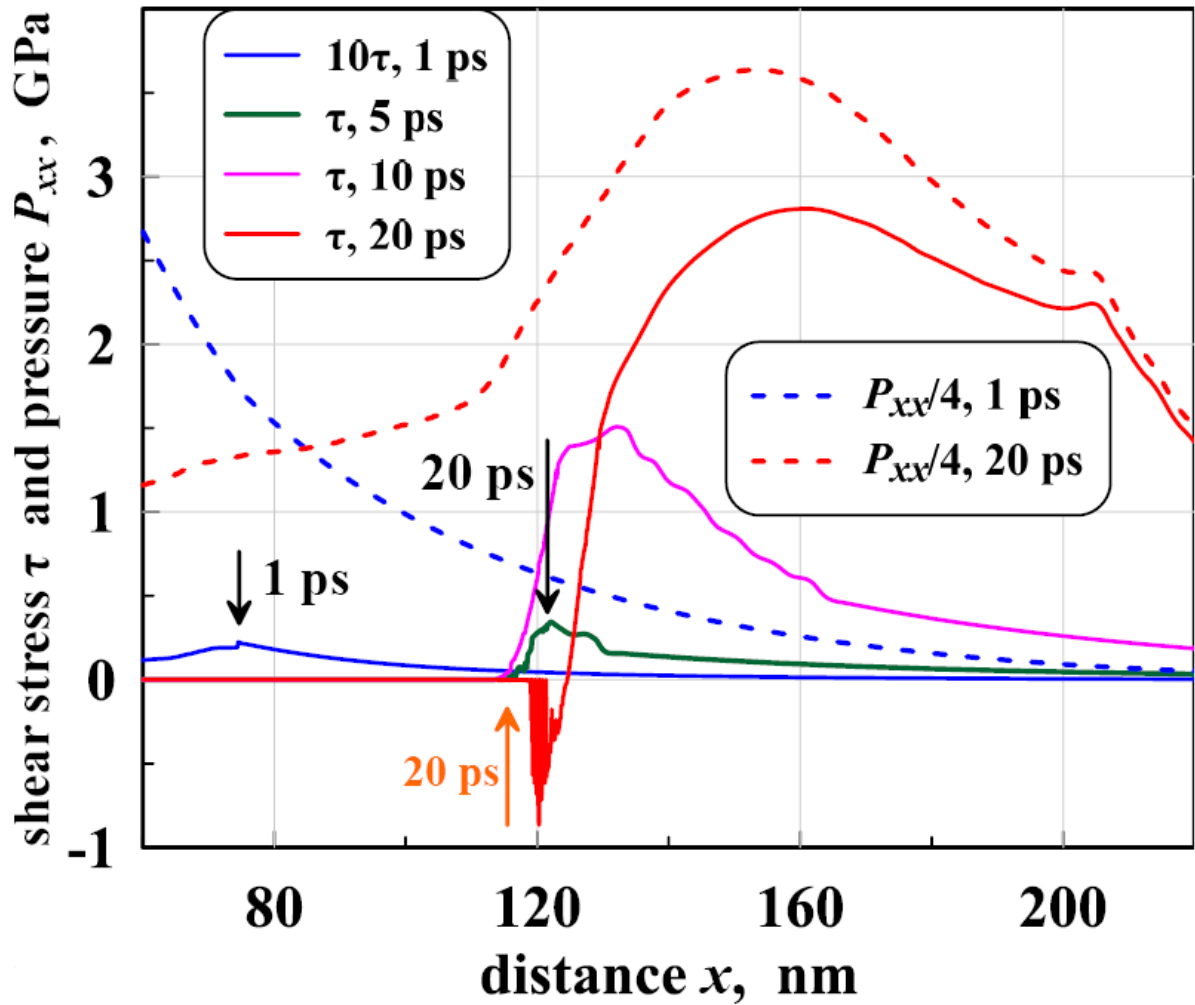


Рис. 1.8. Прохождение волны сжатия из расплава в твердую фазу, см. также [27]. Черными стрелками отмечены положения точки солидуса на моменты времени 1 и 20 пс, оранжевыми - ликвидус в момент времени $t = 20$ пс. Наблюдается значительное уменьшение со временем толщины зоны смеси твердая фаза-жидкость. Изменение знака сдвигового напряжения в момент времени 20 пс происходит в горячем кристалле вблизи границы твердая фаза-жидкость, где выполняется условие $p_{xx} < p_{\perp}$ после прохождения максимума волны сжатия из слоя расплава, см. подробности в тексте.

вблизи границы алюминий-стекло растягивается в направлении стекла в основном за счет электронного давления p_e . В результате растяжения появляется отрицательное сдвиговое напряжение (знак напряжения в данной работе считаем отрицательным при растяжении). Цифрами на Рис. 1.7 обозначены: 1,2,3 - твердая фаза, твердая фаза-жидкость(смесь), жидкость, это все стабильные фазы; -1,-2,-3 - метастабильные растянутые твердая, твердая-жидкая, жидкая фазы. Длины прямоугольников соответствуют толщинам обозначенных фаз на соответствующий промежуток времени. За время $0 \rightarrow 0.3$ пс сначала появляется тонкий слой растянутого кристалла «-1», затем появляется сосуществующий с ним растянутый слой твердое тело-жидкость, и далее этот кристалл плавится и сдвиговые напряжения падают до нуля. На момент времени 0.3 пс растянутая и сжатая жидкие фазы граничат справа с толстым слоем сжатой смеси твердое тело-жидкость. Слой этой смеси зажат между жидкой фазой слева и твердой фазой справа. Точка $x = 0.26$ нм при $t = 0.3$ пс соответствует текущему положению твердого тела. Наблюдается некоторое сжатие металла возле этой точки. Это вызывает формирование положительного напряжения τ , но поскольку на ранних двухтемпературных стадиях происходит сверхзвуковая электронная теплопередача, степень сжатия получается малой и соответственно величины этого положительного напряжения малы.

Перенос тепла проходит сверх-,транс- и до-звуковые стадии в течение временного промежутка, показанного на Рис. 1.8. Число Маха скорости смещения точки ликвидуса (точка полного плавления твердой фазы) падает с 5 до 0.02 за этот интервал. Намного позже на временах 0.1 - 1 нс процесс рекристаллизации вызывает затвердевание расплавленного

слоя алюминия, если толщина пленки значительно толще тепловой толщины $d_T \approx 100$ нм. Трансзвуковой перенос длится с 4 по 6 пс. На этой стадии когда происходит основной переход тепловой энергии в механическое движение. Профили термодинамических величин ионной подсистемы T_i, E_i, p_i имеют резкие перегибы. До трансзвукового переноса эти перегибы находились в точках солидуса (точка полной кристаллизации из расплава) и ликвидуса (точка полного плавления твердой фазы), но после него термодинамические перегибы отделились от динамических: особенности T_i, E_i остаются в этих точках, в то время как перегибы профиля давления отходят от них. Это составляет существо процесса испускания волны сжатия резко тормозящейся тепловой волной. Перегибы на профиле давления являются образами точек солидуса и ликвидуса. Они переносятся по характеристикам вглубь образца. Следы быстрого плавления видны как более пологие части профиля между акустическими образами солидуса и ликвидуса, например, на Рис. 1.8 профили p_{xx} и τ для $t = 20$ пс. Таким образом, наблюдается слабонелинейная акустическая волна. Ее крутизна постепенно возрастает по мере ее распространения, как будет показано в следующем разделе.

Результаты моделирования показывают интересную динамику взаимодействия между расплавом и твердой фазой алюминия. Наблюдается крутой изгиб (почти как разрыв) сдвигового напряжения $\tau = (p_{xx} - p_{\perp})/2$ при переходе через границу плавления, $\tau = 0$ в жидкой фазе (см. Рис. 1.8 и Рис. 1.9 - 1.11). Это означает, что поперечное напряжение $p_{\perp} = (p_{yy} + p_{zz})/2$ здесь круто убывает, поскольку продольное напряжение p_{xx} должно оставаться непрерывным при переходе через фронт плавления. Напряжение p_{\perp} выше, чем p_{xx} в слое кристалла, примыкающем к

фронту плавления. Динамическое связывание расплава и твердого тела может быть неустойчивым по отношению к пластическому возмущению, выражающемуся в испускании скачка сдвигового напряжения в сжатом твердом теле вблизи границы. Подобная пластическая неустойчивость в упругих волнах разрежения наблюдалось на границе между вакуумом (где $p_{\perp} = 0$) и одноосно сжатым твердым телом ($p_{\perp} > 0$) в [11]. Уменьшение величины скачка сдвигового напряжения и увеличение толщины переходного слоя выступают как стабилизирующие факторы. Также наблюдалось испускание дислокаций фронтом плавления при превышении некоторого порога напряжения p_{xx} [27].

Сравнение результатов расчетов по коду 2Т-НД-Elast и молекулярно динамических МД показано на Рис. 1.9 - 1.11. Твердое тело в упругом состоянии (без пластических превращений) начинается справа от точки солидуса. Закон Гука для одноосной деформации, записанный для изотропного упругого тела связывает продольное напряжение $p_{xx} = (K + 4\mu/3)\epsilon_{xx}$ с поперечным $p_{yy} = p_{zz} = p_{\perp} = (K - 2\mu/3)\epsilon_{xx}$, в то время как $\epsilon_{zz} = \epsilon_{yy} = 0$. Таким образом, сдвиговое напряжение $\tau = \mu\epsilon_{xx}$ по определению величины τ . Здесь используется определение $\epsilon_{xx} = \delta\rho/\rho_0$, где ρ_0 - начальная плотность однородной алюминиевой пленки при комнатной температуре. Сравнение расчетных напряжений с напряжениями, полученными по закону Гука показано на Рис. 1.10 - 1.11.

Результаты расчетов как 2Т-НД-Elast, так и МД показывают интересное явление. Вблизи фронта плавления постепенно образуется заметное отрицательное сдвиговое напряжение τ , см. Рис. 1.10 - 1.11. Пространственное распределение τ меняет знак вблизи фронта плавления, таким образом имеет место инверсия сдвигового напряжения. Причины

приводящие к данному поведению достаточно просты и связаны с нагревом и растяжением. Для материала при сжатии $p_{xx} > p_{\perp}$ и $\tau > 0$, так как $\rho > \rho_0$. В то время как в растянутом состоянии $\rho < \rho_0$ и $p_{xx} < p_{\perp}$, что приводит к $\tau < 0$. В хвосте волны разрежения (слева от максимума давления на Рис. 1.9 - 1.11) напряжение p_{xx} положительное. В дальнейшем нагрев кристалла сдвигает равновесную плотность для которой $p_{ij} \equiv 0$ (плотность ρ_0 является равновесной только для комнатной температуры). Нагрев кристалла с плотностью $\rho = \rho_0$ равномерно увеличивает оба напряжения $p_{xx} = p_{\perp}$. Следовательно, $p_{xx} < p_{\perp}$ и $\tau < 0$ в нагретом слое алюминия вблизи фронта плавления в течение разгрузки, начинающейся после прохождения по этому слою максимума волны сжатия, хотя здесь и выполняется условие $p_{xx} > 0$.

3 Опрокидывание и последующая эволюция скачка упругого напряжения

Как было сказано выше, нелинейная волна опрокидывается (опрокидывание волны Римана). Это нелинейный эффект - в более сжатой области волны скорость характеристики $c + u$ больше, чем в менее сжатой. Значения p, c, u сохраняются вдоль характеристики, следовательно, характеристики несущие большие значения этих величин обгоняют характеристики с меньшими p, c, u . Пусть в момент времени t_1 профиль скорости имеет наклон u_x . Временной интервал до опрокидывания определяется как $t_1 - t_{br} \sim 1/u_x$. Это означает, что более крутой участок опрокидывается раньше. Наклон кривой в интервале между отображениями точек солидуса и ликвидуса на Рис. 1.9 вдвое больше, чем в любых

соседних точках. УВ образуется во временном промежутке 20-50 пс для рассматриваемой поглощенной энергии 130 мДж/см². Из распределения сдвигового напряжения τ можно видеть, что твердая фаза правее расплавленного слоя остается в упруго сжатом состоянии (без пластических превращений), несмотря на большие значения $\tau \approx G/6.5$.

Сверхзвуковая упругая УВ обгоняет акустический сигнал, испущенный от начала нагретого слоя, см. Рис. 1.10-1.11. Несмотря на испускание дозвукового потока фронтом УВ назад, это не может предотвратить прибытия характеристик с тыльной стороны относительно УВ на ее фронт. Следовательно, амплитуда УВ сначала начинает возрастать с момента прихода максимума профиля давления на фронт УВ. После этого начинается затухание упругой УВ. Оно получается немного больше в 2Т-НD-Elast расчетах, чем в MD. Это затухание определяется в основном разрежением и расхождением характеристик в хвостовой части волны. Диссипативные процессы не столь значительны в упруго сжатом веществе.

4 Сравнение результатов 2Т-НD-Elast, 2Т-НD, MD и результатов экспериментов (верификация и валидация модели)

Для оценки эффективности улучшения модели распространения упругих волн большой амплитуды были промоделированы два эксперимента. Первый по воздействию УКЛИ на алюминиевую пленку был подробно описан в предыдущих разделах. Результаты сравнения результатов расчетов по трем кодам (двухтемпературная гидродинамика, двух-

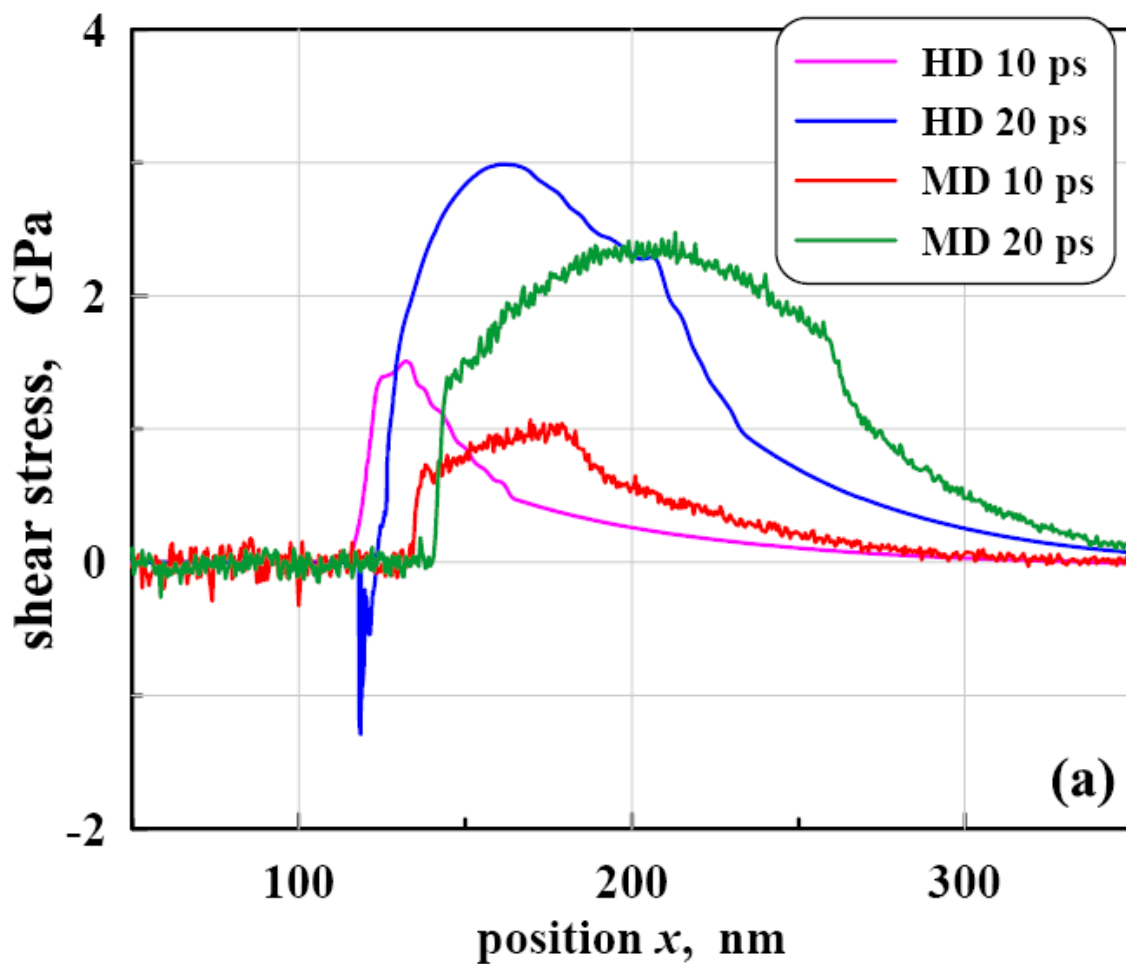


Рис. 1.9. Сравнение результатов расчетов 2Т-НД-Elast с результатами МД. В расчетах методом молекулярной динамики рассматривалось расширение монокристалла fcc алюминия вдоль направления 111. Оба метода показывают существования крутого участка ($x \approx 250$ нм, $t = 20$ пс - след быстрого плавления) на профиле напряжения. В дальнейшем этот участок вызывает раннее опрокидывание упругой волны сжатия и формирование упругой УВ.

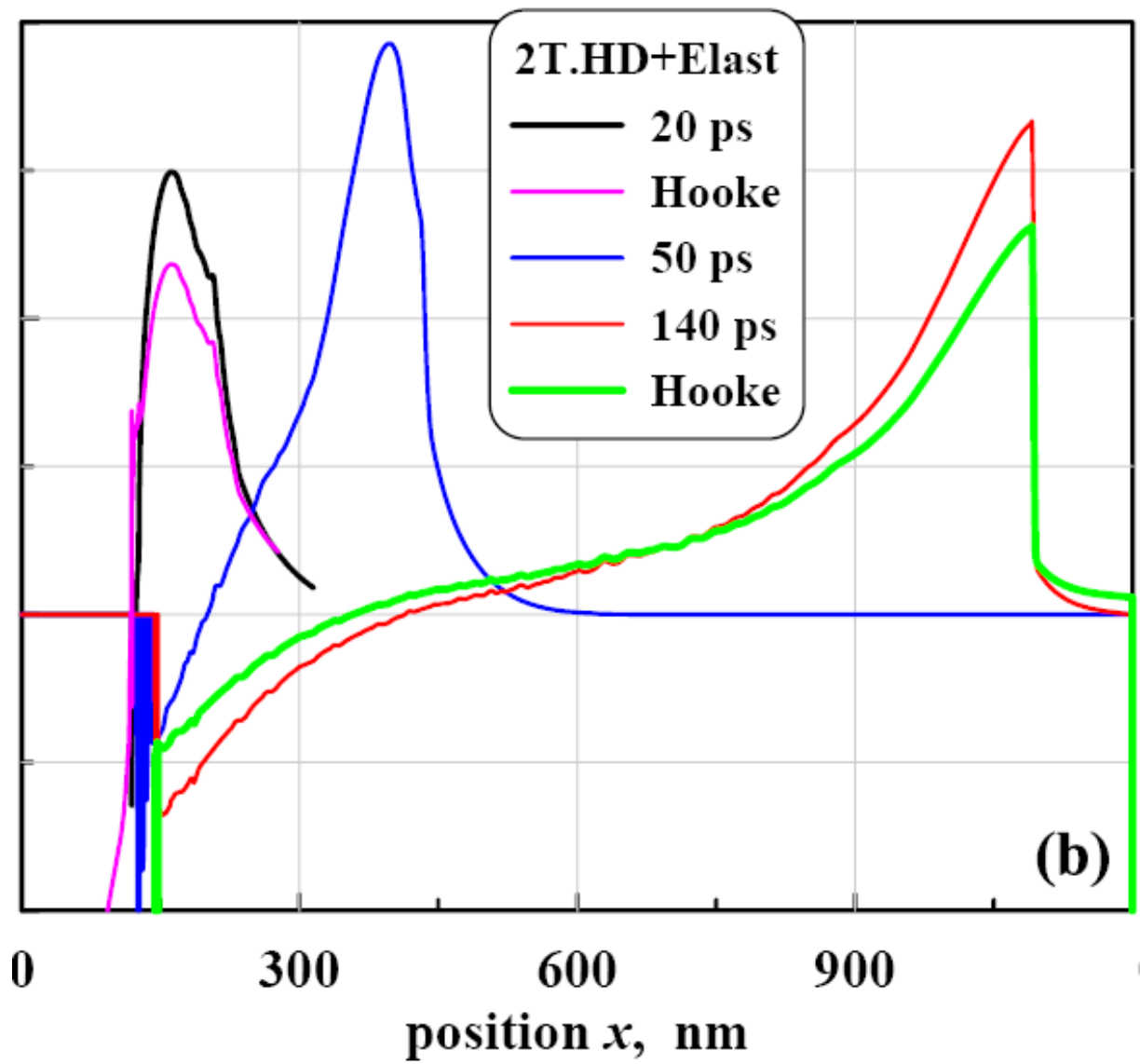


Рис. 1.10. Развитие упругих напряжений в 2Т-НD-Elast: распространение через фронт плавления, опрокидывание, увеличение амплитуды и затухание.

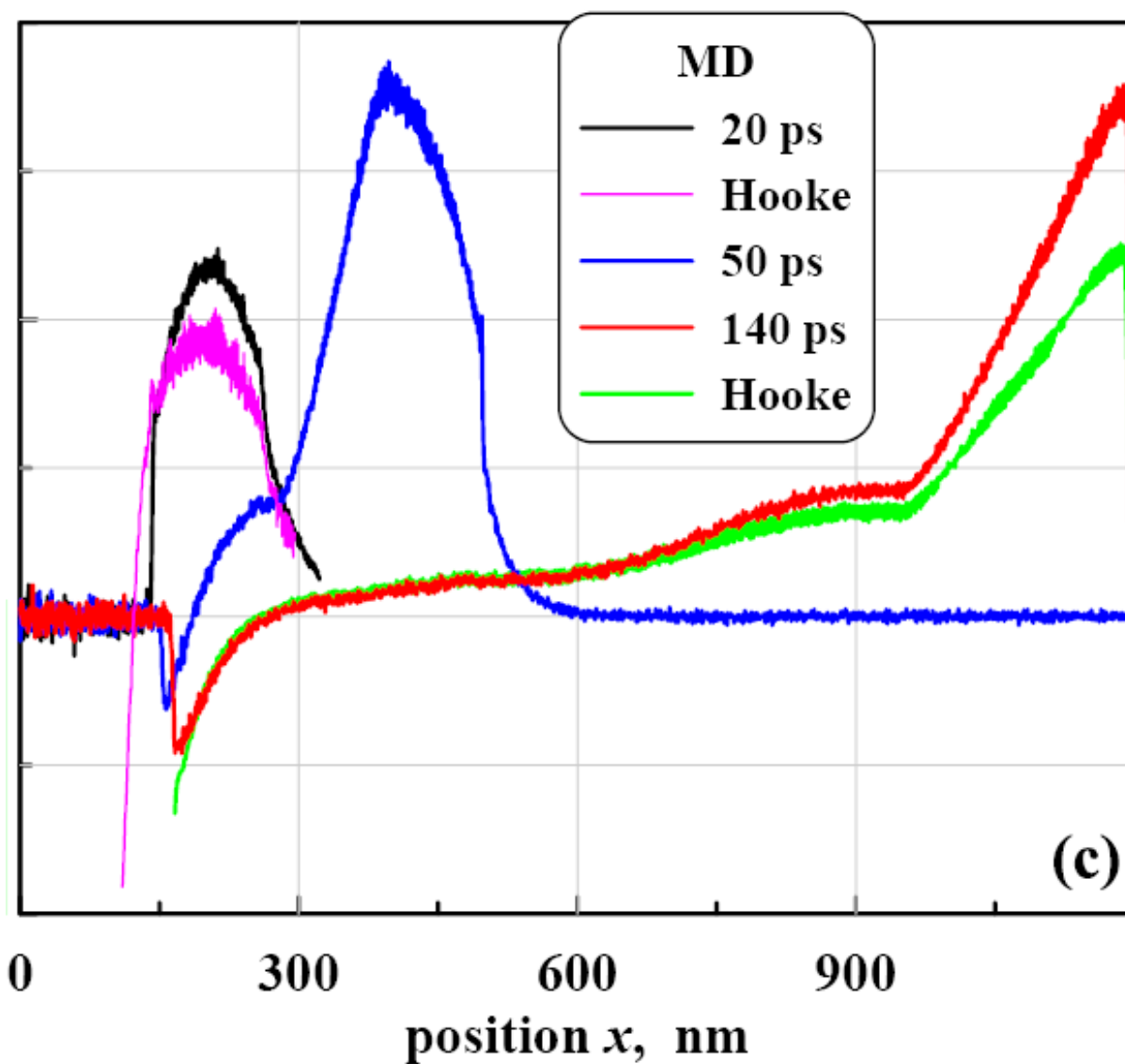


Рис. 1.11. Те же процессы, что и на Рис. 1.10 при описании методом MD. УВ приходит на тыльную сторону алюминиевой пленки толщиной 1.2 мкм в момент времени $t = 120$ пс.

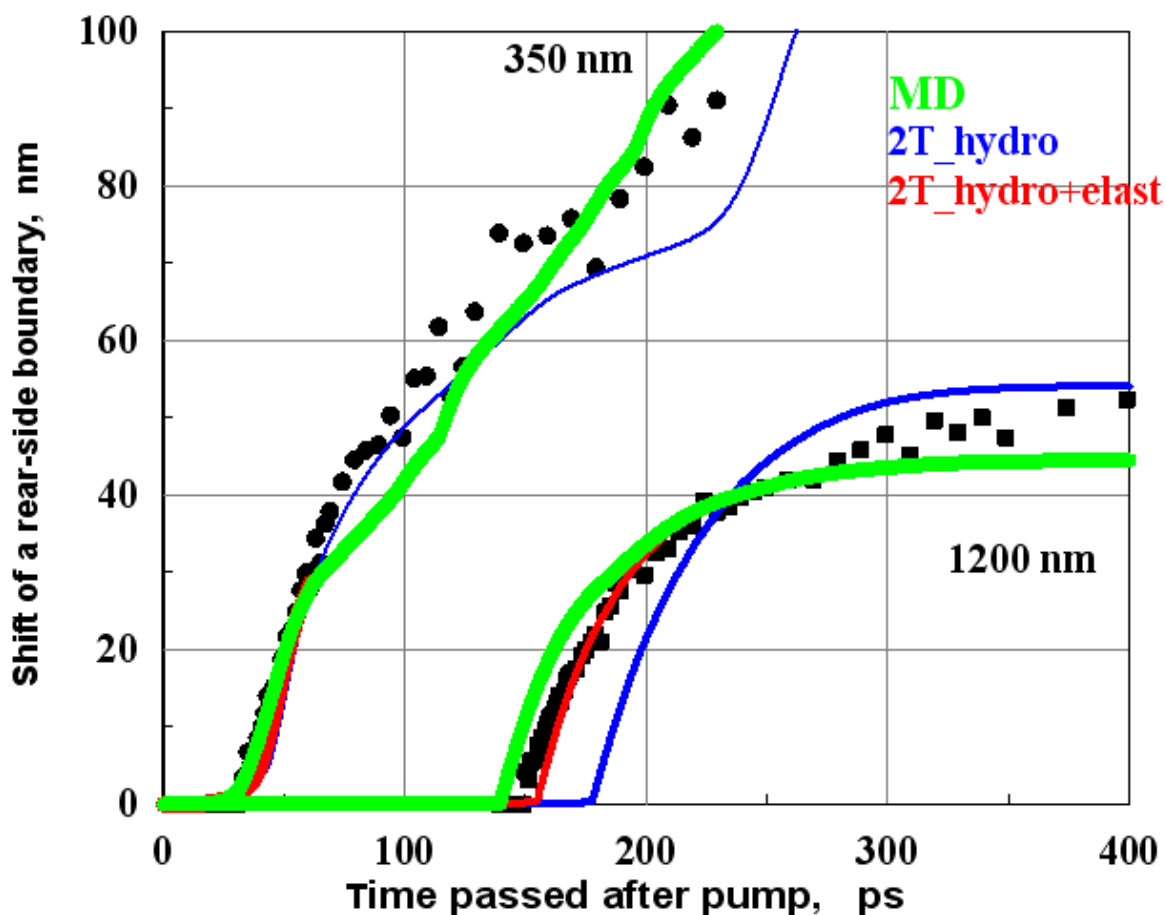


Рис. 1.12. Сравнение экспериментальных данных с результатами моделирования. Показана временная зависимость смещения тыльной поверхности алюминиевой пленки. Экспериментальные данные - черные точки, результаты МД - зеленые кривые, результаты 2Т-НД - синие кривые, результаты 2Т-НД-Elast - красные кривые.

температурная механика упругой среды и молекулярная динамика) и экспериментальных данных показано на Рис. 1.12.

Также моделировался эксперимент по никелю, в котором были обнаружены упругие волны большой амплитуды [8]. В нем тонкие пленки из никеля толщиной 467 и 839 нм, напыленные на стеклянную подложку толщиной 150 мкм подвергались облучению лазером. Длительность лазерного импульса $\tau = 130$ фс, энергия - $F = 0.7$ мДж. Расчеты методом

молекулярной динамики и двухтемпературной гидродинамики без учета упругих свойств ионной подсистемы проводились в [30]. Сравнение экспериментальных данных и результатов моделирования различными методами показаны на Рис.1.13. Как видно из сравнения данных, представленная модель с учетом упругих свойств существенно улучшает описание экспериментов, исключая сильное запаздывание присущее 2Т-НД подходу.

5 Учет динамики дислокаций и гомогенной нуклеации в ионной подсистеме

Упругое поведение монокристалла металла продолжается около $\tau_r \approx 100$ пс [15]. Далее начинаются процессы перехода металла в пластическое состояние. Эти процессы хорошо описывают расчеты методом молекулярной динамики [25, 26, 31]. Попытаемся описать данное явление в рамках подхода механики сплошной среды. Как известно, основными механизмами пластической деформации являются зарождение, размножение и движение дислокаций - элементарных носителей сдвиговой деформации [35].

Для упруго-пластического поведения ионной подсистемы будем использовать уравнение для эволюции плотности дислокаций [32], с помощью которого удалось описывать результаты экспериментов по соударению металлических пластин [33, 34]. Система уравнений для описания поведения тензора напряжений ионной части с учетом динамики дисло-

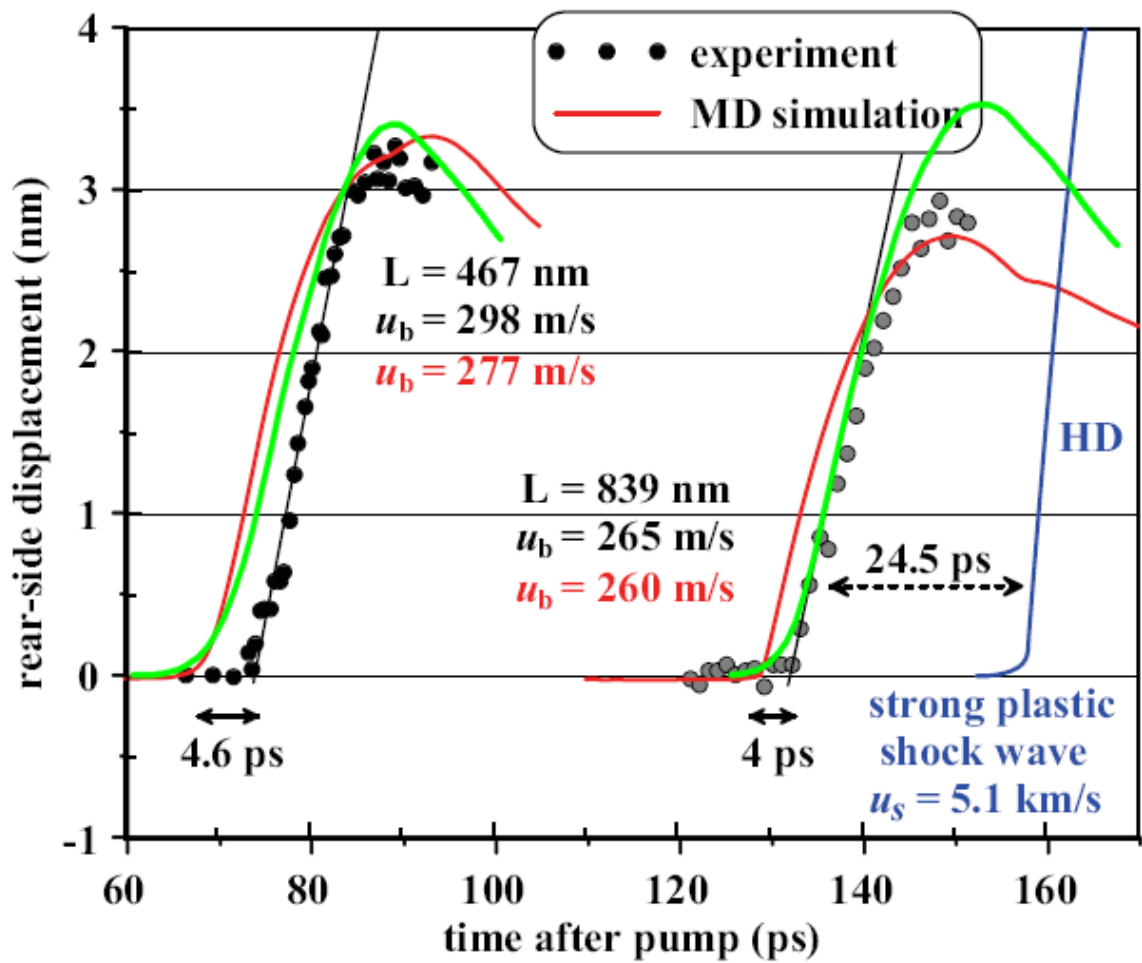


Рис. 1.13. Сравнение экспериментальных данных[8] с результатами моделирования. Экспериментальные данные - черные точки, результаты МД - красные кривые, результаты 2Т-НД - синие кривые, результаты 2Т-НД-Elast - зеленые кривые.

каций в лагранжевых координатах записывается в виде [33, 34]:

$$\sigma_{xx} = -P(\rho, E) + S_{xx}, \quad (1.23)$$

$$\frac{dS_{xx}}{dt} = \frac{4}{3}G \frac{\partial u}{\partial x} - 2G \frac{dw_{xx}^{pl}}{dt}, \quad (1.24)$$

$$\frac{dw_{xx}^{pl}}{dt} = -\frac{1}{\sqrt{6}}Vb\rho_D, \quad (1.25)$$

$$\frac{m_0}{(1 - V^2/c_t^2)^{3/2}} \frac{dV}{dt} = -\frac{3}{4}b \left(\sqrt{\frac{2}{3}}S_{xx} \pm \frac{2}{3}Y \right) - B(V, T)V, \quad (1.26)$$

здесь используются стандартные обозначения механики сплошных сред: ρ - плотность, u - массовая скорость, σ_{xx} - тензор напряжений, S_{xx} - дивiator тензора напряжений, P - давление, V - скорость движения дислокаций, ρ_D - дислокационная плотность, Y - предел текучести, G - модуль сдвига, b - вектор Бюргерса. Для изменения плотности дислокаций используется уравнение [32]:

$$\frac{d\rho_D}{dt} = \left(\delta_0 \frac{Y_0}{Gb} + \delta_f \sqrt{\rho_D} - k_a b \rho_D \right) |V| \rho_D \quad (1.27)$$

Предел текучести определяется из соотношения Тейлора [35]:

$$Y = Y_0 + \alpha Gb \sqrt{\rho_D} \quad (1.28)$$

Параметры дислокационной модели брались из [33], где коэффициент фононного трения был получен из молекулярно-динамических расчетов.

Следует отметить, что кинетическое уравнение для плотности дислокаций (1.27), учитывает процессы размножения дислокаций на препятствиях недеформационного характера (первое слагаемое), размножение на дислокациях леса (второе слагаемое) и их аннигиляцию (третье слагаемое) [32], то есть описывает размножение дислокаций на уже существующих препятствиях. Эти механизмы хорошо описывают размножение и

исчезновение дислокаций при микросекундном воздействии, однако при рассматриваемом здесь ультракоротком импульсе не могут обеспечить необходимый темп зарождения дислокаций. Подобные процессы изучались методом молекулярной динамики в работе [36], в которой определялась скорость гомогенного зарождения дислокаций при распаде метастабильного упругого состояния под действием сильных сдвиговых напряжений. В ней для скорости зародышеобразования (нуклеации) была получена формула:

$$J = J_0 \exp\left(-\frac{U - \sigma V}{kT}\right), \quad (1.29)$$

где J_0 - максимальная скорость нуклеации, U - энергия зарождения, σ - сдвиговые напряжения, V - активационный объем, характеризующий релаксацию упругой энергии при образовании зародыша. Применяя рассуждения, относящиеся к термофлуктуационному источнику дислокаций [33], для гомогенного зарождения получаем источниковое слагаемое в уравнении 1.27:

$$Q_{hn} = \frac{2\pi^3}{L_c^2} J_0 \exp\left(-\frac{U - \sigma V}{kT}\right), \quad (1.30)$$

где

$$L_c = \frac{\pi b c_t}{2V}, \quad (1.31)$$

минимально допустимая (критическая) длина дислокаций.

Все приведенные выше уравнения добавлялись к системе уравнений двухтемпературной механики сплошной среды, описанной в разделе 1 Главы 1, и численно решались методом конечных разностей с расщеплением по физическим процессам.

Проводилось моделирование удара поршня со скоростью 8490 м/с по алюминиевому образцу толщиной 3 мкм. Данная задача рассчиты-

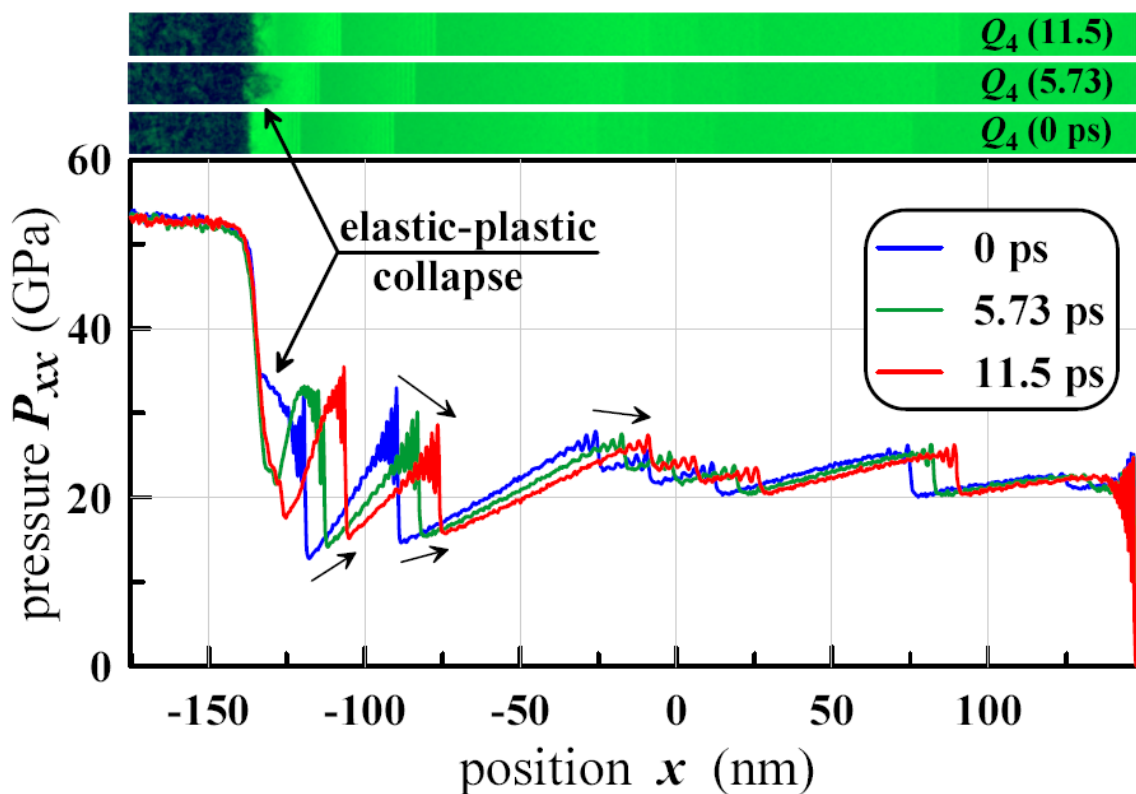


Рис. 1.14. Коллапс метастабильного упругого состояния[31]. Моделировался удар поршнем со скоростью 8.59 км/с по алюминиевой мишени вдоль направления [110]. Переход упругого состояния(отрезок синей линии в координатах от -135 нм до -120 нм) в пластическое гонит треугольные упругие импульсы вправо. Потом данная картина повторяется.

валась в [31] методом молекулярной динамики. Там наблюдалось интересное явление: коллапс метастабильного состояния материала генерировал упругие волны, поддерживающие распространяющийся упругий предвестник (Рис.1.14 из [31]). Данная задача так же моделировалась в рамках механики сплошной среды. Результаты расчетов по дислокационной модели с источником гомогенной нуклеации показаны на Рис. 1.15. Там же для сравнения показан расчет по упруго-пластической модели с постоянным пределом текучести (модель Прандтля-Рейсса). Как видно, данная модель описывает распад метастабильного упругого со-

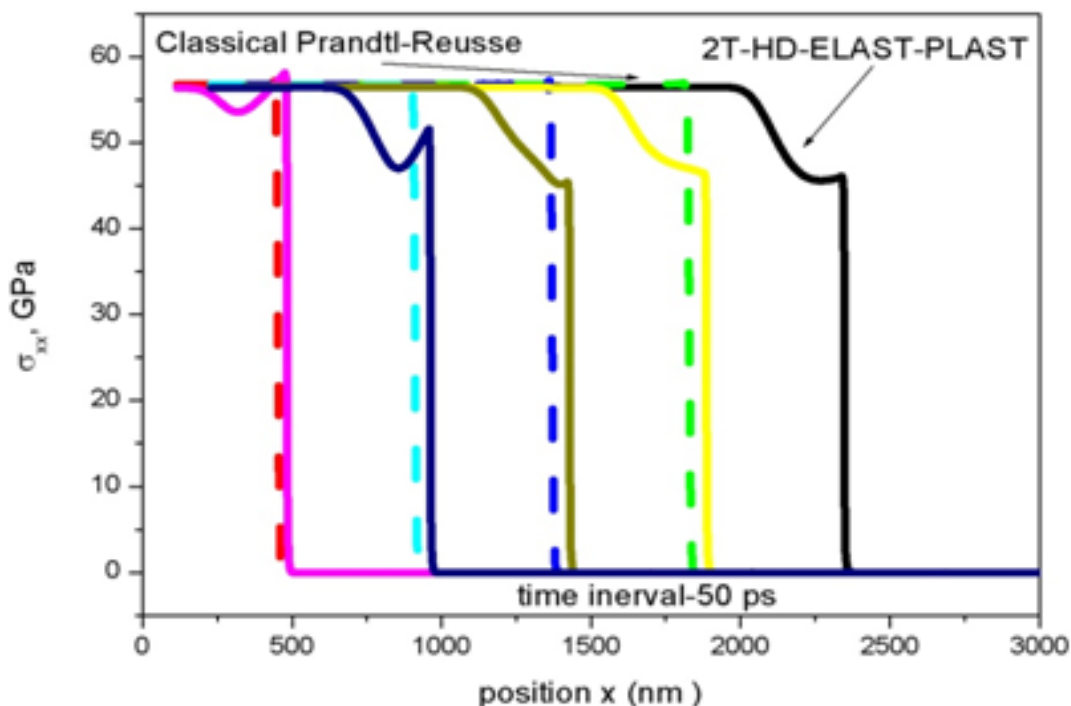


Рис. 1.15. Результаты моделирования удара поршня со скоростью 8.59 км/с по алюминиевому образцу толщиной 3 мкм. Использовалась дислокационная модель упруго-пластического поведения вещества с гомогенным зарождением дислокаций. Для сравнения показаны результаты моделирования по модели с постоянным пределом текучести (Прандтль-Рейсс).

стояния за счет гомогенного зарождения дислокаций, однако поскольку является детерминистской в ней не удастся получить таких же результатов, как в [31], для этого, по-видимому, необходимо ввести в нее какие-то элементы случайности.

6 Выводы по Главе 1

Разработан код 2T-HD-Elast, который позволяет рассматривать двухтемпературные процессы с учетом упругого отклика материала при воздействии ультракоротких лазерных импульсов на металлы. Сравне-

ние результатов расчетов по этому коду с результатами расчетов методом молекулярной динамики и экспериментальными данными показывают, что он правильно воспроизводит генерацию и распространение нелинейных упругих волн в металлах. Изучено двухтемпературное упругое поведение металлов до их плавления. Детально исследовано распространение волны сжатия из жидкого в твердый слой материала через границу расплава. Обнаружено интересное явление инверсии сдвигового напряжения вблизи границы твердая фаза-жидкость. Изучено нелинейное превращение волны сжатия в упругую УВ. Рассмотрен распад метастабильного упругого состояния. Основные результаты этой главы опубликованы в статьях [3], [5], [8], [9], [11], [14], [16], [17] из списка публикаций, приведенного во Введении.

Глава 2

Динамика тонкой пленки (10-100 нм), напыленной на подложку, при фемтосекундном лазерном воздействии¹

Ультракороткие лазерные импульсы широко используются для модификации поверхностей и формирования различных поверхностных наноструктур. К наиболее известным процессам относятся: формирование решеток из полых бугорков на поверхности пленки; структурирование пленок для биоприложений и микроэлектроники; получение миниатюрных струй из расплава для разнообразных приложений нелинейной оптики и т.д. [40]-[44]. Для теоретического описания этих процессов необходимо учитывать тепловые и механические явления, которые могут приводить к вскипанию и рекристаллизации расплавленных металлов и полупроводников, появлению упругих волн большой амплитуды и т.д. Об-

¹Основные результаты этой главы опубликованы в статьях [6], [7], [10], [15], [17], [4] из списка публикаций, приведенного во Введении.

разование растягивающих напряжений внутри фронтального слоя, нагретого лазером, имеет важнейшее значение для понимания нуклеации, кавитации и откола, которые часто называются абляцией (удаление массы) в лазерной физике. Откол и движение оторванных слоев позволяет объяснить появление колец Ньютона [45, 46]. Разрыв свободной плоской пленки, быстро нагретой лазером, является наиболее простым примером лазерного откола [47]-[53], в котором порог абляции F_a определяет динамику этой пленки. Но возникает другая физически важная проблема, часто возникающая в приложениях: как эта картина меняется в случае пленок, нанесенных на подложку? В [62] было представлено только упрощенное аналитическое решение в акустическом приближении и при условии, что поглощенная энергия излучения была больше порога отрыва пленки от подложки, но меньше порога разрушения пленки. Эта проблема разрешена в данной главе. Найдено два пороговых значения флюенса $F_s < F_a$ и три режима движения по сравнению со случаем свободно стоящей пленки. Для случая $0 < F < F_s$ пленка колеблется, находясь на подложке. Когда $F_s < F < F_a$ пленка отрывается от подложки, из-за растягивающего напряжения, приходящего с акустическими волнами на контакт стекло-пленка и превышающего силу адгезии контакта. В третьем режиме $F_a < F$ разрушение самой пленки происходит быстрее, чем ее отрыв от стекла.

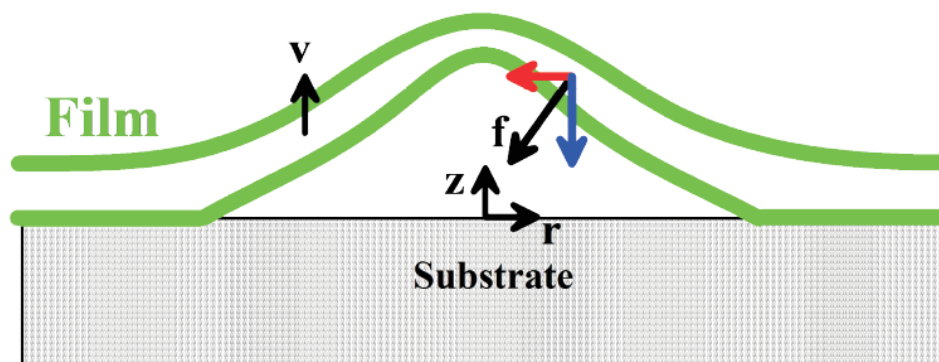


Рис. 2.1. Схема отслаивания пленки от подложки (блистеринг).

1 Отслаивание пленки от субстрата и формирование купола

Рассмотрим воздействие фемтосекундного лазерного импульса на тонкую золотую пленку, расположенную на толстой стеклянной подложке толщиной несколько микрометров. Пятно нагрева лазером достаточно мало $R_L \sim \lambda$ (порядка микрона) и толщина пленки сопоставима с толщиной теплового прогрева $d_f < d_T$ (0.1 микрон), где R_L, λ, d_T - радиус фокального пятна лазера, длина волны лазерного излучения и толщина зоны прогрева, соответственно. Рис. 2.1 показывает общую картину отделения пленки от подложки и формирование куполообразного вздутия пленки. В экспериментах [54]-[56] использовались золотые пленки толщиной 10-100 нм. Эти пленки были нанесены путем напыления на толстые (несколько микрон) стеклянные подложки. Лазер облучал металл либо напрямую либо через стекло. На самом деле направление облучения не имеет значения, поскольку пленка равномерно прогревается за время менее одной пикосекунды из-за большой электронной теплопроводности золота в двухтемпературной стадии. Время прогрева мало по сравнению

с характеристическим акустическим временем $t_s = d_f/c_s \sim 10$ пс.

Поскольку поперечный масштаб R_L (см. Рис. 2.1) порядка длины волны лазерного излучения, т.е. около микрона, а продольный масштаб процессов вдоль z определяется толщиной пленки, т.е. в 10-100 раз меньше, мы можем рассмотреть процесс отделения пленки от подложки в одномерном приближении, при котором все переменные зависят только от координаты z и времени t . В процессе отслаивания пленки формируется поле скоростей $v(r)$, при котором она теряет контакт с подложкой. Скорость v имеет порядок 10-100 м/с. Следовательно, формирование купола высоты порядка радиуса R_L происходит на больших временах (по сравнению с t_s):

$$t_{dome} \sim R_L/v = (R_L/d_f)(1/M)t_s \gg t_s, M = v/c_s. \quad (2.1)$$

Как видно, время образования купола занимает десятки наносекунд.

Охлаждение купола в основном происходит за счет электронной теплопроводности пленки. Тепловые потери в плохо проводящей диэлектрической подложке малы. Радиационным охлаждением пренебрегаем. Простая оценка охлаждения и рекристаллизации горячего пятна дает $t_{cool} \sim R_L^2/\chi \sim 10$ нс, $R_L \sim 10^{-4}$ см, $\chi = \kappa/c \sim 1 \text{ cm}^2/\text{s}$, где χ - температуропроводность, κ - теплопроводность и c - теплоемкость металла.

Как видно, времена образования купола и охлаждения сопоставимы. Это объясняет образование твердых вздутий на облучаемой поверхности.

Время отслаивания пленки от подложки на несколько порядков меньше, чем время формирования купола. Следовательно, процесс отделения пленки можно рассматривать отдельно. Такой подход сильно

облегчает расчеты. Будем моделировать отслаивание используя одномерную модель двухтемпературной сплошной среды.

2 Математическая модель

Одномерная математическая модель рассматриваемых процессов в лагранжевых массовых координатах m :

$$dm = \rho dx, m = \int_{x_0}^x \rho dx \quad (2.2)$$

представляется следующей системой уравнений:

для золотой пленки:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) = \frac{\partial v}{\partial m} \quad (2.3)$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{\partial \sigma}{\partial m} \quad (2.4)$$

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (2.5)$$

$$\frac{dE_e}{dt} + P_e \frac{\partial v}{\partial m} = \frac{\partial}{\partial m} \left(\kappa_e \rho \frac{\partial T_e}{\partial m} \right) - \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i) + J_L \quad (2.6)$$

$$\frac{dE_i}{dt} - \sigma_i \frac{\partial v}{\partial m} = \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i) \quad (2.7)$$

$$\sigma = -P_e + \sigma_i \quad (2.8)$$

$$\sigma_i = -P + s_i \quad (2.9)$$

$$\frac{ds_i}{dt} + \lambda s_i = \frac{4}{3} \mu \dot{\epsilon}, |s_i| \leq \frac{2}{3} Y \quad (2.10)$$

$$\dot{\epsilon} = \rho \frac{\partial v}{\partial m} \quad (2.11)$$

для диэлектрической подложки:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) = \frac{\partial v}{\partial m} \quad (2.12)$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{\partial \sigma}{\partial m} \quad (2.13)$$

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (2.14)$$

$$\frac{dE}{dt} - \sigma \frac{\partial v}{\partial m} = 0 \quad (2.15)$$

$$\sigma = -P + s \quad (2.16)$$

$$\frac{ds}{dt} + \lambda s = \frac{4}{3} \mu \dot{\epsilon}, |s| \leq \frac{2}{3} Y \quad (2.17)$$

$$\dot{\epsilon} = \rho \frac{\partial v}{\partial m} \quad (2.18)$$

Эти системы дополнялись граничными условиями:

$$\sigma|_L = 0 \quad (2.19)$$

$$\sigma|_R = 0 \quad (2.20)$$

$$\sigma|_{C-0} = \sigma|_{C+0} \quad (2.21)$$

$$\kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial m} |_L = 0 \quad (2.22)$$

$$\kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial m} |_C = 0, \quad (2.23)$$

$$(2.24)$$

где L - левая (облучаемая) граница металла, R - правая (свободная) граница подложки, C - контакт металл – диэлектрик.

Начальные условия - нулевые напряжения и комнатная равновесная температура. Лазерный источник нагрева брался в виде гауссова по времени и спадающему по экспоненциальному закону по толщине пленки.

Фазовые превращения в пленке учитываются широкодиапазонным полуэмпирическим уравнением состояния [57]-[60].

Для описания разрушения золота использовались результаты МД моделирования кавитационных полостей растянутого ($p < 0$) расплава [52], которые затем аппроксимировались аналитической формулой для использования в континуальных расчетах.

Упруго-пластические свойства материалов моделировались с помощью теории Прандтля-Рейсса. Для диэлектрической подложки использовалась классическая однотемпературная система уравнений механики сплошной среды без учета теплопроводности, поскольку на нее нет непосредственного воздействия лазера и коэффициент обычной теплопроводности очень мал, чтобы вызывать перераспределение тепла за пикосекундные времена, соответствующие механическому движению системы. Также учитывалась конечная сила адгезии между стеклом и металлом на контакте.

Данная система уравнений решалась численно методом конечных разностей с расщеплением по физическим процессам.

3 Режимы движения пленки на стеклянной подложке

Рассмотрим динамику пленки, расположенной на стеклянной подложке и облучаемой ультракоротким лазерным импульсом. В итоге получается, что в зависимости от поглощенной пленкой энергии F_{abs} , возможны три режима ее движения. Они разделяются между собой двумя пороговыми значениями F_s и F_a . Ниже первого порога (порог деламинации) F_s пленка остается на подложке. Амплитуда этого порога определяется силой адгезии между пленкой и стеклом. Между двумя порогами

F_s и F_a пленка отслаивается от подложки. Она отслаивается целиком. Выше порога F_a пленка разрушается. Более того, ее разрыв происходит раньше, чем волна разгрузки достигает контакта металл-стекло.

Задача облучения свободной пленки (которая с двух сторон окружена вакуумом) была рассмотрена во многих работах [47]-[52, 61], начиная с [47]. В [52] эта задача рассматривалась для пленок разных толщин. Здесь мы рассматриваем случай тонких пленок $d_f < d_T$, которые практически однородно нагреваются до начала механического движения. Акустический импеданс золота много больше акустического импеданса стекла [62]. Импеданс вакуума равен нулю. В этом смысле, золотая пленка, расположенная на стекле, подобна свободно расположенной пленке, с небольшой асимметрией, связанной с низким импедансом стекла.

Порог абляции F_a для случая свободной пленки имеет ясный физический смысл - флюенс, при котором пленка разрывается пополам [47]-[49], [51],[52],[61]. В нашем случае этот порог F_a слегка выше, чем в случае свободной пленки, поскольку волна разрежения бегущая от контакта золото-стекло слабее, чем в случае свободной границы. Это ослабление связано с малым, но не равным нулю импедансом стекла.

При вложенной энергии между двумя пороговыми энергиями F_s и F_a появляется конечная скорость движения центра масс улетающей пленки. Она тоже возникает из-за асимметрии границ, поскольку в симметричном случае свободной пленки скорость движения пленки как целого равна нулю. Из-за малости асимметрии скорость центра масс намного меньше (произведение акустических импедансов, см. [62]), чем скорость колебаний свободной пленки равной толщины и при одинаковой вложенной энергии.

В этой главе представлено подробное численное решение задачи нагрева металлической пленки на стеклянной подложке. В [62] было представлено только упрощенное аналитическое решение в акустическом приближении и при условии $F_s < F_{abs} < F_a$.

4 Колебательный режим

На Рис. 2.2-2.4 показаны затухающие колебания золотой пленки, возникающие при облучении с вложенной энергией меньше порога дельминации: $F_{abs} < F_s$. Граница с вакуумом расположена слева. Положение правой границы - контакт золота со стеклом - легко определяется по резкому излому профиля давления. Этот скачок связан с большой разницей в плотностях стекла (2.23 г/см^3) и золота (19.3 г/см^3). Давление внутри стекла намного меньше давления в золоте, так как акустический импеданс стекла $z_g = \rho_g c_g = 0.87 * 10^6 \text{ (г/с*см}^2\text{)}$ меньше чем импеданс золота $z_{Au} = \rho_{Au} c_{Au} = 5.9 * 10^6 \text{ (г/с*см}^2\text{)}$. Отношение импедансов равно $q = 8.6$.

Движение пленки, показанное на Рис. 2.2-2.4, возникает из-за быстрого нагрева пленки. Время нагрева электронной подсистемы всей пленки менее 1 пс. Это время очень мало по сравнению с характерным временным масштабом акустического движения. По сути происходит такой своеобразный "тепловой удар". На границах пленки с вакуумом и стеклом возникает ситуация быстрого роста давления за 1 пс и ее медленной релаксации за акустическое время, которое на порядок больше. Соответственно, колебания пленки, показанные на Рис. 2.3 и Рис. 2.4 далеки по форме от синусоидальных. У них образуются острые углы из-за резкого увеличения давления на границах пленки. Резкое увели-

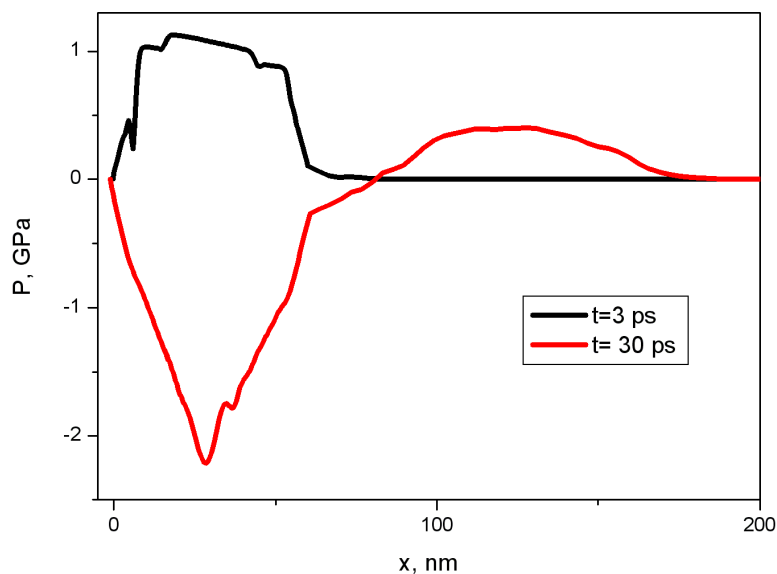


Рис. 2.2. Профили полных давлений на моменты времени 3 и 30 пс при флюенсе 2.5 мДж/см².

чение давления на Рис.2.4 на временах $t = 0, 40, 80, 120$ пс и т.д. вызвано быстрым нагревом границы пленки с вакуумом.

Кроме асимметрии, связанной с конечным импедансом подложки, есть еще асимметрия вызванная малым, но конечным временем распространения волны нагрева по пленке. По этой причине температура на границе с вакуумом немного выше, чем температура на контакте пленка-подложка даже на временах больше 1 пс, хотя со временем они сближаются, что отражается на профиле давления (см. Рис.2.2).

Резкие скачки давления в моменты времени 20, 60, 100 и 140 пс на Рис. 2.4 появляются из-за прихода головной волны разрежения с левой границы (пленка-вакуум) на правую (пленка-стекло). При первом появлении волна разгрузки приносит информацию о существовании границы с вакуумом и толщине пленки.

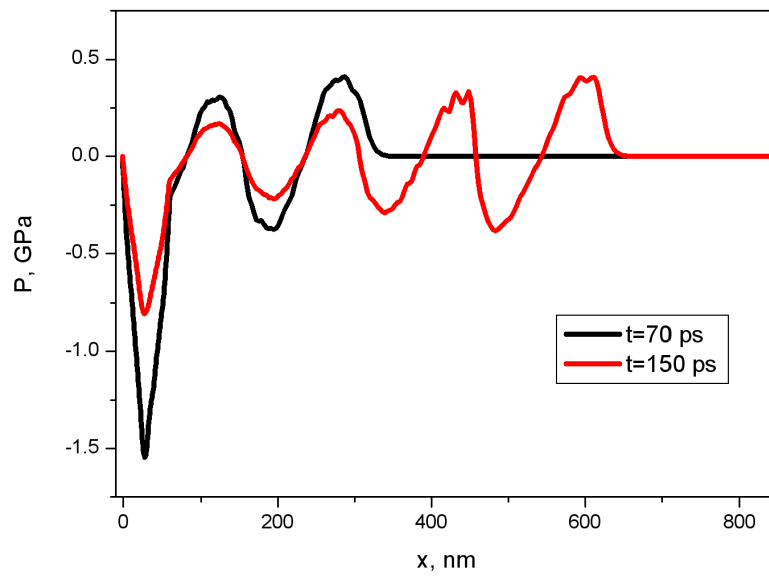


Рис. 2.3. Профили полных давлений на моменты времени 70 и 150 пс при флюенсе 2.5 мДж/см².

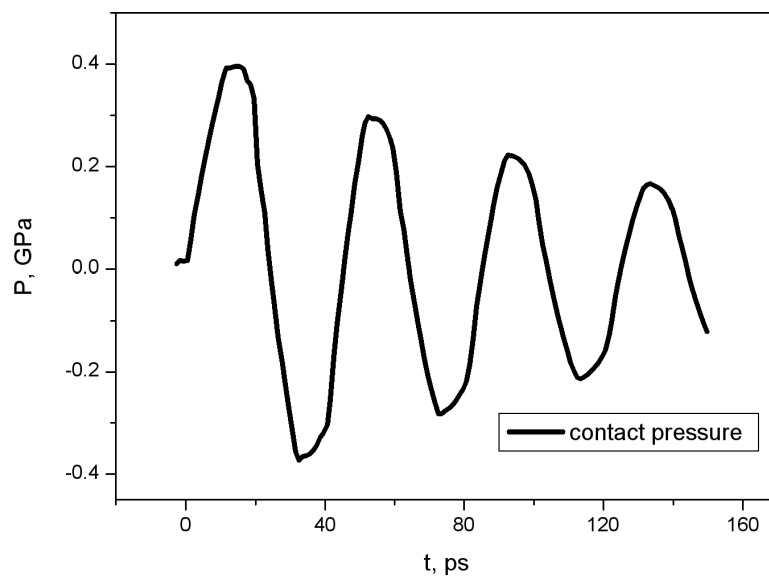


Рис. 2.4. Временная зависимость полного давления на контактной границе золото-стекло. Время отсчитывается от прибытия акустического импульса на границу.

Следует отметить, что хотя нагрев и перенос тепла электронной теплопроводностью при двухтемпературной стадии в металлах происходит быстро, двухтемпературная релаксация в золоте длится долго порядка 10-15 пс. Это происходит из-за большой массы ионов золота, которая замедляет процесс электрон-ионного обмена энергией. Таким образом, время релаксации является величиной порядка акустического времени $t_s = d_f/c_s$. Во время релаксации структура полного давления меняется преимущественно электронного (на начальном этапе) до почти полного ионного (после релаксации) давления. Этот факт объясняется разницей в коэффициентах Грюнайзена, который для ионной подсистемы почти в два раза выше, чем для электронной [63]. Поскольку внутренняя энергия, запасенная в пленке, практически не меняется за время релаксации, это увеличение коэффициента Грюнайзена приводит к повышению полного давления. Этот процесс влияет на формирование профиля волны давления.

5 Деламинация пленки

Механическое отделение пленки от подложки происходит при поглощенном флюенсе $F_s < F_{abs} < F_a$. Напряжение связи между металлом и субстратом определяется поверхностной энергией их взаимодействия. Напряжение растяжения находится в диапазоне от нуля до 1 ГПа. Точное его значение неизвестно. Вдали от порога деламинации изменение значения p_{adh} в районе 0-1 ГПа слабо влияет на величину скорости движения центра масс v отлетающей пленки. Это происходит по причине того, что во время нарастания скорости v значение напряжения на кон-

такте стекло-пленка по амплитуде намного выше напряжения адгезии. Даже более того, длительность времени, при котором напряжение положительно, больше времени, при котором формируется отрицательное напряжение на контакте и $-p_{adh}$ появляется в конце этого интервала. Этот факт более подробно будет рассмотрен ниже.

Рис. 2.5 показывает распространение волн разрежения от границ пленки к ее центру и обратно. На момент времени 3 пс волны разрежения продвигаются примерно на 10 нм (начальная толщина пленки равна 60 нм). Волна разрежения состоит из резкого скачка ("яма") и пологой части за ним. Этот разрыв волны разрежения вызван высоким темпом выноса тепла из скин-слоя толщиной порядка 15 нм в пленку толщиной 60 нм. Ширина ямы мала и составляет порядка $c_s \tau_{heat} \sim 3$ нм, где c_s - скорость звука, а τ_{heat} - время нагрева пленки, в нашем случае, порядка 1 пс. Следует отметить, что в МД расчетах этот резкий скачок не наблюдается, это связано с тем, что в них не удается полноценно воспроизвести двухтемпературную стадию нагрева пленки.

К моменту времени 10 пс, левая и правая волны разрежения проходят расстояние около 30 нм и встречаются в центре пленки, см. Рис. 2.5. Затем левая волна распространяется вправо, а правая - влево. Амплитуда давления в центре начинает быстро убывать, см. Рис. 2.6. Сравним два расчетных результата с разными величинами F_{abs} на Рис. 2.2 и Рис. 2.5 на один и тот же момент времени 3 пс. Давление растет почти пропорционально вложенной энергии F_{abs} . Также наблюдается рост давления со временем во время двухтемпературной стадии в области, не затронутой приходом волн разрежения с границ пленки. Сравним максимумы давления на Рис. 2.5 на моменты времени 3 пс и 10 пс. Этот

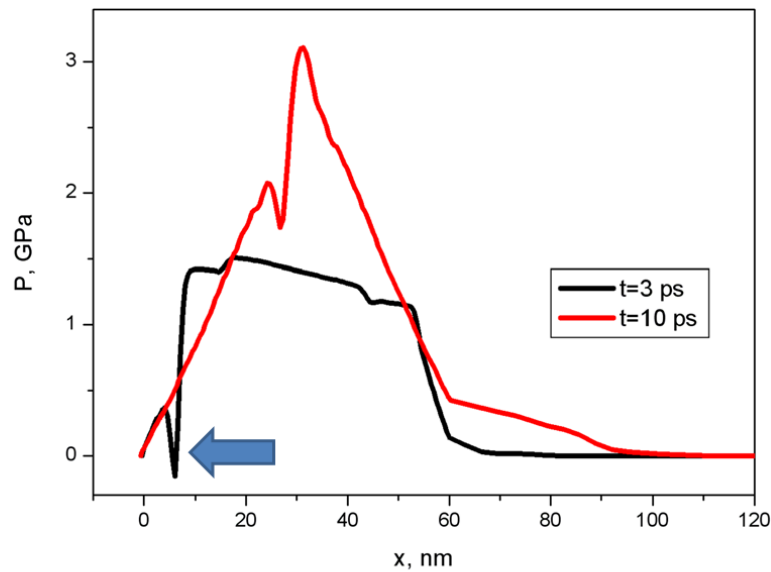


Рис. 2.5. Профили полных давлений на моменты времени 3 и 10 пс при флюенсе 7.5 мДж/см². Стрелкой обозначен резкий скачок волны разрежения ("яма").

рост давления связан с перетоком тепла от "мягкого" (с меньшим коэффициентом Грюнайзена) электронного газа к более "жесткой" ионной подсистеме. Отношение электронной и ионной внутренних энергий меняется во время двухтемпературной релаксации, а суммарная внутренняя энергия остается почти постоянной, поскольку количество энергии, переходящее в кинетическую энергию золота и внутреннюю энергию стекла, мало.

Давление в стекле значительно меньше по амплитуде, чем давление в пленке. Положение ударной волны в стекле отчетливо видно на Рис. 2.6. При выбранном значении вложенной энергии F_{abs} массовая скорость намного меньше скорости звука - можно сравнить расстояния, пройденные ударной волной и сдвиг профиля давления (вблизи начала координат)

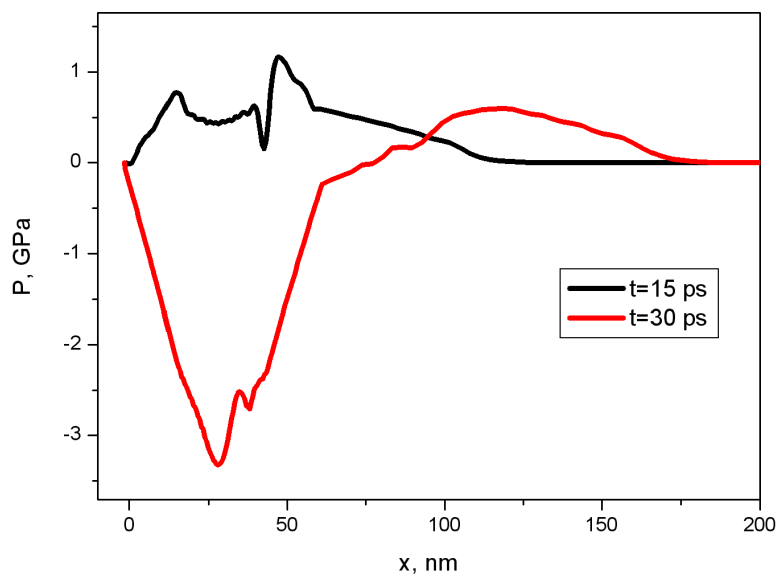


Рис. 2.6. Профили полных давлений на моменты времени 15 и 30 пс при флюенсе 7.5 мДж/см².

на Рис. 2.5.

На момент времени 30 пс давление на контакте золото-стекло уже уходит в отрицательную область, см. Рис. 2.6. Уменьшение давления на контакте на промежутке времени 15-30 пс составило около 0.8 ГПа. Давление сначала убывает на контакте, затем меняет знак и в дальнейшем достигает порога деламинации. В расчетах, показанных на Рис. 2.5, напряжение когезии, в связи с отсутствием точных данных, p_{adh} выбрано равным -0.5 ГПа. В момент достижения этого порога наступает отрыв пленки как целого от стекла.

На Рис. 2.7 показаны два момента времени перед отрывом пленки от стекла и после. В момент достижения величины p_{adh} давление на правой границе золота и левой стекла мгновенно исчезают. В этот момент, контакт золото-стекло разрывается и образуется зазор между двумя ма-

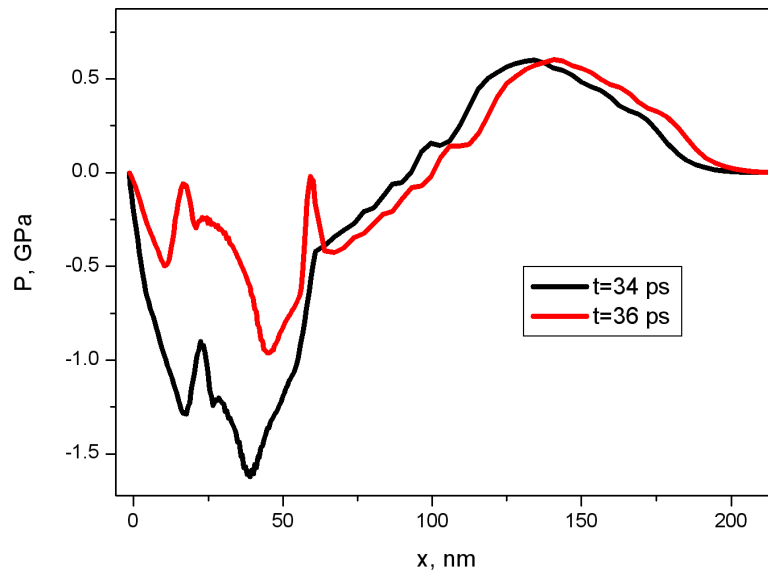


Рис. 2.7. Профили полных давлений на моменты времени 34 и 36 пс при флюенсе 7,5 мДж/см². Наблюдается отрыв золотой пленки от стекла.

териалами. Давлением пара в зазоре можно пренебречь по сравнению с фоновым давлением порядка ~ 1 ГПа = 10^4 атм в конденсированной среде. Следовательно, давление пара принимается равным нулю. Зазор медленно расширяется и по золоту и стеклу начинают распространяться откольные импульсы, см. Рис.2.8. Импульсы бегут со скоростью звука в золоте и стекле, и зазор расширяется со скоростью ~ 100 - 150 м/с, которая мала по сравнению со звуковой.

Стрелки на Рис. 2.8 в точках 53 нм и 63 нм отмечают положения фронтов откольных импульсов в золоте и стекле, соответственно. Поскольку в золоте скорость звука больше, чем в стекле, откольный импульс в золоте пробегает большее расстояние.

Напряжение адгезии равно -0.5 ГПа. Отрицательное напряжение на контакте золото-стекло достигает этой амплитуды при 35.5 пс и, сле-

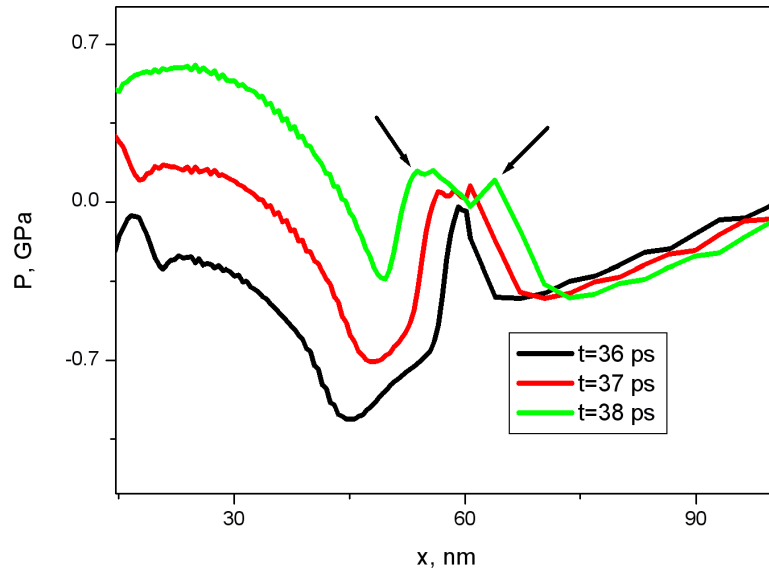


Рис. 2.8. Профили полных давлений на моменты времени 36, 37 и 38 пс при флюенсе 7.5 мДж/см². Стрелками показаны положения откольных импульсов.

довательно, в этот момент времени происходит отрыв пленки от подложки. Амплитуды обоих откольных импульсов также равняются 0.5 ГПа, см. Рис. 2.8.

5.1 Скорость центра масс пленки после отделения от подложки

Данный режим движения, когда пленка от подложки отлетает целиком, реализуется при $F_s < F_{abs} < F_a$. До и после отрыва от стекла внутри пленки имеется нетривиальное поле скоростей. Скорость распределена неоднородно и нестационарно - она является результатом взаимодействия волн, бегущих с левой и правой границы пленки. Однако, скорость v центра масс пленки перестает меняться после отрыва от под-

ложки. Изменение скорости центра масс дается выражениями:

$$v(t) = \frac{1}{\mu} \int_{-\infty}^{t_{delam}} p(\tau_1) \tau_1 \mu = \int_1^2 \rho dz \quad (2.25)$$

Здесь, под знаком первого интеграла стоит давление на контакте, или точнее давление в золоте на границе между золотом и стеклом. Границы интегрирования по времени от минус бесконечности до момента делами- нации. Этот интеграл далее делится на приведенную массу пленки на единицу площади. Пределы интегрирования 1 и 2 обозначают границы пленки.

В течении первого полупериода первого колебания на Рис. 2.4 напряжение на контакте положительно, и скорость центра масс нарастает. Во втором полупериоде напряжение становится отрицательным и скорость убывает. В колебательном режиме движения, при котором не происходит отрыва пленки, средняя скорость пленки по времени равна нулю.

Рассмотрим режим $F_s < F_{abs} < F_a$, при котором происходит отрыв пленки как целого. При энерговкладе, близком к нижнему порогу F_s , отрыв происходит в момент времени t_1 , примерно равном 40 пс, см. Рис. 2.4. Времена t_1 и t_3 примерно равны 20 и 40 пс. Они соответствуют первому максимуму положительного напряжения на контакте и первому минимуму отрицательного его значения на Рис. 2.4. В момент времени t_2 , примерно равному 25 пс, напряжение на контакте проходит через нуль. Вблизи порога F_s отрыв происходит в момент времени $t_3(t_{delam})$ и напряжение в этот момент достигает своего минимального значения и равно по амплитуде p_{adh} . Первый интеграл 2.25, взятый от нуля до t_3 , не равен нулю, поскольку площади под графиками на Рис. 2.4 за первый полупе- риод и второй не равны. При превышении порога F_s начинается отлет пленки от стекла с конечной скоростью.

Рассмотрим влияние величины p_{adh} на скорость движения центра масс. Проведем расчеты с $F_{abs} = 7.5$ мДж/см² при напряжении адгезии равной нулю и 0.5 ГПа. Временная зависимость напряжения на контакте при 7.5 мДж/см² достаточно близка к зависимости при 2.5 мДж/см², только происходит увеличение амплитуды в три раза, временной интервал $t_1 - t_3$ остается практически неизменным. Отделение пленки при $p_{adh} = 0$ происходит в момент времени t_2 . При таком напряжении адгезии отрыв происходит гладко, без формирования откольных импульсов. Скорость движения центра масс при этих условиях составляет 52 м/с. Если напряжение адгезии $t_{adh} = 0.5$ ГПа, деламинация происходит в момент времени, расположенном внутри интервала от t_2 до t_3 , и скорость движения центра масс уменьшается на 10 процентов.

6 Порог абляции и разрушение пленки

Как было сказано выше, в зависимости от вложенной энергии F_{abs} существуют три режима движения, разделяемые порогами F_s и F_a . Первые два режима движения, соответствующие $F_{abs} < F_s$ и $F_s < F_{abs} < F_a$ рассмотрены выше. Остается исследовать режим: $F_a < F_{abs}$. Выше этого порога пленка разрывается на части. Причем этот процесс происходит до того, как зона растяжения распространится на всю пленку и достигнет контакта золото-стекло. Рис. 2.9 показывает этот случай для поглощенной энергии $F_{abs} = 25$ мДж/см². Начальные моменты движения аналогичны предыдущему случаю с $F_{abs} = 7.5$ мДж/см². С границ вглубь пленки распространяются волны, давление в середине пленки медленно растет из-за передачи энергии от электронов к ионам. В момент времени

15 пс головные характеристики этих волн пересекаются вблизи центра пленки, профиль полного давления при $F_{abs} = 25$ мДж/см² в момент 15 пс аналогичен случаю вложенной энергии $F_{abs} = 7.5$ мДж/см² при 15 пс на Рис. 2.6. Максимальное полное (сумма электронного и ионного) давление в случае 25 мДж/см² равно 8 ГПа, а для 7.5 мДж/см² немного выше 2.5 ГПа.

После наложения волн разрежения в центре пленки они продолжают движение сквозь друг друга навстречу границ золота. Давление в центре пленки быстро убывает, см. Рис. 2.9. Из-за малости коэффициента теплопроводности стекла процессами теплопереноса в нем пренебрегаем. Нагрев стекла слабой ударной волной тоже пренебрежимо мал. Начальная температура системы до лазерного нагрева составляла 300 К. Распределение температуры по толщине образца показано на Рис. 2.11. В золоте обмен энергией между электронной и ионной подсистемой происходит достаточно медленно. Даже на момент времени 15 пс сохраняется большой отрыв электронной температуры от ионной, см. Рис. 2.11. Из-за большой электронной теплопроводности и маленькой толщины пленки, электронная температура T_e практически однородно распределяется по ее толщине. Небольшие отклонения в профиле ионной температуры T_i связаны с лазерным нагревом и существующим распределением давления. Например, минимальная температура вблизи точки $x = 40$ нм соответствует минимальному давлению, см. Рис.2.9 и Рис. 2.11.

Для описания нуклеации кавитационных полостей растянутого ($p < 0$) расплава золота, использовались результаты МД моделирования из [52]. Были рассчитаны растягивающие напряжения и соответствующие температуры в точках нуклеации. Напряжение нуклеации при

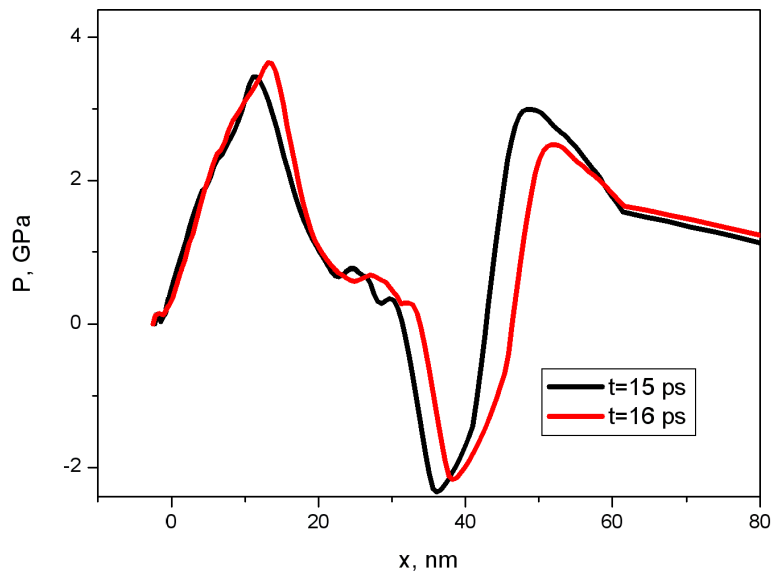


Рис. 2.9. Профили полных давлений на моменты времени 15 и 16 пс при флюенсе 25 мДж/см².

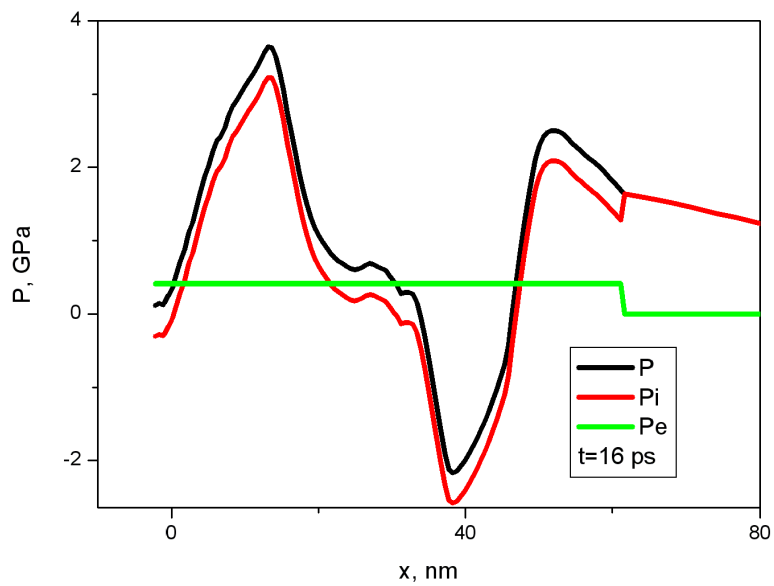


Рис. 2.10. Профили полного, ионного и электронного давлений на момент времени 16 пс при флюенсе 25 мДж/см².

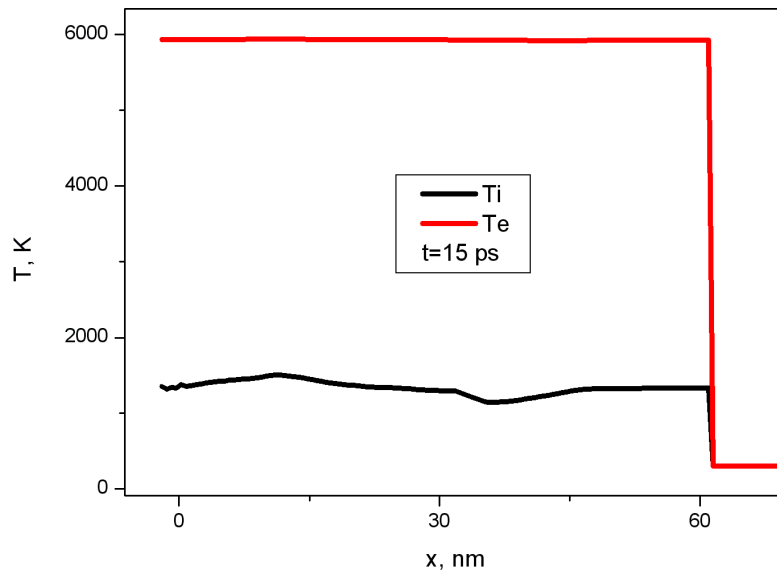


Рис. 2.11. Профили температур на момент времени 15 пс при флюенсе 25 мДж/см².

постоянной температуре зависит от времени нахождения материала по действием растягивающих напряжений, см. [64] и ссылки, приведенные в этой работе. Утверждается, что напряжение термофлуктуационной нуклеации зависит от скорости деформации \dot{V}/V : чем больше скорость, тем более высокое напряжение требуется для зарождения зародышей пара. В то время как давление и температура точки нуклеации входят в экспоненту в выражении для вероятности нуклеации, скорость деформации является предэкспоненциальным множителем. Следовательно, влияние изменения толщины пленки (чем тоньше пленка, тем выше \dot{V}/V) на вероятность зародышеобразования намного меньше, чем вариации температуры или давления. Для того, чтобы корректно рассчитать вероятности зародышеобразования для задач, изображенных на Рис. 2.12 и 2.13, в МД расчетах использовалась пленка толщиной, соответствующая типичным задачам внутреннего разрушения пленки. Температура и плот-

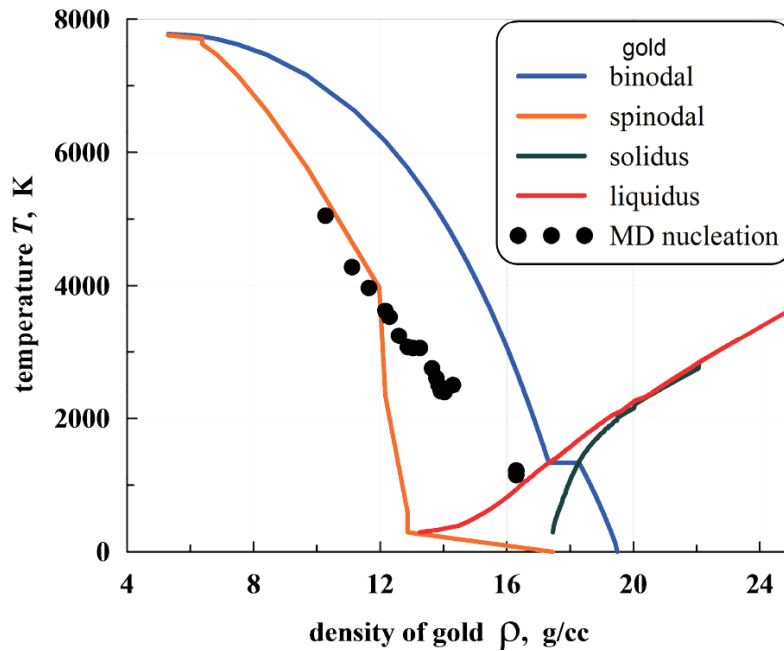


Рис. 2.12. Температура и плотность точек нуклеации (черные кружки) пленки золота толщиной 0.1 мкм [52].

ность в точке нуклеации [52] в случае растянутой пленки с толщиной 0.1 мкм показаны маркерами на Рис. 2.12, а температура и давление - на Рис. 2.13. В МД расчетах использовался потенциал ЕАМ для золота, разработанный Жаховским В.В. [61] по данным расчетов методом теории функционала плотности. Рис. 2.13 показывает аппроксимационную параболу:

$$p = -5.04 + 0.0017T - 1.49 * 10^{-7}T^2, \quad (2.26)$$

где ионная температура берется в К, а давление в ГПа. Эта кривая хорошо описывает данные МД расчетов. И это выражение используется в качестве критерия откола в двухтемпературной модели сплошной среды.

Рис.2.10 показывает профили давления на момент времени 16 пс. В отличие от Рис. 2.9, здесь кроме полного давления показаны отдельно еще электронное и ионное. К 16 пс в электронной подсистеме остает-

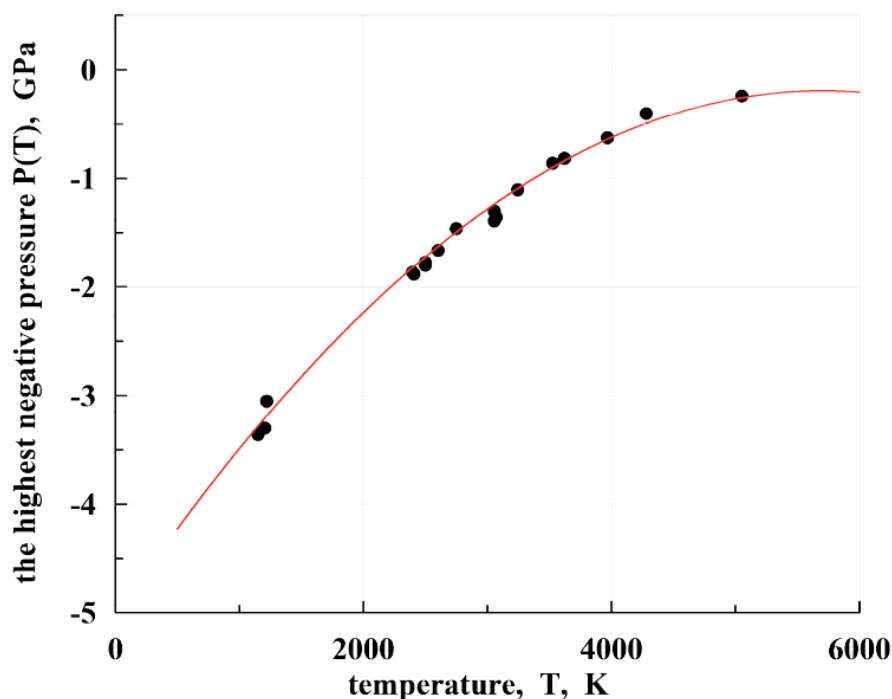


Рис. 2.13. Давление и температура точек нуклеации [52] и их аппроксимация.

ся очень мало энергии, но все равно к этому моменту двухтемпературная релаксация еще не завершена, см. Рис. 2.10. Следовательно, остается значительная часть электронного давления. Предположим, что двухтемпературные условия в процессе нуклеации определяются степенью растянутости материала по отношению к равновесной плотности, которая определяется ионной температурой. Проблема состоит в том, что ионная температура в двухтемпературном приближении оказывается меньше по сравнению с одготемпературной моделью, и, соответственно, внутренняя энергия и давление такого состояния также меньше. Электронный вклад становится значительным, когда электронная температура намного выше ионной. Следовательно, конкретное значение степени растяжения показывает ионное давление p_i . Если оно положительно, то система называется сжатой, а если отрицательно – растянутой.

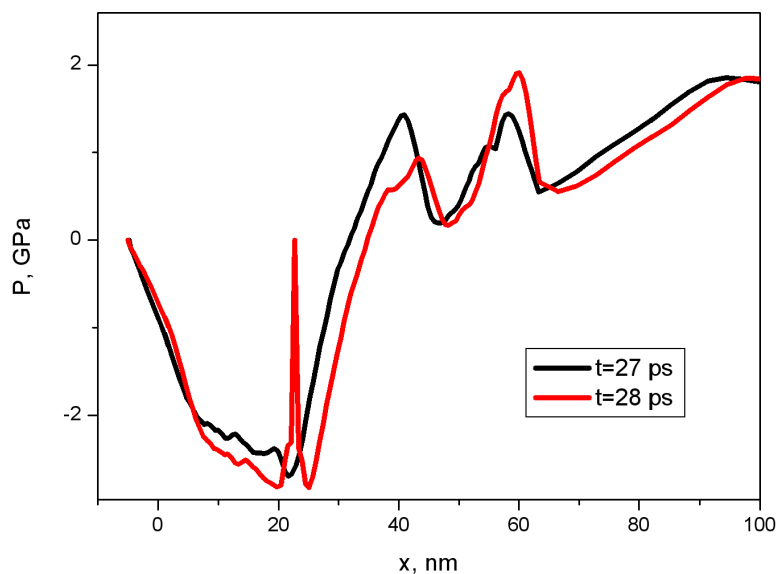


Рис. 2.14. Профили полных давлений на моменты времени 27 и 28 пс при флюенсе 25 мДж/см². Наблюдается откол в золотой пленке.

В момент времени 27 пс, максимальное растягивающее напряжение достигает значения откола, определяемого формулой (2.26). Начинается нуклеация паровых полостей и процесс разрушения пленки. Профили давления в моменты времени 27 и 28 пс показаны на Рис. 2.14. К 30 пс зазор распространяется на область от 10 до 30 нм. Причем следует отметить, что до лазерного воздействия пленка имела толщину 60 нм. Профиль полного давления $p(x, t)$ на момент 30 пс в интервале $10 \text{ нм} < x < 30 \text{ нм}$ показывает множественный откол, см. Рис. 2.15. Напряжение на контакте остается положительным в момент образования внутренних разрывов и немного позднее.

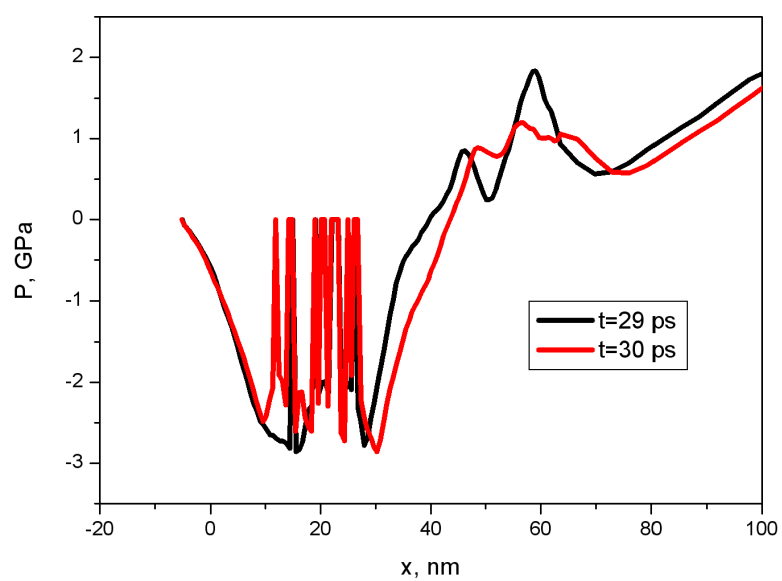


Рис. 2.15. Профили полных давлений на моменты времени 29 и 30 пс при флюенсе 25 мДж/см². Наблюдается множественный откол в золотой пленке.

7 Выводы по Главе 2

Была рассмотрена задача нагрева лазером тонкой пленки, лежащей на подложке. Было показано, что в случаях, подтвержденными экспериментами [54]-[56], пленка отслаивается от подложки и формирует купол. Расчетами были показаны процессы колебательного движения пленки и ее отслаивания. Впервые численно изучена зависимость движения пленки на подложке от поглощенной лазерной энергии. Возможны три вида движения: колебательный, отрыв пленки целиком и внутреннее ее разрушение. Также по результатам МД моделирования [52], была построена аппроксимационная зависимость откольного напряжения золота от температуры, которая использовалась для моделирования внутреннего разрушения пленки в двухтемпературной модели сплошной среды. Основные результаты этой главы опубликованы в статьях [6], [7], [10], [15], [17], [4] из списка публикаций, приведенного во Введении.

Глава 3

Моделирование инициирования анизотропного ВВ при низкоинтенсивных механических воздействиях¹

Безопасность различных изделий, содержащих в своем составе энергетические материалы: взрывчатые вещества (ВВ), а также другие составы, способные к выделению энергии, например, ракетные топлива, во многом определяются реакцией данных материалов на различные ударные нагрузки. Эти нагрузки могут быть как высокоинтенсивные (более 10 ГПа), так и слабоинтенсивные (менее 1 ГПа). В то время как для высокоинтенсивных нагрузок существуют феноменологические модели детонации ВВ (Lee-Tarver [65], Forest Fire [66], МК [68] и т. д.), широко применяемые в инженерных расчетах, для слабоинтенсивных воздействий нет общепринятой модели возбуждения и распространения

¹Основные результаты этой главы опубликованы в статьях [1], [2] из списка публикаций, приведенного во Введении.

детонации. Хотя они достаточно интенсивно изучаются экспериментально для определения безопасности их использования [67, 69](Рис. 3.1). Это связано, в основном, с многофакторностью и многомасштабностью изучаемого явления и сложностью выделения определяющего физического процесса, поскольку существует множество причин возникновения очагов детонации (гетерогенность ВВ, неустойчивость процесса его деформирования, трение зерен ВВ и т. д.). По мнению некоторых исследователей (например, [70], [71]) основной причиной сильно неоднородного нагрева ВВ является образование адиабатических полос сдвига при его сдвиговом нагружении. Существует несколько феноменологических моделей описания данного процесса, они будут рассмотрены в первых двух разделах этой главы. Основной слабостью данного подхода является использование множества плохо определяемых параметров. Для прояснения физической картины явления необходимо получить в явном виде образование неоднородных зон нагрева ВВ. Для этого рассматривалось нагружение ВВ с учетом анизотропной ориентации составляющих его кристаллов и их взаимодействия между собой.

1 Модель Зерилли

В данной модели [71] рассматривается гетерогенное ВВ состоящее из его зерен с вкраплениями связующего вещества и пор, содержащих продукты взрыва(ПВ). Модель кинетики детонации состоит из

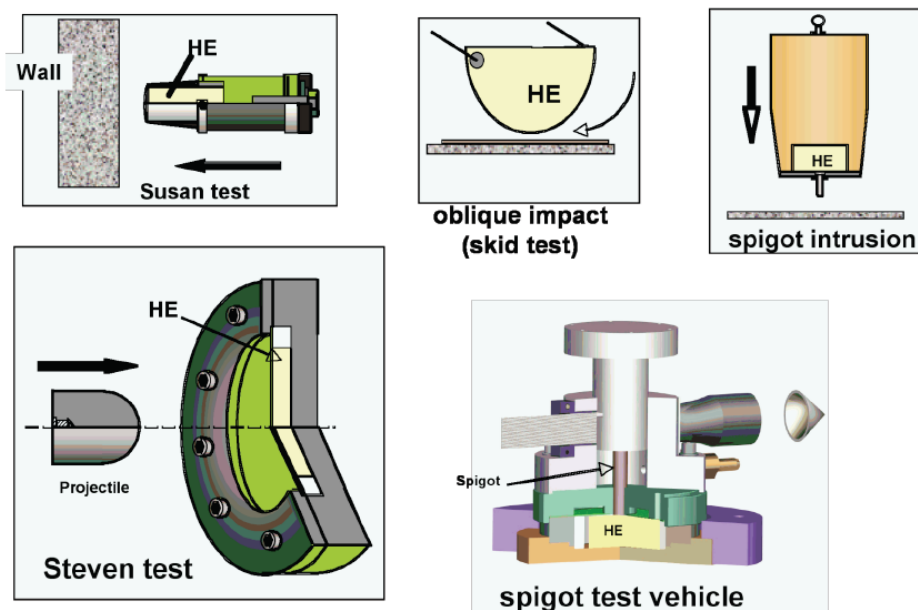


Рис. 3.1. Схема экспериментов по низкоинтенсивному воздействию на энергетические материалы [69].

трех уравнений:

$$f_h \rho C_v \frac{dT_h}{dt} = f_h \frac{dW^e}{dt} + \Phi - h(T_h - T) \quad (3.1)$$

$$(1 - f_h) \rho C_v \frac{dT}{dt} = (1 - f_h) \frac{dW^e}{dt} + h(T_h - T) \quad (3.2)$$

$$\frac{df}{dt} = A \exp(-E/kT_h) + \sum_i f^{x_i} (1 - f)^{y_i} p^{z_i}, \quad (3.3)$$

здесь p - давление, T_h - микроскопическая температура «горячей точки», T - макроскопическая средняя температура, f - массовая доля продуктов реакции, f_h - массовая доля вещества, находящегося в «горячих точках», h - коэффициент теплопроводности, W^e - удельная энергия упругой деформации на единицу объема, Φ - скорость изменения удельной энергии пластической деформации на единицу объема, A, E - константы кинетики Аррениуса.

Первое уравнение описывает диссипацию энергии пластической деформации в «горячих точках» и их охлаждение за счет теплопроводности

сти. Здесь теплопроводность рассматривается только в одной ячейке, не рассматривается теплоперенос по всему материалу. Второе уравнение описывает процесс равномерного нагрева всего материала энергией упругой деформации. Третье уравнение представляет собой модификацию уравнения Ли-Тарвера [65], где феноменологический член отвечающий за инициирование «горячих точек» заменен на кинетику горения Аррениуса, а два остальных отвечающих за их рост и слияние остаются в том же виде.

Средней температурой и упругой энергией можно пренебречь при расчетах практических задач. Массовая доля вещества, заключенная в «горячих точках», предполагается постоянной и зависящей от микроструктуры ВВ. Она обычно определяется калибровкой результатов численных расчетов на данные известных экспериментов и составляет порядка 0,01-0,03.

Для замыкания уравнений механики сплошной среды и связи с кинетикой детонации также используется какая-либо феноменологическая модель прочности вещества, позволяющая останавливать процесс разгорания «горячих точек» естественным образом, так как при потере сдвиговой прочности Φ обращается в нуль.

Эта модель использовалась для описания эксперимента по падению тяжелого плоского ударника на пластину ВВ, со скоростью удара около 10 m/s (Рис. 3.2). Было экспериментально показано, что инициирование детонации происходило вблизи края образца. Данный результат является общим для всех кристаллических взрывчатых веществ, ударяемых на практически недеформируемых наковальнях. Внешняя область образца является областью максимальных сдвиговых деформаций и ми-

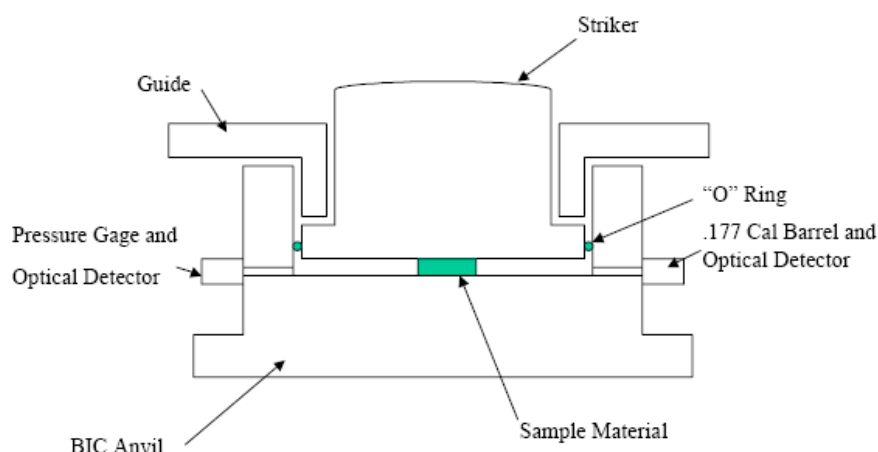


Рис. 3.2. Схема эксперимента по баллистическому удару по ВВ [71].

нимального давления. Инициирование никогда не наблюдалось в центре образца, где давление максимально. Было получено качественное согласие расчетных (см. Рис. 3.3) и экспериментальных данных. Этим авторы [71] ограничились ссылаясь на недостаток информации по параметрам кинетики разложения и механического поведения ВВ, для определения которых требуются дополнительные эксперименты.

Исходя из системы уравнений, следует обратить внимание на ее явные недостатки: введение искусственных параметров типа начальной доли вещества и температуры «горячих точек» и определение макроскопической степени выгорания по микроскопической температуре. Все эти недостатки следуют от незнания поведения ВВ на уровне зерен материала и, возможно, поведения дислокаций внутри зерен ВВ.

2 Модель Гушанова

Модель Гушанова [74, 75] представляет собой дальнейшее развитие модели Зерилли и представляется следующей системой уравнений:

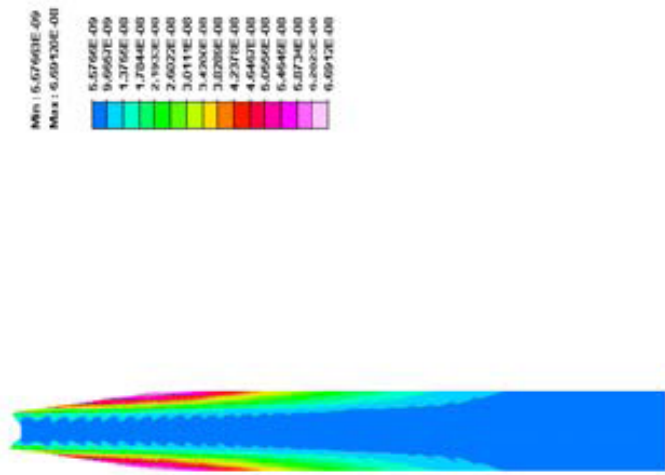


Рис. 3.3. Результаты численного моделирования эксперимента по балистическому удару по ВВ. Показаны контуры доли сгоревшего вещества на радиальном срезе образца ВВ на момент времени 100 мкс после начала воздействия. Ось диска ВВ вертикальна и находится справа [71].

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\eta}{2\rho\alpha^2}\Delta_{ik}^2 + \frac{E_- - E}{\alpha} \frac{d\alpha}{dt} - a_2 \frac{k}{\rho\alpha h^2} \frac{T_M - T_0}{1 - \alpha} + a_3 Q \frac{d\lambda}{dt} \quad (3.4)$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{k}{E_M \rho h^2} \left(a_1 \frac{T - T_M}{\alpha} - a_2 \frac{T_M - T_0}{1 - \alpha} \right) \quad (3.5)$$

$$\frac{d\lambda}{dt} = (1 - \lambda) B e^{-E_a/RT} \quad (3.6)$$

$$\frac{d\lambda_M}{dt} = \begin{cases} \frac{1}{\tau_r} \frac{(\lambda_E - \lambda_M)}{\lambda_E}, & \lambda > \lambda_0 \\ 0, & \lambda < \lambda_0, \end{cases} \quad (3.7)$$

$$\alpha = \alpha_0, t = 0, \quad (3.8)$$

где E - удельная внутренняя энергия вещества, T - температура, λ - микроскопическая массовая концентрация продуктов реакции, ρ - плотность, α - массовая доля вещества в зонах диссипации, Q - калорийность ВВ, η динамическая вязкость, Y - предел текучести, T_M - температура плавления, k - коэффициент теплопроводности, Δ_{ik} - тензор скоростей

деформации, E_a - энергия активации, B - константа скорости реакции, λ_M - макроскопическая массовая концентрация продуктов реакции, τ_r - время выгорания вещества между «горячими точками», h , λ_0 , λ_E , α_0 , a_1 , a_2 - параметры модели.

Первое уравнение системы выражает закон сохранения энергии и определяет удельную внутреннюю энергию вещества в зонах диссипации. Момент начала расчета величины E для каждой точки определяется моментом начала пластического деформирования вещества в ее окрестности. Первое слагаемое в правой части определяет нагрев вещества за счет вязкой диссипации энергии, второе - уменьшение удельной внутренней энергии при росте зон диссипации, третье - уменьшение энергии за счет потока тепла в окружающее зоны диссипации вещество. Второе уравнение определяет скорость роста зон диссипации. Третье - скорость химической реакции в виде закона Аррениуса. Четвертое уравнение отвечает за скорость роста «горячих точек» и, соответственно, энерговыделение в макроскопическом масштабе.

Алгоритм применения данной модели кинетики детонации совместно с решением уравнений механики сплошной среды следующий: при деформировании твердого ВВ в каждой расчетной ячейке вычисляется тензор скоростей деформации, далее вычисляются значения массовой концентрации продуктов реакции, массовой доли вещества, находящегося в зонах диссипации, и внутренней энергии. Влияние кинетики инициирования на движение среды отсутствует до достижения микроскопической массовой концентрации продуктов реакции λ значения 1, что является критерием начала макроскопических взрывчатых превращений. После этого начинает вычисляться макроскопическая степень выгорания ВВ

λ_M .

Данная модель была внедрена в программный комплекс ЛЭГАК-3D [74, 75] и использовалась для описания экспериментов по инициированию ВВ стальным шариком и удару тяжелого снаряда по ВВ, заключенному в стальную оболочку («Stiven Test»).

Кинетика Гушанова внедрялась в программный комплекс LS-Dyna [76] и калибровалась по результатам экспериментов [74, 75]. Основные результаты этого моделирования приведены в Табл. 1 и показаны на Рис. 3.4 - Рис. 3.6.

Были отмечены следующие недостатки данной модели: наличие множества феноменологических параметров, необходимых для подбора для описания конкретного эксперимента. Наиболее критическим параметром является α_0 - массовая доля вещества в зонах диссипации, характеризующий микроструктуру вещества. Его изменение в пределах 5 % существенно влияет на результаты расчетов. Данная модель является также сеточно зависимой и для каждого шага пространственного разбиения приходится искать свой параметр α_0 .

Как уже говорилось в предыдущем разделе, все эти недостатки следуют от незнания поведения ВВ на микро- и мезо- уровнях.

3 Применение конечно элементного метода кристаллической пластичности

В предыдущих разделах были рассмотрены две феноменологические модели низкоскоростной детонации, характеризующиеся использованием множества искусственных параметров (температура «горячей

Таблица 3.1. Основные результаты численного моделирования экспериментов по определению предельной скорости инициирования взрывчатых превращений при ударе шариком.

Скорость удара, м/с	Время разворота шарика, мкс	Максимальная температура в зонах диссипации при развороте, К	Расчетное время инициирования, мкс	Экспериментальная глубина кратера, мм	Расчетная глубина кратера, мм
37.2	68	606	-	1.5	1.6
49.2	62.5	702	-	2.2	2
52.25	62.5 взрыв	798	104	-	-
59.7	взрыв	-	20	-	-
105.37	взрыв	-	4	-	-

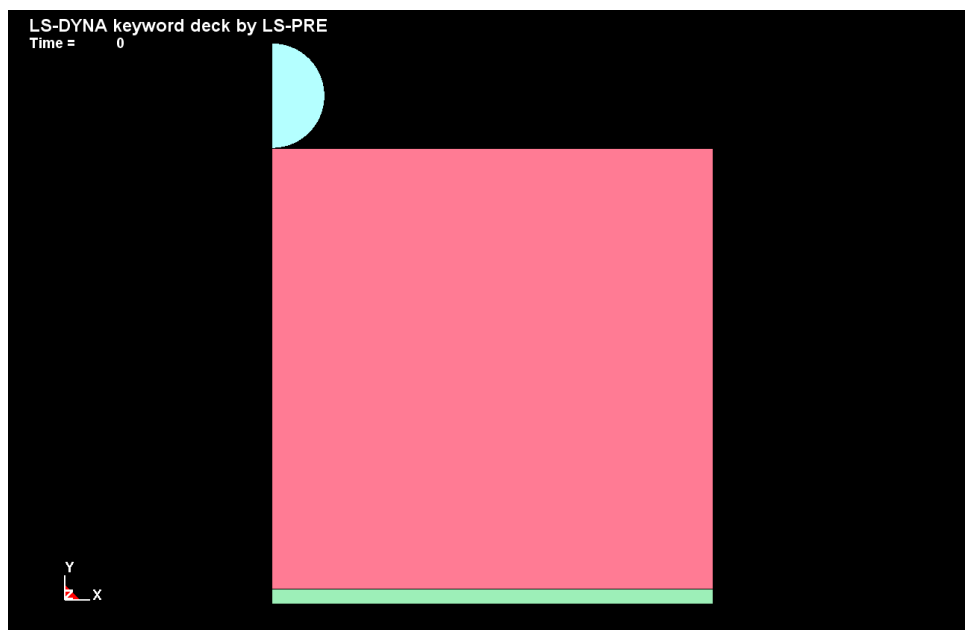


Рис. 3.4. Начальная конфигурация системы стальной шарик -ВВ - индикаторная пластина

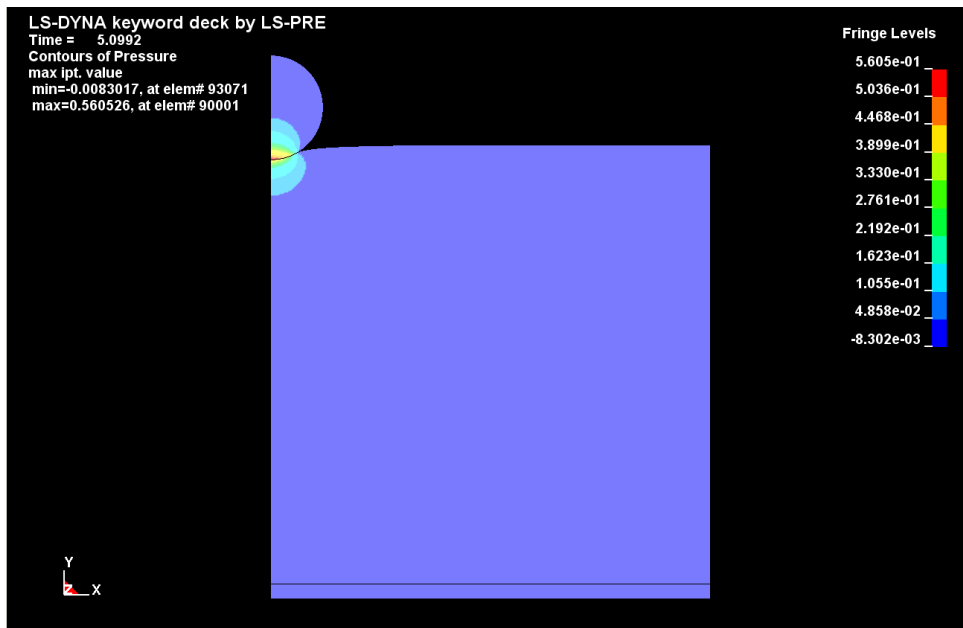


Рис. 3.5. Контуры давления системы на момент времени 50 мкс, для скорости шарика 52,25 м/с. Давление приведено в ГПа.

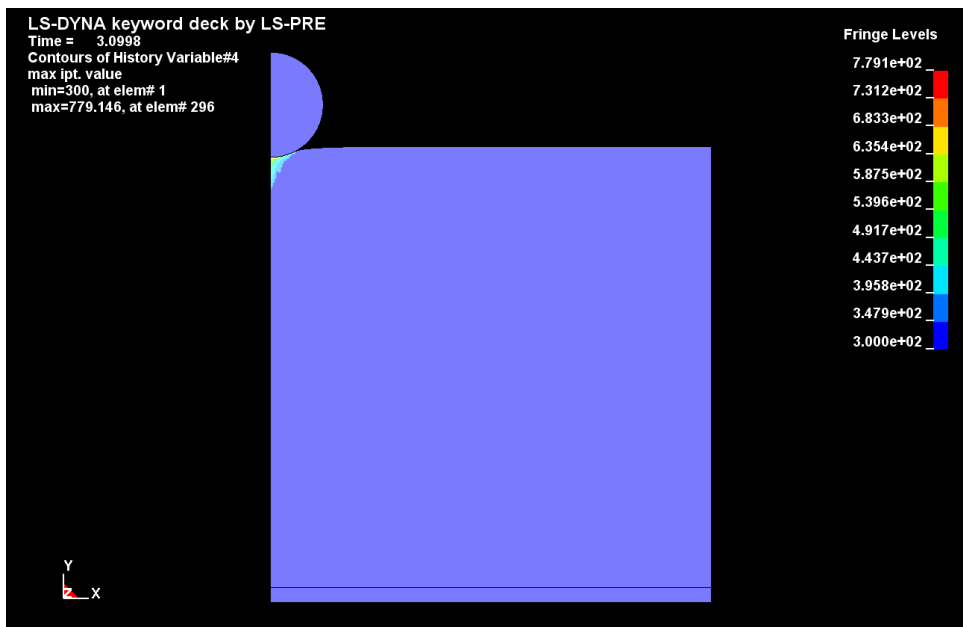


Рис. 3.6. Контуры температуры «горячих точек» на момент времени 30 мкс, для скорости шарика 52,25 м/с. Температура приведена в К.

точки», доля вещества в ней и т.д.). Данные параметры вводятся из-за невозможности описывать деформацию материалов на мезоуровне (кристаллы) при расчетах макроскопических экспериментов. В то же время не встречаются работы, в которых была бы промоделирована локализация пластической деформации, которая и вызывает неоднородный разогрев ВВ, внутри отдельного кристалла (микроуровень). По этим причинам для описания свойств вещества на мезоскопическом уровне необходимо выбрать методику, позволяющую рассматривать деформирование твердых ВВ с учетом взаимодействия отдельных зерен (кристаллов) взрывчатки между собой и пластификатором, а также возможностью расчета пластического отклика отдельных кристаллов (дислокационная динамика внутри отдельного зерна).

С подобной проблемой сталкиваются при изучении квазистатической деформации металлов и сплавов, где существенную роль играет анизотропия отдельных зерен вещества и их взаимодействие между собой, и для ее решения был предложен конечно-элементный метод кристаллической пластичности [72].

Уже говорилось о том, что в кристалле кроме пластичности, вызванной движением дислокаций, происходит много других физических процессов, которые иногда играют более важную роль при деформации материала. Эти процессы, такие как двойникование, адиабатический сдвиг, взаимодействие границ зерна с дислокациями, взаимодействие двойников с дислокациями, взаимодействие дислокаций разного знака и т. д. можно включить в конечно-элементную модель кристаллической пластичности различными кинетическими уравнениями. Рассмотрим самый простейший способ включения адиабатического сдвига

и двойникования [79].

В данном методе используется декомпозиция деформационного градиента \mathbf{F} на множители :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_p. \quad (3.9)$$

Пластическая деформация изменяется как

$$\dot{\mathbf{F}} = \mathbf{L}_p \mathbf{F}_p, \quad (3.10)$$

здесь \mathbf{F}_e - упругая часть градиента деформации, \mathbf{F}_p - пластическая часть градиента деформации, \mathbf{L}_p - градиент скорости пластической деформации.

В случае пластичности, связанной только со скольжением дислокаций

$$\mathbf{L}_p = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha, \quad (3.11)$$

где вектора \mathbf{m}^α и \mathbf{n}^α - единичные вектора, описывающие направление скольжения и нормаль к плоскости скольжения для системы скольжения α и N - число систем скольжения, $\dot{\gamma}^\alpha$ - скорость сдвига для данной системы.

Далее можно уравнение (3.11) можно дополнить слагаемыми:

$$\mathbf{L}_p = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha + \sum_{\beta=1}^M \dot{\gamma}^\beta \mathbf{m}_{twi}^\beta \otimes \mathbf{n}_{twi}^\beta + \sum_{\chi=1}^P \dot{\gamma}^\chi \mathbf{m}_{sb}^\chi \otimes \mathbf{n}_{sb}^\chi, \quad (3.12)$$

которые учитывают вклад двойникования и адиабатических полос сдвига на процесс пластической деформации. Далее необходимо определить выражения для скоростей сдвига различных механизмов пластичности, для этого могут использоваться расчеты более низкого масштаба моделирования. Например, в работе [79] для описания не кристаллографической

деформации за счет образования полос сдвига в α -меди для вышеописанных слагаемых использовались следующие кинетические соотношения.

Сначала для описания микроструктуры кристалла вводились величины: ρ_{sgl} , ρ_{dip} - плотность дислокаций и дислокационных диполей и f - объемная доля двойников. Сдвиговая скорость системы скольжения α с учетом термоактивационного движения дислокаций сквозь «лес» дислокаций записывалась в виде:

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \rho_{sgl}^{\alpha} b v_0 \exp \left[\left(-\frac{Q_0}{k_B T} \left(1 - \frac{|\tau^{\alpha}|}{\hat{\tau}^{\alpha}} \right)^p \right)^q \right] \text{sign}(\tau^{\alpha}), \quad (3.13)$$

где τ^{α} - текущее напряжение сдвига, $\hat{\tau}^{\alpha}$ - сопротивление от дислокаций «леса», b - величина вектора Бюргерса, v_0 - скорость дислокаций данной системы скольжения при напряжении равном напряжению сопротивления сдвигу $\hat{\tau}^{\alpha}$, Q_0 - энергия активации сдвига дислокаций, k_B и T - постоянная Больцмана и температура, p и q - численные параметры, описывающие профиль препятствий. Напряжение сопротивления сдвигу $\hat{\tau}^{\alpha}$ зависит от локальной плотности дислокаций:

$$\hat{\tau}^{\alpha} = \tau_{solute} + Gb \left(\sum_{\alpha'=1}^{N_{slip}} \xi_{\alpha\alpha'} \left(\rho_{sgl}^{\alpha'} + \rho_{dip}^{\alpha'} \right) \right)^{1/2}, \quad (3.14)$$

где τ_{solute} - постоянная сопротивления, G - модуль сдвига, $\xi_{\alpha\alpha'}$ - характеризует напряжения взаимодействие между различными системами скольжения α и α' как результат взаимодействия между всеми возможными типами дислокаций (подвижными, неподвижными, копланарными, коллинеарными, ортогональными и т. д.).

Изменение объемной доли системы двойникования f^{β} основывается на теории нуклеации двойников [79]. В ней предполагается, что зарождение двойника происходит при выгибе трех частичных дислокаций

между неподвижными точками, находящимися на расстоянии L_0 . Таким образом, критическое напряжение образования двойников составляет:

$$\hat{\tau}_{twin} = \frac{\gamma_{sf}}{3b_{twin}} + \frac{3Gb_{twin}}{L_0}, \quad (3.15)$$

где b_{twin} -вектор Бюргера движущихся частичных дислокаций и γ_{sf} -энергия дефекта упаковки материала. Используя это выражение скорость нуклеации двойников можно записать как:

$$\dot{N}^\beta = \dot{N}_0 \exp \left[- \left(\frac{\hat{\tau}_{twin}}{\tau^\beta} \right) \right], \quad (3.16)$$

где τ^β - приведенное напряжение сдвига в системе двойникования, N_0 и r - подгоночные параметры. Мы предполагаем, что любой двойник растет непрерывно до встречи с препятствием, таким как граница зерна либо граница другого двойника. Объем нового двойника:

$$V^\beta = \frac{\pi}{6} s \lambda^{\beta 2}. \quad (3.17)$$

Здесь s - постоянная толщина двойника, λ^β - эффективное расстояние между препятствиями роста двойника:

$$\frac{1}{\lambda^\beta} = \frac{1}{d_{grain}} + \sum_{\beta'=1}^M \xi_{\beta\beta'} \frac{1}{d_{twin}^{\beta'}}, \quad (3.18)$$

d_{grain} - постоянный размер зерна, d_{twin} - размер двойника изменяющийся с объемной долей двойников как:

$$d_{twin}^\beta = s(1 - f)/f^{\beta}, \quad (3.19)$$

где f - общая объемная доля двойников. Параметр взаимодействия двойник-двойник $\xi_{\beta\beta'}$ равен нулю для копланарных систем двойникования β и β' и единице для некопланарных. Следовательно, результирующая скорость деформации для каждой системы рассчитывается по формуле

$$\dot{\gamma}^\beta = (1 - f)\gamma_{twin}V^\beta\dot{N}^\beta, \quad (3.20)$$

где γ_{twin} - характеристическое напряжение сдвига двойникования.

Дополнительное введение модели полос сдвига в модель деформации вызвано теми фактами, что подобные не кристаллографические дефекты наблюдаются в сплавах с низкой энергией дефектов упаковки, в которых сдвиговое движение дислокаций практически полностью блокируется наличием плотных границ двойников. Для данного процесса выражение для скорости сдвига $\dot{\gamma}^\chi$ записывается аналогично дислокационному:

$$\dot{\gamma}^\chi = \dot{\gamma}_0^\chi \exp \left[\left(-\frac{Q_0}{k_B T} \left(1 - \frac{|\tau^\chi|}{\hat{\tau}_{sb}} \right)^p \right)^q \right] \text{sign}(\tau^\chi), \quad (3.21)$$

где $\dot{\gamma}_0^\chi$ - характерная сдвиговая скорость, τ^χ - приведенное напряжение в системе χ и $\hat{\tau}_{sb}$ - постоянное пороговое напряжение для образования полос сдвига.

Далее в каждой расчетной точке конечного элемента необходимо усреднить пластический отклик каждого зерна для получения макроскопической величины деформации. В нашем случае мы будем использовать метод равной деформации, при котором предполагается что каждый кристалл в расчетной точке деформируется одинаково, несмотря на разную ориентацию в пространстве [72].

Применим конечно элементный метод кристаллической пластичности к задаче деформирования ВВ. Задача усложняется тем, что даже анизотропные упругие константы для ВВ, приводящиеся в разных источниках сильно отличаются друг от друга в несколько раз (например, для октогена [77]). Параметры для описания эволюции дислокационной подсистемы ВВ вообще отсутствуют в литературе. Для корректного модели-

рования деформации взрывчатки необходимо проведение большого объема вычислений на более низком пространственно-временном масштабе моделирования, например, квантово-механических расчетов для уточнения анизотропных упругих свойств кристаллов. Молекулярно динамических - для уточнения параметров движения отдельной дислокации, расчетов дискретной дислокационной динамики - для расчетов пластического поведения ВВ внутри отдельного зерна материала. Также необходимо знать характеристики пластификатора, поскольку конечно-элементный метод кристаллической пластичности позволяет рассматривать поведение зерен различных материалов в одной расчетной точке. В настоящей работе, в связи с вышеперечисленными причинами, для описания поведения дислокаций использовались данные по алюминию [78].

Данная модель далее внедрялась в конечно-элементный код LS-DYNA, с использованием 8-ми точечных конечных элементов (Рис. 3.7). Для каждой такой расчетной точки внутри элемента вычислялись скорости деформаций по различным микроскопическим механизмам (дислокационное скольжение и двойникование) и проводилась гомогенизация (учет поворота и деформации различных зерен в каждой расчетной точке).

На Рис. 3.8-3.10 показаны результаты моделирования деформации цилиндров ВВ, у которых верхняя плоскость двигалась со скоростью 10 м/с. Данные расчеты проводились для получения качественной картины локализации сдвиговых деформаций. Каждой расчетной точке конечного элемента соответствовало 20 зерен материала, деформационный отклик которых усреднялся. Для левого цилиндра начальная ориентация всех зерен задавалась как [001], для правого - выбиралась случай-

Схема моделирования методом CPFEM

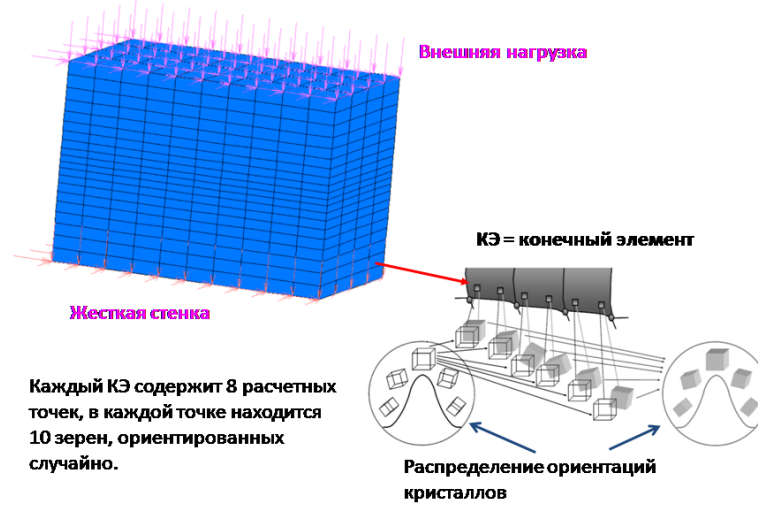


Рис. 3.7. Принципиальная схема моделирования конечно-элементным методом кристаллической пластичности (CPFEM)

ным образом. Начальная плотность дислокаций задавалась равной 10^{12} 1/m^2 . Результаты моделирования показывают существенную локализацию пластического течения, причем для разной текстуры материала она кардинально отличается.

Как уже отмечалось, данная модель содержит очень много неизвестных параметров, которые требуют уточнения, поэтому результаты численного моделирования показывают чисто качественный результат локального скопления дислокаций и, соответственно, разогрева ВВ. Для получения количественных результатов обратимся к более простой феноменологической модели движения дислокаций [72]:

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{\alpha}}{\tau_c^{\alpha}} \right|^n \text{sgn}(\tau^{\alpha}), \quad (3.22)$$

где $\dot{\gamma}^{\alpha}$ - скорость деформации в плоскости скольжения α под действием приведенного сдвигового напряжения τ^{α} при сопротивлении сдвигу τ_c^{α} ,

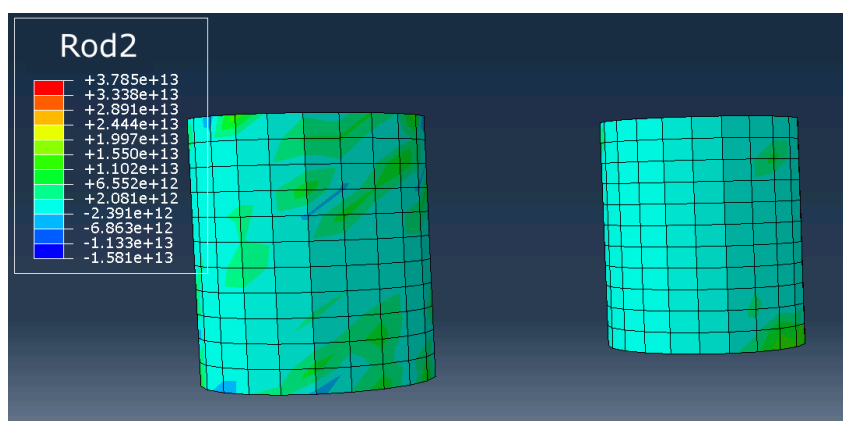


Рис. 3.8. Плотность дислокаций второй системы скольжения (время 1 мс). $(1/m^2)$

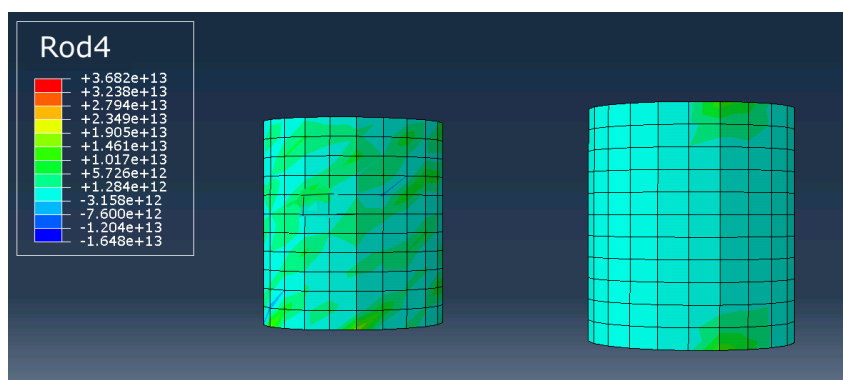


Рис. 3.9. Плотность дислокаций четвертой системы скольжения (время 1 мс). $(1/m^2)$

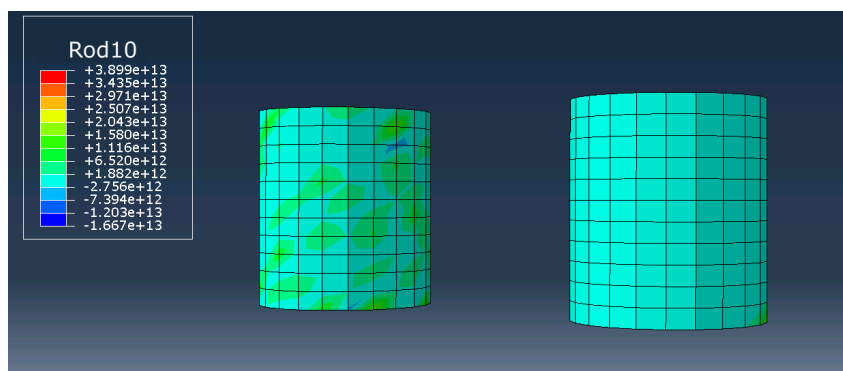


Рис. 3.10. Плотность дислокаций десятой системы скольжения (время 1 мс). $(1/m^2)$

$\dot{\gamma}_0$ и n - параметры материала, определяющие начальную скорость деформации и чувствительность сдвига к скорости деформации, соответственно. Влияние любой другой системы скольжения β на упрочнение системы α дается выражением:

$$\dot{\tau}_c^\alpha = h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^\beta|, \quad (3.23)$$

где $h_{\alpha\beta}$ - матрица упрочнения:

$$h_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} \left[h_0 \left(1 - \frac{\tau_c^\beta}{\tau_s} \right) \right]. \quad (3.24)$$

Все эти уравнения решались численно. Модуль, содержащий программную реализацию алгоритма их решения, связывался посредством пакета прикладных программ DAMASK (Dusseldorf Advanced MAterial Simulation Kit), который также был модифицирован в процессе работы, с конечно элементным решателем LS-DYNA.

Рассмотрим деформацию цилиндра ВВ высотой 1 см при движении его верхней плоскости со скоростью 100 м/с. Применим феноменологическую модель движения дислокаций. При выборе параметров $\gamma_0 = 10^8$ 1/с и $\tau_c = 6.3 * 10^7$ Ра на 4 мкс наблюдается локальное поднятие температуры выше 500 °С (Рис. 3.11) и выгорание ВВ (локально полное см. Рис. 3.12). Этот результат согласуется с данными эксперимента (Таблица 1), где при ударе шарика со скоростью 100 м/с по поверхности ВВ происходила его детонация на 4 мкс.

4 Выводы по Главе 3

Для описания инициирования ВВ низкоинтенсивным механическим воздействием впервые применен конечно-элементный метод кри-

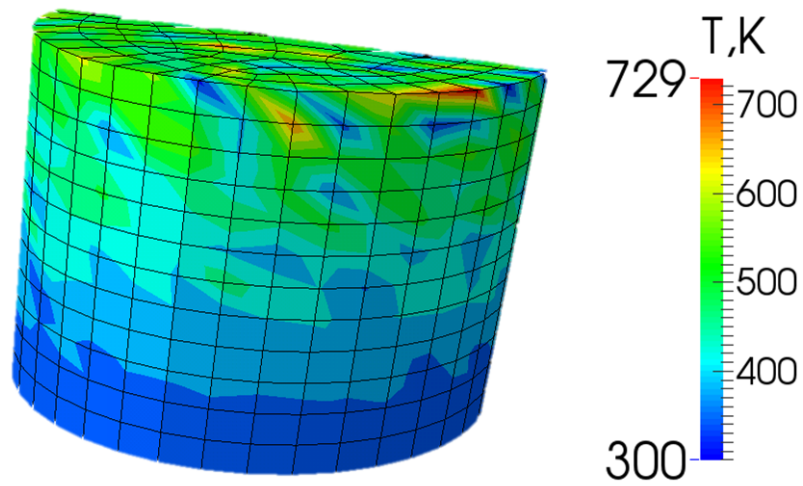


Рис. 3.11. Температура на момент времени 4 мкс.(К)

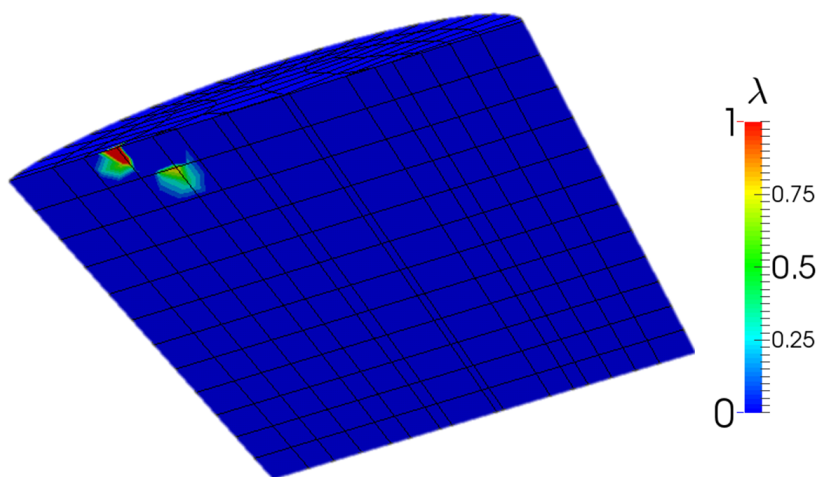


Рис. 3.12. Выгорание ВВ на момент времени 4 мкс.

сталлической пластичности, который позволяет учитывать анизотропию механических свойств отдельных зерен материала, а также их взаимодействие между собой. С помощью него в программный комплекс LS-Dyna внедрены различные модели упруго-пластического поведения отдельных зерен материала. Описана локализация сдвиговых деформаций. Количественно и качественно описаны эксперименты по низкоскоростной иницированию ВВ. Основные результаты этой главы опубликованы в статьях [1], [2] из списка публикаций, приведенного во Введении.

Заключение

Основные результаты выполненной работы заключаются в следующем:

-доработана двухтемпературная модель сплошной среды с учетом упругих свойств ионной подсистемы, что позволяет правильно описывать экспериментальные данные по ультракороткому лазерному облучению монокристаллов металлов

-для систем тонкая металлическая пленка-стеклянная подложка учтена сила адгезии между ними и порог разрушения пленки, зависящий от растягивающих напряжений и температуры, что позволяет точнее описывать режимы поведения данной системы при субпикосекундном лазерном воздействии

- для описания инициирования энергетических материалов при слабых механических воздействиях впервые применен конечно элементный метод кристаллической пластичности, который позволяет учесть анизотропные свойства отдельных зерен материала и их взаимодействие между собой.

В дальнейшем планируется в задачах ультракороткого лазерного воздействия перейти к моделированию трехмерных экспериментов с учетом движения дислокаций во многих плоскостях скольжения, а в задачах инициирования энергетических материалов планируется описание серии

экспериментов при нагружении ВВ различными ударниками с разными скоростями.

Литература

- [1] *Г.И. Канель, С.В. Разоренов, А.В. Уткин, В.Е. Фортвов*, Ударно-волновые явления в конденсированных средах, Москва, "Янус-К 1996.
- [2] *С.И. Анисимов, Я.А. Имас, Г.С. Романов, Ю.В. Ходыко*, Действие излучения большой мощности на металлы, Москва, Наука, 1970.
- [3] *С.И. Анисимов, Б.Л. Капелиович, Е.Л. Перельман*, Электронная эмиссия с поверхности металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов, ЖЭТФ, том 66, вып. 2, с. 776-781, 1974.
- [4] *Г.И. Канель, В.Е. Фортвов, С.В. Разоренов*, Успехи физ. наук, 177, 809, 2007.
- [5] *М.Б. Агранат, С.И. Анисимов, С.И. Ашитков, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов и др.*, Прочностные свойства расплава алюминия в условиях экстремально высоких темпов растяжения при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов, Письма в ЖЭТФ, том 91, вып. 9, с. 517-523, 2010.
- [6] Рисунок с сайта *Zhou Lab, Department of Physics, Tsinghua University*

- [7] *R. Evans, A. Badger, F. Fallies, M. Mahdiah et al.*, Time- and Space-Resolved Optical Probing of Femtosecond-Laser-Driven Shock Waves in Aluminium, *Phys. Rev. Let.*, 77, 16, 1996.
- [8] *K.T. Gahagan, D.S. Moore, David J. Funk, R.L. Rabie et al.*, Measurement of Shock Wave Rise Times in Metal Thin Films, *Phys. Rev. Let.*, 85, 15, 2000.
- [9] *М.И. Каганов, И.М. Лифшиц, Л.В. Танатаров*, Релаксация между электронами и решеткой, *ЖЭТФ*, том 31, вып. 2, с. 232-237, 1956.
- [10] *Н.А. Иногамов, А.М. Опарин, Ю.В. Петров, Н.В. Шапошников, С.И. Анисимов, Д. фон дер Лунде, Ю. Майер-тер-Фен*, Разлет вещества нагретого ультракоротким лазерным импульсом, *Письма в ЖЭТФ*, том 69, вып. 4, с. 284-289, 1999.
- [11] *С.И. Анисимов, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, К. Нишихара, А.М. Опарин, Ю.В. Петров*, Разрушение твердой пленки в результате действия ультракороткого лазерного импульса, *Письма в ЖЭТФ*, том 77, вып. 11, с. 731-736, 2003.
- [12] *Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер*, Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений, Москва, "Наука 1966.
- [13] *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*, Теоретическая физика, том VI, Гидродинамика, Москва, "Наука 1988.
- [14] *M.L. Wilkins*, Computer Simulation of Dynamic Phenomena, Springer-Verlag, 1999.

- [15] *A. Loveridge-Smith, A. Allen, J. Belak et al*, Anomalous Elastic Response of Silicon to Uniaxial Shock Compression on Nanosecond Time Scales, *Phys. Rev. Lett.*, 86, 2349-2352, 2001.
- [16] *S.I. Ashitkov, M.B. Agranat, G.I. Kanel, P.S. Komarov, V.E. Fortov*, Behavior of Aluminium near an Ultimate Theoretical Strength in Experiments with Femtosecond Laser Pulses, *JETP Lett.*, Vol. 92, № 8, 516-520, 2010.
- [17] *В.В. Жаховский. Н.А. Иногамов*, Упруго-пластические явления в ультракоротких ударных волнах, *Письма в ЖЭТФ*, том 92, вып. 8, с. 574-579, 2010.
- [18] *Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, В.А. Хохлов, В.В. Шепелев*, Сверхупругость и распространение ударных волн в кристаллах, *Письма в ЖЭТФ*, том 93, вып. 4, с. 245-251, 2011.
- [19] *V.H. Whitley, S.D. McGrane, D.E. Eakins, C.A. Bolme, D.S. Moore, J.F. Bingert*, The elastic-plastic response of aluminium films to ultrafast laser-generated shocks, *J. of App. Phys.*, 109, 013505, 2011.
- [20] *К.П. Мигдал*, Термодинамические и кинетические свойства металлов с возбужденной электронной подсистемой, *Дисс. на соиск. ст. канд. физ.-мат. наук*, ОИВТ РАН, Москва, 2018.
- [21] *А.В. Бушман, В.Е. Фортвов*, Модели уравнения состояния вещества, *Усп. физ. наук*, т. 140, вып. 2, с. 177-232, 1983.
- [22] *О.П. Шемякин, К.В. Хищенко*, Широкодиапазонное уравнение состояния металлов на основе модели Томаса-Ферми, *XI Междуна-*

родный семинар "Супервычисления и математическое моделирование" с.112-113, Саров, 2009.

- [23] *Д.В. Хеерман*, Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике, Москва, Наука, 1990.
- [24] *А.А. Самарский, Ю.П. Попов*, Разностные схемы газовой динамики, Москва, "Наука 1975.
- [25] *V.V. Zhakhovsky, M.M. Budzevich, N.A. Inogamov, I.I. Oleynik, C.T. White*, Two-Zone Elastic-Plastic Single Shock Waves in Solids, *Phys. Rev. Lett.*, 107, 135502, 2011.
- [26] *V.V. Zhakhovsky, M.M. Budzevich, N.A. Inogamov, C.T. White, I.I. Oleynik*, Single two-zone elastic-plastic shock waves in solids, *AIP Conf. Proc.* 1426, 1227-1232, 2012.
- [27] *B.J. Demaske, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, I.I. Oleynik*, Ultrashort short waves in nickel induced by femtosecond laser pulses, *Phys. Rev. B*, 87, 054109, 2013.
- [28] *А.М. Молодец*, Изломы ударных адиабат β -Sn и γ -Sn, *Теплофиз. выс. температур*, 40, 521, 2002.
- [29] *J.N. Johnson, L.M. Barker*, Dislocation Dynamics and Steady Plastic Wave Profiles in 6061-T Aluminium, *J. Appl. Phys*, 40, 4321, 1969.
- [30] *B.J. Demaske, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, C.T. White, I.I. Oleynik*, MD Simulations of Laser-Induced Ultrashort Shock Waves in Nickel, *AIP Conf. Proc.* 1426, 1163-1166, 2012.

- [31] *V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, B.J. Demaske, I.I. Oleynik, C.T. White*, Elastic-plastic collapse of super-elastic shock waves in face-centered-cubic solid, *Jour. of Phys.: Conf. Series*, 500, 172007, 2014.
- [32] *Г.А. Малыгин*, Процессы самоорганизации дислокаций и пластичность кристаллов, *УФН*, Том 169, №9.
- [33] *В.С. Красников, А.Ю. Куксин, А.Е. Майер, А.В. Янилкин*, Пластическая деформация при высокоскоростном нагружении алюминия: многомасштабный подход, *ФТТ*, том 52, вып. 7, 2010.
- [34] *V.S. Krasnikov, A.E. Mayer, A.P. Yalovets*, Dislocation based high-rate plasticity model and its application to plate impact and ultra short electron irradiation simulations, *Int. Jour. of Plasticity*, 27, 8, 1294 - 1308, 2011.
- [35] *T. Suzuki, S. Takeuchi, H. Yoshinaga*, *Dislocation Dynamics and Plasticity*, Springer, Berlin, 1991.
- [36] *Г.Э. Норман, А.В. Янилкин*, Гомогенное зарождение дислокаций, *Физ. тв. тела*, т. 53, вып. 8, 2011.
- [37] *B. Hopp, T. Smausz, T. Csizmadia et al.*, Production of nanostructures on bulk metal samples by laser ablation for fabrication of low-reflective surfaces, *Appl. Phys. A*, 113, 291-296, 2013.
- [38] *B. C. Stuart, M. D. Feit, S. Herman et al.*, Optical ablation by high-power short-pulse lasers, *J. Opt. Soc. Am. B*, 13, 459-468, 1996.

- [39] *J. Hermann, S. Noel, T. E. Itina et al.*, Correlation between ablation efficiency and nanoparticle generation during the short-pulse laser ablation of metals, *Laser Phys.*, 18, 374-379, 2008.
- [40] *S.I. Ashitkov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky et al.*, Formation of Nanocavities in the Surface Layer of an Aluminium Target Irradiated by a Femtosecond Laser Pulse, *JETP Lett.*, 95, 4, 176-181, 2012.
- [41] *N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov et al.*, Ultrafast Lasers and Solids in Highly Excited States: REsults of Hydrodynamics and Molecular Dynamics Simulations, *J. Phys.:Conf. Ser.*, 510, 012041, 2014.
- [42] *C. Wu and L. Zhigilei*, Microscopic mechanisms of laser spallation and ablation of metal targets from large-scale molecular dynamics simulations, *Appl. Physics A*, 114, 11-32, 2014.
- [43] *V. V. Zhakhovskii and N. A. Inogamov*, Elastic-plastic phenomena in ultrashort stress waves, *JETP Lett.*, 92, 8, 521-526, 2010.
- [44] *S.I. Ashitkov, M.B. Agranat, G.I. Kanel et al.*, Behavior of Aluminum near an Ultimate Theoretical Strength in Experiments with Femtosecond Laser Pulses, *JETP Lett.*, 92, 8, 516-520, 2010.
- [45] *K. Sokolovski-Tinten, J. Bialkowsky, A. Cavalleri et al.*, Transient States of Matter during Short Pulse Laser Ablation, *Phys. Rev. Lett.*, 81, 224-227, 1998.
- [46] *Н.А. Иногамов, А.М. Опарин, Ю.В. Петров, Н.В. Шапошников, С.И. Анисимов, Д. фон дер Линде, Ю. Майер-тер-Фен*, Разлет вещества нагретого ультракоротким лазерным импульсом, *Письма в ЖЭТФ*, том 69, вып. 4, с. 284-289, 1999.

- [47] *V.V. Zhakhovsky, K. Nishihara, S.I. Anisimov, N.A. Inogamov*, Molecular-dynamics simulation of rarefaction waves in media that can undergo phase transitions, *JETP Lett.*, 71, 167-172, 2000.
- [48] *С.И. Анисимов, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, К. Нишихара, А.М. Опарин, Ю.В. Петров*, Разрушение твердой пленки в результате действия ультракороткого лазерного импульса, *Письма в ЖЭТФ*, том 77, вып. 11, с. 731-736, 2003.
- [49] *S.I. Anisimov, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov et al.*, Simulation of the expansion of a crystal heated by an ultrashort laser pulse, *Appl. Surf. Sci.*, 253, 6390-6393, 2007.
- [50] *M.E. Povarnitsyn, T.E. Itina, M. Sentis, K.V. Khishchenko, P.R. Levashov*, Material decomposition mechanisms in femtosecond laser interactions with metals, *Phys. Rev. B*, 75, 235414, 2007.
- [51] *A.K. Upadhyay, N.A. Inogamov, B. Rethfeld, H. Urbassek*, Ablation by ultrashort laser pulses: Atomistic and thermodynamic analysis of the processes at the ablation threshold, *Phys Rev B*, 78, 045437, 2008.
- [52] *B.J. Demaske, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, I.I. Oleynik*, Ablation and spallation of gold films irradiated by ultrashort laser pulses, *Phys Rev B*, 82, 064113, 2010.
- [53] *P.M. Leguay, A. Levy, B. Chemier et al.*, Ultrafast short-range disordering of femtosecond-laser-heated warm dense aluminium, *Phys. Rev. Lett.*, 111, 245004, 2013.

- [54] *C. Unger, J. Koch, L. Overmeyer, B. Chichkov*, Time-resolved studies of femtosecond-laser induced melt dynamics, *Optics Express*, 20, 24864, 2012.
- [55] *Y. Nakata, K. Tsuchida, N. Miyanaga, T. Okada*, Nano-sized and periodic structures generated by interfering femtosecond laser , *Journal of Laser Micro/Nanoengineering*, 3, 63-66, 2008.
- [56] *В.И. Емельянов, Д.А. Заярный, А.А. Ионин и др.*, Наномасштабная гидродинамическая неустойчивость расплава при абляции тонкой пленки золота фемтосекундным лазерным импульсом, *Письма в ЖЭТФ*, том 99, вып. 9, с. 601-605, 2014.
- [57] *P.R. Levashov, K.V. Khishchenko*, Tabular Multiphase Equations of State for Metals and their Applications, *AIP Conf. Proc.*, 955, 59-62, 2007.
- [58] *K.V. Khishchenko*, Equations of state for two alkali metals at high temperatures, *J. Phys.:Conf. Ser.*, 98, 032023, 2008.
- [59] *K.V. Khishchenko*, Equation of state and phase diagram of tin at high pressures, *J. Phys.:Conf. Ser.*, 121, 022025, 2008.
- [60] *K.V. Khishchenko*, Equation of state for tungsten over a wide range of densities and internal energies, *J. Phys.:Conf. Ser.*, 653, 012081, 2015.
- [61] *V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, Yu. V. Petrov et al.*, Molecular-dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials, *Appl. Surf. Sci.*, 255, 9592-9596, 2009.

- [62] *N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky*, Formation of nanojets and nanodroplets by an ultrashort laser pulse at focusing in the diffraction limit, *JETP Lett.*, 100, 4-10, 2014.
- [63] *Y.V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky*, Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse, *Appl. Phys. B*, 119, 401-411, 2015.
- [64] *S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, A.V. Ovchinnikov et al.*, Ablation and nanostructuring of metals by femtosecond laser pulses, *Quant. Electron.*, 44, 535-539, 2014.
- [65] *E.L. Lee, C.M. Tarver*, Phenomenological Model of Shock Initiation in Heterogeneous Explosives, *Physics of Fluids*, 23, 12, 2362-2372, 1980.
- [66] *Ч. Мейдер*, Численное моделирование детонации, М.: Мир, 1985.
- [67] *Г.Т. Афанасьев, В.К. Боболев*, Иницирование твердых взрывчатых веществ ударом, М.: Наука, 1968.
- [68] *В.Г. Морозов, И.И. Карпенко, С.Е. Куратов и др.*, Теоретическое обоснование феноменологической модели ударно-волновой чувствительности ВВ на основе ТАТБ, *Химическая физика*, т. 14, № 2-3, 32, 1995.
- [69] *J.E. Reaugh*, Progress in model development to quantify High Explosive Violent Response(HEVR) to mechanical insult, LLNL-TR-405903, 2008.
- [70] *J.F. Kerrisk*, A Model for Shear-Band Formation and High-Explosive Initiation in Hydrodynamics Code, LANL Report LA-13127, Los Alamos, 1996.

- [71] *F.J. Zerilli, R.H. Guirguis, C.S. Coffey*, A burn model based on heating due to shear flow: proof of principle calculations, 12 International Detonation Symposium, 2002.
- [72] *F. Roters, Ph. Eisenlohr, Th. R. Bieler, D. Raabe*, Crystal Plasticity Finite Element Methods in Materials Science and Engineering, Wiley-VCH, Weinheim, 2010.
- [73] *B. Devincere, R. Madec, G. Monnet, S. Queyreau, R. Gatti, L. Kubin*, Modeling crystal plasticity with dislocation dynamics simulations: The «Micromegas» code, Mechanics of nano-objects, 81-99, 2011.
- [74] *С.М. Бахрах, Н.А. Володина, А.Р. Гушанов*, Инициирование детонации твердого ВВ при низкоскоростных воздействиях. Физическая модель и численное моделирование, «Молодежь в науке», Сборник докладов Четвертой научно-технической конференции, Саров, 2005.
- [75] *A. Gushanov, N. Volodina, G. Belov, N. Khvorostin, D. Isheev*, Numerical Simulation of Experiments on the Low-Velocity Impact on HMX-Based HE Using Explosive Transformation Kinetics, Journ. of Energ. Mat., 28, 50-65, 2010.
- [76] *www.lstc.com*
- [77] *M. Li, W.-J. Tan, B. Kang, R.-J. Xu, W. Tang*, The Elastic Modulus of β - HMX Crystals Determined by Nanoindentation, Propellants Explos. Pyrotech., 35, 2010.
- [78] *R. Austin, D. McDowell*, A dislocation-based constitutive model for viscoplastic deformation of fcc metals at very high strain rates, International Journal of Plasticity, 27, 2011.

- [79] *N. Jia, F. Roters, P. Eisenlohr, C. Kords, D. Raabe* , Non-crystallographic shear banding in crystal plasticity FEM simulations: Example of texture evolution in α -brass, *Acta Materialia*, 60, 1099-1115, 2012.