ДИНАМИКА АБЛЯЦИИ ЗОЛОТА В ВОДУ

Н. А. Иногамов ^{a,b*}, В. В. Жаховский ^{a,b}, В. А. Хохлов ^a

^а Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

> ^b Всероссийский НИИ автоматики им. Н. Л. Духова 127055, Москва, Россия

> > Поступила в редакцию 19 февраля 2018 г.

На примере пары золото – вода анализируются проблемы, связанные с ультракоротким лазерным воздействием на металлическую мишень, погруженную в прозрачную жидкость.

DOI: 10.1134/S004445101807009X

1. ВВЕДЕНИЕ

Содержательные эксперименты (см., например, работы [1-3]) по ультракороткому оптическому лазерному воздействию начались в 1990 годы после появления чирпированных лазерных источников в 80-е годы (см. работы [4, 5] и обзор [6]). На первом этапе (90-е гг.) внимание было сосредоточено на тепловой задаче. Применялась техника накачкизондирования (pump-probe измерений) [7,8], в которой после греющего импульса следует диагностический импульс. При этом определяются амплитуда и фаза отраженного диагностического импульса, что позволяет вычислить показатель преломления *n* поверхности, нагретой импульсом накачки, в момент отражения probe импульса (метод терморефлектанса). Задержка au_{delay} между ритр и probe импульсами известна и регулируется. Так находится эволюция оптических параметров облученной мишени $n(\tau_{delay})$ после воздействия pump импульса. Это позволяет судить о процессах в мишени, инициированных воздействием.

Таким образом, на первом этапе были обнаружены 1) переход в двухтемпературное (2T) состояние [1–3], предсказанное в пионерской работе [9], и 2) резкое увеличение электронной теплопроводности в металлах на 2T-стадии, которое называлось «баллистическим транспортом». Это два основных достижения первого этапа. Теоретическую основу экспериментов 90-х гг. составлял 2T-подход с двумя тепловыми уравнениями из работы [9] для энергий электронной E_e и ионной E_i подсистем:

$$P_e = \text{EHC} - \text{EXC} + S_L, \tag{1}$$

$$P_i = \text{EXC},\tag{2}$$

$$P = \text{EHC} + S_L, \quad P = P_e + P_i. \tag{3}$$

Система (1), (2) записана для неподвижного вещества (плотность $\rho = \text{const}$), т.е. без гидродинамических членов. Здесь P_e , P_i — мощности изменения соответствующих энергий $\rho \partial E_e / \partial t$, $\rho \partial E_i / \partial t$ в расчете на единицу объема, ЕНС — перенос энергии E_e по пространству электронной теплопроводностью, ЕХС = $\alpha(T_e - T_i)$ — обменное слагаемое, которое связывает электронную и ионную подсистемы, S_L — пространственное распределение мощности лазерного нагрева. Как это следует из уравнения (3), система (1), (2) сохраняет полную энергию $\int (P_e + P_i) dx$ после окончания лазерного импульса S_L ; интеграл берется по пространству, занятому веществом.

Пожалуй, именно «баллистический» эффект ярко подчеркивает двухтемпературность, заключающуюся в расщеплении на две подсистемы, (1) и (2). В результате в игру вступает истинная электронная температуропроводность $\chi_e \approx (1/3)l_ev_e$ и поглощенное электронами тепло распространяется по электронной подсистеме [10] с этим коэффициентом χ_e ; здесь l_e и v_e — свободный пробег и характерная скорость электронов проводимости, $v_e \sim v_F$, v_F — фермиевская скорость. Тогда как в однотемпературной (1*T*) ситуации (когда $T_e \approx T_i = T$) темп распространения тепла за счет электронной теплопроводности

^{*} E-mail: nailinogamov@gmail.com

зависит от эффективной электронной температуропроводности [10]

$$\chi_{1T} \approx \frac{c_e}{c_i} \frac{l_e v_e}{3},$$

т.е. на 1*T*-стадии имеется жесткая тепловая связь *e*- и *i*-подсистем согласно единому уравнению теплопроводности (3).

В опытах 90 гг. энергетика была слабой, повышения температуры T_e вследствие ультракороткого воздействия были малы, соответственно электронная подсистема оставалась сильно вырожденной, $T_e \ll T_F$, после воздействия (T_F — фермиевская температура). В таких опытах отношения теплоемкостей $c_e/c_i \sim T_e/T_F$ и температуропроводностей χ_{1T}/χ_e малы вплоть до весьма малых значений порядка 1/100. В опытах 90 гг. наблюдался быстрый (за время порядка пикосекунд) нагрев тыльной (по отношению к стороне лазерного воздействия) границы тонкой ($d_f = 50$ –100 нм) пленки. 1Т-оценка для времени распространения тепла дает

$$t \sim \frac{d_f^2}{\chi_{1T}} = 25 \left(\frac{d_f}{50 \text{ нм}}\right)^2$$
пс

при обычном значении $\chi_{1T} \sim 1 \text{ см}^2/\text{с}$. Такой разрыв в длительностях прогрева пленок указанной толщины привел к термину «баллистический» и наводил на мысль о двухтемпературности.

Если на описанном выше первом этапе ограничивались тепловым анализом, то на втором этапе исследователи подошли к полной задаче. В полной задаче нельзя пренебрегать движением, которое инициируется ультракоротким лазерным воздействием. В полной постановке становится возможным решение проблем создания поверхностных наноструктур и генерации наночастиц. Структуры и частицы появляются при учете плавления, растяжения и потери сплошности конденсированной среды вместе с рекристаллизацией и динамикой твердой, жидкой и паро-газовой сред.

Переход ко второму этапу был инициирован работами [11–13]. В работе [11] наблюдались кольца Ньютона, появление и накопление со временем которых невозможно было объяснить вне динамических представлений [12,13]. Так появились представления о термомеханической, или откольной абляции при фемтосекундном воздействии [12,13]. Аналогичные представления о термо- или фотомеханическом разрушении сложились независимо в исследованиях лазерного облучения полимеров и биоматериалов [14]. Движение среды становится определяющим



Рис. 1. Ранняя $-\infty < t \le t_{eq}$ и средняя $t \sim t_s$ стадии; три узловых момента (сверху вниз): a — поглощение лазерного импульса и формирование зоны прогрева (ЗП) толщиной d_T (HAZ — heat affected zone); 1 — граница металла; δ — акустическая, или средняя стадия $t \sim t_s$; на акустическом масштабе времени формируется уходящая (стрелка вниз) в толщу объемной мишени акустическая волна, состоящая из участка сжатия 3 и участка растяжения 2; b — начало первой нуклеации на участке 2

выше порога откольной абляции, величина которого зависит от вещества. Для металлов и поглощаемого в скин-слое оптического ультракороткого воздействия этот порог составляет порядка 50 мДж/см² по поглощенной энергии F_{abs} (это порог для объемных мишеней, толщина которых превышает толщину d_T слоя прогрева ультракоротким импульсом [15]) [15–17].

Основные принципы откольной абляции пояснены на рис. 1 и 2. Время отсчитывается от момента максимума интенсивности лазерного импульса на границе металла 1. Ширина стрелки «лазер» соответствует диаметру лазерного пучка на поглощающей поверхности. Важной особенностью 27-стадии является формирование зоны прогрева (ЗП) толщиной d_T на этой стадии, см. рис. 1. Длительность 2*T*стадии обозначена t_{eq} . Как говорилось выше (см. также работу [10]), на 27-стадии имеет место увеличение теплопроводящей способности электронной подсистемы за счет отделения электронной подсистемы с малой теплоемкостью от ионной подсистемы с большой теплоемкостью (независимость уравнений (1) и (2)). Коэффициент теплопроводности κ на 2*T*-стадии, κ_{2T} , намного больше, чем этот коэффициент на 1*T*-стадии, κ_{1T} (см., например, работы [18,19]). Поэтому формирование слоя d_T происходит со сверхзвуковой скоростью. Действительно [10], в диффузионном приближении толщина слоя прогрева растет по закону $x \propto \sqrt{\chi_e t}$, тогда



Рис. 2. Показаны поздние стадии, когда из кавитационных пузырьков на рис. 1 α образуется пена. Далее по времени имеет место снижение объемной доли жидкости в парожидкостной смеси, и пена разрывается по линии I: a случай расширения в вакуум (в качественном отношении мало отличается от случая расширения в конденсированную среду), δ — случай расширения в среду с небольшим (по сравнению с импедансом металла Z_{Au}), но конечным акустическим импедансом Z_{wt} . Обозначения: 1 — контактная граница (КГ); 2 — ударная волна в тормозящей среде; 3 — тормозящая среда вблизи КГ; 4 — слой сплошного металла; 5 — граница между слоем 4 и пеной; SP — откова иза прастича (спальт)

кольная пластина (spallation plate)

$$\frac{dx}{dt} \sim \sqrt{\frac{\chi_e}{t}} \sim \sqrt{\frac{l_e v_F}{t}} \sim v_F \sqrt{\frac{\tau}{t}},$$

здесь τ — время свободного пробега электрона. Фермиевская скорость v_F намного больше скорости звука $c_s \sim \sqrt{m_e/m_i} v_F$. Следовательно, требуется много столкновений для снижения скорости dx/dt до скорости звука. Это условие действует на 2T-стадии, пока уравнения (1) и (2) расцеплены. Число столкновений в прогреваемом слое толщиной x(t) велико, поэтому диффузионное приближение оправданно (это не кнудсеновский, т. е. не баллистический режим распространения тепла).

На рис. 1*а* иллюстрируется формирование слоя толщиной d_T . Как сказано, это сверхзвуковой процесс; после его окончания расширение слоя прогрева и его последующая рекристаллизация за счет теплоотвода в толщу металла протекают со скоростями, которые намного меньше скорости звука. Таким образом, слой d_T образуется за время порядка $d_T/(dx/dt)$ до завершения процесса формирования уходящей в толщу (стрелка вниз на рис. 1*б*) акустической волны. Характерная толщина и время формирования этой волны порядка d_T и $t_s = d_T/c_s$. Детали акустических явлений представлены в следующем разделе. На рис. 2 иллюстрируется ситуация на умеренно поздних временах при поглощенной энергии F_{abs} , в несколько раз превышающей порог F_{abl} откольной абляции при наличии внешней среды $F_{abs|abl|wt}$; пусть для определенности внешней средой является вода (wt). Отметим, что порог $F_{abs|abl|wt}$ заметно выше порога абляции в вакуум $F_{abs|abl|vac}$; в следующем разделе мы обсудим этот вопрос. Умеренно поздними будем называть времена, в несколько раз превышающие масштаб t_s . Кривая 1 на рис. 2 очерчивает границу металла. Пена на рис. 2*a* формируется из нуклеационных пузырьков, показанных на рис. 1*6*.

При $F_{abs} \approx F_{abs|abl|vac}$ слой пузырьков тонкий («одноразовая» нуклеация) и пены фактически нет. При превышении порога $F_{abs|abl|vac}$ в несколько раз, происходит последовательная многоразовая нуклеация. Забегая вперед, отметим, что наличие/отсутствие прозрачной, слабо теплопроводящей жидкости в контакте с мишенью никак не сказывается на процессе нуклеации. После первой нуклеации (см. рис. 16) растягивающее напряжение в слое нуклеации снижается до малых значений. Вслед за акустической волной из слоя нуклеации начинает распространяться откольный импульс, сбрасывающий растягивающее напряжение. Однако растягивающее напряжение (за волной сжатия достаточно большой амплитуды) начинает снова возрастать по абсолютной величине после первой нуклеации. В результате происходит вторая нуклеация в слое, который расположен дальше от контактной границы (КГ), чем слой первой нуклеации. Число нуклеаций определяется превышением над порогом $F_{abs|abl|wt}$. При многоразовой нуклеации образуется обширный слой пены (см. рис. 2а).

Вспенивание металлов, полупроводников и полимеров лазерным ультракоротким воздействием рассматривалось, начиная с работ [13, 14] (см. также [20–32]). Механические характеристики пены (сопротивление растяжению, ячеистость) рассматривались в работах [22,27,32]. Конечный размер облучающего пучка учтен в работе [31]. В [25] впервые было предположено, что заморозка вспененного вещества является причиной формирования хаотических поверхностных наноструктур, наблюдаемых в опытах.

При внешнем освещении наноструктур на них возбуждаются плазмоны. Диссипация этих плазмонов является причиной резкого уменьшения коэффициента отражения от поверхности с наноструктурами (почернение) по сравнению с идеально плоской поверхностью из того же металла.

Динамика абляции золота в воду

Вопросы кристаллизации расплава в пене были изучены в работах [21,23,24,28,30–32]. Экспериментальный анализ финальных (т. е. через продолжительное время после окончания всех процессов) замороженных наноструктур на облученной поверхности был выполнен в работах [33,34]. Перечисленные работы посвящены изучению вспенивания при распирении в вакуум. В настоящей работе исследуются образование общирной пены и последующая эволюция при наличии материальной внешней среды, тормозящей разлет вспененного вещества.

Кривая I на рис. 2 разделяет пену на две части. Верхняя часть постепенно налипает на КГ (кривая 1 на рис. 2), а нижняя остается связанной с дном кратера и остатком объемной мишени. Кристаллизация нижней части приводит к формированию наноструктур на поверхности кратера. Ниже кривой II на рис. 2 пена, сотканная из ячеек Вороного [29], успевает распасться на состоящую из капель паро-жидкостную смесь. Ячеечная структура [22] постепенно формируется из пузырьковой паро-жидкостной смеси по мере снижения объемной доли жидкой фазы в смеси. Пена между кривыми II и 5 на рис. 2 не успевает распасться на капли до того, как она выпадет на границу 5 слоя 4 из сплошного металла. Затем происходит выпадение капель из области между кривыми I и II на рис. 2 на этот слой. Выпадение пены и капель на слой 4 связано с торможением слоя 4. Торможение вызвано действием жидкости снаружи. Слой 4 тормозится, тогда как капли в пене летят по инерции, поскольку вне слоя 4 пена не знает о существовании внешней тормозящей среды. Пена начинает тормозиться только после попадания в слой 4. Отметим, что давление p_{I-5} в пене определяется испарением жидкого металла.

В слое 4 (см. рис. 2) на умеренно поздней стадии давление падает от давления p_{CB} на КГ до давления p_{I-5} . Ситуация зависит от величины поглощенного флюенса F_{abs} . Здесь ограничимся случаем, когда импульс является ультракоротким и F_{abs} превышает порог нуклеации при наличии внешней среды, $F_{abs|abl|wt}$, но не слишком сильно — не более чем в несколько раз. При небольших превышениях над порогом $F_{abs|abl|wt}$ слой сплошного металла у КГ является откольной пластиной или, в случае с конечным диаметром лазерного пучка (см. рис. 1*a*), откольной оболочкой. При увеличении превышения над порогом откольная пластина становится тоньше и на пороге «испарения» F_{ev} она исчезает [27,35]. Сказанное об F_{ev} относится к случаю абляции в вакуум.

В случае с вакуумом на отрезке флю
енсов $F_{abs|abl|vac} < F_{abs} < F_{abs|ev}$ над границей отколь-

ной оболочки располагается слой пара. Этот слой образован испарением с границы откольной оболочки. Массу парового слоя можно оценить по формуле Герца-Кнудсена, беря плотность насыщенного пара по температуре ионов [27, 36, 37]; неизвестно, как влияет электронная температура на энергию испарения (эффект существенный только на короткой 2Т-стадии). Такая оценка дает для массы пара величину порядка нанометра (3-4 моноатомных слоя) вблизи порога $F_{abs|abl|vac}$. Возле этого порога испаренный слой геометрически тонок, поскольку мала скорость звука в паре. Это видно по профилям плотности [27, 36]. Если сравнивать с толщиной пены, то испаренный слой остается тонким даже при флюенсах $F_{abs} \approx F_{abs|ev}$, при которых пересечение адиабаты разгрузки с бинодалью приближается к критической точке по кривой кипения [27,36]. Хотя вещество обсуждаемого парового слоя принадлежит двухфазной области, на наших временах молекулярно-динамического моделирования [27,36] не видно было признаков конденсации пара в зародыши капель; это времена порядка нескольких звуковых масштабов t_s. Паровой слой без конденсации существует впереди двухфазной области и несколько выше порога $F_{abs|ev}$ (см. рис. 12, 14 и 15 в работе [27]).

По-видимому, порог $F_{abs \mid ev}$ исчезает в случае абляции в тормозящую среду. Выше порога $F_{abs|abl|wt}$ появляется откольная пластина и полость под ней. По мере роста энергии F_{abs} над порогом $F_{abs|abl|wt}$ пластина становится тоньше, полость толще, масса вещества в пене растет (см. рис. 2a). Но с ростом F_{abs} откольная пластина не исчезает — торможение КГ «сгребает» металл к КГ. При этом металл превращается в сплошную среду, пока давление p_{CB} больше давления паров p_{I-5} на границе 5 на рис. 26. Условие $p_{CB} > p_{I-5}$ является обязательным для любого из рис. 2а и 2б. Действительно, иначе не будет торможения. Поэтому с принципиальной точки зрения оба слоя металла на КГ на рис. 2а и 26 представляются достаточно эквивалентными. Хотя, с другой стороны, при снижении плотности внешней среды до нуля откольная пластина на рис. 2а сохранится, а вот слой на рис. 26 пропадет.

В системе координат, связанной с КГ, торможение g КГ эквивалентно эффективному полю тяжести с ускорением свободного падения g. Оценка высоты однородной атмосферы из атомов золота (по формуле для идеального газа) в этом гравитационном поле имеет вид



Рис. 3. Атмосфера 4 в поле тяжести (ускорение свободного падения g), опирающаяся своим весом на воду 3. Рисунок в системе координат, связанной с КГ. Цифровые обозначения такие же, как на рис. 2: 1 — контакт между золотом и водой; 5 — верхняя граница атмосферы. Со скоростью Δu струйки и капли двухфазной среды 5–II–I (см. рис. 2) выпадают сверху на атмосферу

$$h_{atm} [\text{HM}] = \frac{k_B T}{m_i g} = 40 \frac{T_{\text{KK}}}{g_{14}},$$
 (4)

где $T_{\rm \kappa K}$ — температура металла вблизи КГ в килокельвинах, $g = 10^{14}g_{14}$ см/с². Максимально возможное давление на КГ дается формулой для идеального газа

$$p_{CB}^{max}$$
 [$\Gamma\Pi a$] = $nk_BT = 0.83(\rho/\rho_0)T_{\kappa K}$,

где $\rho_0 = 19.3 \text{ г/см}^3$ — плотность золота при нормальных условиях. Чем ниже давление p_{CB} на КГ по сравнению с p_{CB}^{max} , тем в более конденсированном состоянии находится металл.

Ниже будем рассматривать пару вода – золото. Атмосфера или откольный слой опирается своим весом на подстилающую ударно-сжатую воду (если перевернуть картинки на рис. 2, как это показано на рис. 3). Атмосфера находится в квазигидростатическом равновесии, поскольку это конденсированная фаза с большой скоростью звука (в отличие от двухфазной среды). Звук пробегает атмосферу по вертикали быстрее, чем изменяется торможение g(t). В двухфазной области 5–II–I на рис. 2 (область над кривой 5 на рис. 3) скорость звука очень мала. Жидкость в этой области летит по инерции, на нее не действует эффективное торможение g. С этим связано появление избытка скорости ΔV , показанного на рис. 3. Выпадение вещества (пены или капель) 5–II–I с рис. 2 на слой 4 на рис. 2 и 3 схоже с аккрецией газа на атмосферу в астрофизике [38–42]. Но в отличие от астрофизики, в нашей ситуации на атмосферу аккрецирует вещество, находящееся в двухфазном состоянии (жидкость – пар). После падения пены паровые промежутки в двухфазной среде закрываются, и выпавшая материя становится однофазным веществом атмосферы или откольного слоя.

В астрофизике рассматривают аккрецию на нейтронную звезду, окруженную магнитосферой [38,39], [41] (разд. 8.3), [42] (разд. 5). При этом, во-первых, вместо области 5-II-I на рис. 2 имеется аккрецирующий поток, находящийся в состоянии свободного падения на звезду. Во-вторых, аккрецирующий поток перехватывает гидростатическая атмосфера, вполне аналогичная нашему слою 4. Атмосферу составляет диамагнитная плазма, выталкивающая магнитное поле. Атмосфера (гидростатическая оболочка магнитосферы) покоится на магнитосфере звезды. В-третьих, подпирающее атмосферу магнитное поле аналогично веществу малой плотности в области 3 на рис. 2 и 3. Находящийся в поле тяжести звезды контакт (КГ 1 в нашей ситуации) между плазмой и магнитным полем неустойчив по отношению к развитию магнитного аналога неустойчивости Рэлея-Тейлора.

Похожая ситуация с атмосферой, которая формируется за счет торможения межзвездной средой, возникает при разлете остатков сверхновой [41–43]. Другой пример — это разлет продуктов детонации заряда конденсированного взрывчатого вещества в окружающий газ [44, 45]. В обоих случаях есть и торможение внешним веществом, и подпитка атмосферы-оболочки внутренним потоком, причем внутренний поток — сверхзвуковой, так что возникают две ударные волны: внешняя в тормозящем веществе и внутренняя на внутренней границе атмосферы.

С аккрецией связан приток массы $\dot{m} [r \cdot c^{-1} \cdot cm^{-2}]$ и импульса $\dot{m}\Delta u$ в слой 4 на рис. 2 и 3. Приток массы постепенно увеличивает геометрическую толщину атмосферы и является одной из причин уменьшения темпа торможения g. Добавление импульса эквивалентно давлению, прикладываемому к слою 4 на рис. 2 и 3 со стороны границы 5. Эта добавка также действует в сторону увеличения времени остановки откольной пластины. Вскоре после исчерпания потока \dot{m} пластина практически останавливается.

Давление p_{CB} на контакте складывается из трех составляющих. Во-первых, это вес атмосферы $g \int_{1}^{5} \rho \, dx$ (пределы 1 и 5 означают границы слоя 4



Рис. 4. Давление насыщенного пара золота (сплошная кривая) согласно широкодиапазонному уравнению состояния золота [46–48]. Приведенная зависимость приближенно аппроксимируется формулой p_{sat} [ГПа] = $35 \exp(-39.95/T \, [\rm kK] + T \, [\rm kK]/9$): — экспериментальные точки; критическая точка (\circ) имеет координаты T_{cr} = $7.8 \, \rm kK, \, p_{cr} = 0.53 \, \Gamma \Pi a, \, \rho_{cr} = 5.3 \, \rm r/cm^3$; • — экспериментальное значение давления насыщенного пара

на рис. 2, 3), во-вторых, поток импульса $\dot{m} \Delta V$ и, втретьих, это давление пара со стороны двухфазной области 5–II–I, см. рис. 2. Давление насыщенного пара золота приведено на рис. 4. Оно взято согласно широкодиапазонному уравнению состояния золота [46–48]. Для сравнения на рис. 4 приведены 6 точек из википедии [49] и точка кипения золота из того же источника [49]. Как видим, последняя из точек [49] при давлении 1 бар = 100000 Па и точка кипения при давлении 1 атм = 101325 Па немного не согласуются по температуре.

Из рис. 3 ясно, что контакт 1 неустойчив относительно неустойчивости Рэлея – Тейлора (НРТ), поскольку эффективный вес направлен от тяжелого золота (слой 4) к легкой воде (пространство 3) [39,41,42,50,51]. Однако условия далеки от стандартных (стационарное состояние, несжимаемая жидкость, бесконечная толщина слоев). Разумеется, чтобы сделать заключение о роли НРТ, необходимо детально изучить одномерное течение, на фоне которого растут возмущения. Этому посвящен дальнейший материал.

2. ОБЩАЯ КАРТИНА

Анализ ситуации, данный ниже, основывается на численном моделировании. Важно предварить

этот анализ обсуждением общей картины, чтобы были понятны достаточно сложные детали, которые выявляются при моделировании. Рассмотрим пост-2Т-стадию, которая начинается после выравнивания электронной T_e и ионной T_i температур. Дело в том, что 2Т-стадия — короткая, а распространение тепла на ней — сверхзвуковое. Поэтому в первом приближении можно пренебречь длительностью t_{eq} 2T-стадии. При этом рассматриваются акустические явления на акустических временах t_s = $= d_T/c_s$, т. е. слой толщиной d_T создается теплопроводностью за время $t_{eq} > \tau_L$, а распадается акустически за времена порядка $t_s \gg t_{eq}$. Хуже всего это приближение (с малым параметром t_{eq}/t_s) применимо в случае золота, для которого время teq принимает довольно большие значения порядка 5-7 пс; для других металлов $t_{eq} \sim 1$ пс. Впрочем, в случае золота толщина прогрева велика, $d_T \sim 150$ нм. Так что акустический масштаб составляет 50 пс; $c_s \approx 3 \, \text{км/c} = 3 \, \text{нм/пс}.$

На пост-2*T*-стадии в качестве начальных данных имеем мгновенно созданный слой прогрева толщиной порядка d_T , вещество слоя покоится; здесь пренебрегаем тонким слоем вещества на краю. (Толщина этого тонкого слоя $c_s t_{eq}$, и он вовлечен в движение 2*T*-волной разрежения.) Пусть сначала $d_T = \infty$. Тогда область «сжатия» (область повышенного давления, созданная мгновенным нагревом) бесконечна, а волна разрежения автомодельна. Эта ситуация была изучена в работах [52–56].

Если сравнивать волны разрежения в газе и в конденсированной среде (твердое тело, жидкость), то надо подчеркнуть, что сильнейшее влияние на форму волны разрежения оказывает свойство когезии конденсированной фазы. Из-за межатомного притяжения появляется «нуль» давления на адиабатах и изотермах конденсированного вещества, причем нулевое давление достигается при конечной плотности (см. ниже; будет ясно, почему мы взяли слово нуль в кавычки). На рис. 5 показаны адиабаты и изотермы. Газовые адиабаты и изотермы в качественном плане схожи с кривой 3 на рис. 5. Давление на них определяется кинетической энергией движения атомов и везде положительно.

Важно, что из-за сцепления атомов в конденсированных состояниях давление $p(\rho)$ на рис. 5 обращается в нуль при конечной плотности ρ_{eq} вещества. Эта плотность называется равновесной, а зависимость $\rho_{eq}(T)$ определяет тепловое расширение конденсированного вещества, связанное с ангармоническими членами. Плотности $\rho_{eq}(T > 0)$ меньше, но сравнимы с твердотельной плотностью $\rho_{eq}(0)$. Усло-



Рис. 5. (В цвете онлайн) Адиабаты или изотермы расширения, соответствующие нарастающим значениям энтропии $s_1 < s_2 < s_3$ или температуры $T_1 < T_2 < T_3$; цифры нумеруют кривые. Области p < 0 от точки пересечения оси p = 0 и до минимума относятся к метастабильным состояниям

вие $p(\rho_{eq}) = 0$ играет определяющую роль в гидродинамике расширения в лазерной волне разрежения. Действительно, давление вакуума (среды, в которую происходит расширение) равно нулю. Таким образом, на рис. 5 отрезок кривой от начальной точки $\rho_0, p(T)$ (зеленый кружок) до точки пересечения с осью p = 0, (голубой кружок $\rho = \rho_{eq}, p = 0$), описывает автомодельную волну разрежения [53–56] при расширении мгновенно нагретого вещества в вакуум. Зависимость от x, t сводится к зависимости от автомодельной переменной x/t, где x отсчитывается от начального положения КГ, а t — от мгновения мгновенного нагрева [53–56].

При этом в точке ρ_{eq} , p = 0 (голубой кружок на рис. 5) выполняется динамическое граничное условие, сопрягающее вещество с вакуумом. «Мгновенный» нагрев (приближение $t_{eq}/t_s \ll 1$) забрасывает вещество из точки ρ_0 , p = 0, относящейся к состоянию до ультракороткого воздействия, в состояние $\rho_0, p(T(F_{abs}))$ на изохоре начальной плотности ρ_0 на рис. 5. Чем больше поглощенная энергия F_{abs} , тем выше на изохоре ρ_0 находится начальная точка (начальное состояние), с которой стартует волна разрежения.

Четыре участка, из которых составлены профили на рис. 6, следующие.

Во-первых, это начальное состояние с одинаковой плотностью ρ_0 , но с разными начальными давлениями 1, 2 и 3. Эти давления показаны на рис. 5.



Рис. 6. Профили волны разрежения в модели с мгновенным нагревом $(t_{eq}/t_s\ll 1)$ и большой глубиной прогрева $(d_T=\infty)$. Цифры 1, 2 и 3 относятся к кривым 1, 2 и 3 на рис. 5 с повышающимися значениями F_{abs} . Профили состоят из четырех участков (см. текст)

Профиль 1 на рис. 5 изображен выходящим с оси p = 0. Надо на рис. 5 немного поднять начальное давление над нулем, чтобы получить профиль плотности 1 на рис. 6. Профиль 1 на рис. 6 с высокой точностью описывается в линейном акустическом приближении, поскольку давления малы по сравнению с объемным модулем конденсированной фазы, скорости малы по сравнению со скоростью звука, а уменьшение плотности $\delta \rho$ в волне разрежения мало в сравнении с ρ_0 . Профилям вида 1 соответствуют быстро нагретые состояния твердого тела или расплава немного выше кривой плавления; считаем, что до воздействия вещество покоилось при комнатных условиях.

Во-вторых, это центрированная волна разрежения с веером характеристик [53–56]. На рис. 6 к вееру относится сброс плотности между первой и второй областями однородного течения. Над второй однородной областью на рис. 6 поставлены цифры 1, 2 и 3. Эта область называется ступенькой, или плато. Ей соответствует точка пересечения с осью p = 0 на рис. 5 на фазовой плоскости (ρ, p) .

В-третьих, это плато на рис. 6.

В-четвертых, это паровой «хвостик», соединяющий плато с вакуумом. Хвостику соответствует веер других характеристик, на которых скорость расширения потока в вакуум выше, чем в веере на втором из перечисленных участков. Если при решении уравнений газодинамики методом Римана пользоваться равновесными адиабатами и изотермами, то хвостик проходит полностью по двухфазной области под бинодалью на плоскости (ρ, T) в случае адиабаты и частично по двухфазной области, а частично по области однофазного газа в случае изотермы. Соответствующие адиабаты и изотермы показаны на рис. 7. В прослойке пара (адиабата) или пара и газа (изотерма) давление снижается от давления насыщенного пара $p_{sat}(T)$ до нулевого давления вакуума (см. рис. 7). Отметим, что в представленных ни-



Рис. 7. Фазовые диаграммы на плоскостях (ρ, T) и (ρ, p) . На этих плоскостях сравниваются формы адиабатического (i) и изотермического (ii-iii) хвостиков профилей с рис. 6; b — бинодаль, m — область плавления. Вертикальный скачок по температуре и давлению по изохоре ρ_0 соответствует приближению быстрого нагрева $t_{eq} \ll t_s$

же молекулярно-динамических расчетах, на наших пространственно-временных масштабах, в паровой части хвостика не видно образования конденсата.

Бинодаль b на рис. 7 ограничивает область равновесных двухфазных состояний. При расширении вещества в равновесной волне разрежения до бинодали, см. рис. 5 и 7, давление падает до давления насыщенного пара $p_{sat}(T)$. Значения $p_{sat}(T) < p_{cr}$ (см. рис. 4) малы по сравнению с начальными давлениями $p_0(\rho_0) > 7$ ГПа при интересующих нас нагревах выше порога абляции $F_{abs|abl}$. Критическое давление $p_{cr} = 0.53$ ГПа согласно используемому уравнению состояния золота [46–48]. На рис. 5 излом равновесного профиля происходит не на оси p = 0, а чуть выше, при давлении $p_{sat}(T)$. Поскольку $p_{sat}(T) \ll p_0(F_{abs})$, излом на рис. 5 помещен на ось p = 0. В остальном рис. 5 и 7 являются одинаковыми.

Видим, что с повышением F_{abs} (кривые $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$) яма отрицательного давления на рис. 5 становится мельче и что параллельно деформируется пространственный профиль волны разрежения, показанный на рис. 6 (профили $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$). Как говорилось, случаи с относительно малыми нагревами (кривая и профиль 1) описываются в линейном аку-

стическом приближении. При этом скорость расширения металла на плато равна

$$u = \frac{p_0(F_{abs})}{Z_A} = \frac{p_0(F_{abs})}{B} c_s$$

где $Z_A = \rho c_s$ — акустический импеданс золота, B — объемный модуль. Соответственно левый край плато на рис. 6 уходит на расстояние ut от x = 0 в момент t, отсчитываемый от максимума лазерного импульса. Головная характеристика веера характеристик находится на расстоянии $c_s t$ на рис. 6. На рис. 6 эта характеристика движется направо, в толщу вещества.

С повышением F_{abs} увеличивается амплитуда сброса давления на участке расширения от начальной плотности до плотности плато, понижается плотность на плато, увеличивается скорость вещества на плато и уменьшается протяженность влато, ср. плато под цифрами 1, 2 и 3 на рис. 6. Зато протяженность хвостика возрастает. При больших значениях F_{abs} , когда пересечение с бинодалью приближается к критической точке, плато становится маленьким и исчезает. При этом профиль волны разрежения похож на ее профиль в случае газа.

Мы остановились здесь на решениях в случае $t_{eq} \ll t_s, d_T \gg c_s t_{eq}$, поскольку нам нужно качественное понимание перед переходом к численным результатам. Рисунки 5–7, построенные для случая расширения в вакуум, помогут нам описать ситуацию при расширении во внешнюю материальную среду. На принципиальном уровне эти два случая разнятся за счет динамического краевого условия: $p_{CB} = 0$ (вакуум) против $p_{CB} > 0$ (тормозящая внешняя среда), т.е. нам просто нужно поднять внешнее давление с $p_{CB} = 0$ до $p_{CB} > 0$. Если внешнее давление постоянно по времени и толщина мгновенно нагретого слоя бесконечна, то автомодельность сохраняется.

Пусть T_{bin} — это температура в точке пересечения адиабаты и бинодали при интересующем нас значении F_{abs} ; считаем, что в волне разрежения мгновенно нагретое вещество расширяется с сохранением энтропии; бинодаль — это кривая сосуществования паровой и конденсированных фаз. Возможны два режима.

В режиме 1 внешнее давление p_{CB} (как сказано, считаем, что оно постоянно во времени) меньше давления насыщенного пара $p_{sat}(T_{bin})$; подчеркнем, что давление на плато равно $p_{sat}(T_{bin})$. К контакту, на котором поддерживается постоянное давление p_{CB} , прилегает слой с однородным течением. На правом краю этого слоя находится характеристика второго веера характеристик, т.е. хвостика (см. рис. 6). Далее следует остальная часть двухфазного хвостика, на котором давление возрастает при смещении направо (т.е. в сторону толщи мишени). Это возрастание начинается со значения p_{CB} и продолжается до точки примыкания хвостика к плато с давлением $p_{sat}(T_{bin})$. Далее направо располагается плато $p_{sat}(T_{bin})$. Еще правее находится первый веер характеристик, который соединяет плато $p_{sat}(T_{bin})$ и головную характеристику, бегущую по невозмущенному мгновенно нагретому веществу. Как говорилось, на фазовой термодинамической плоскости первому вееру соответствует отрезок адиабаты между зеленой и голубой точками на рис. 5. При этом зеленой точке соответствует головная характеристика, а голубой — плато с давлением $p_{sat}(T_{bin})$. Итак, в первом режиме имеются два плато: одно с давлением p_{CB} и другое с давлением $p_{sat}(T_{bin})$.

В режиме 2 внешнее давление p_{CB} больше давления насыщенного пара $p_{sat}(T_{bin})$. Тогда к КГ с областью внешнего давления p_{CB} прилегает слой однородного течения (плато). Правой границей этого плато становится внутренняя характеристика первого веера. Это означает, что адиабата расширения на рис. 5 и 7 не доходит до бинодали.

Именно эта ситуация осуществляется на продолжительном начальном участке времени в интересующем нас случае взаимодействия между золотом и водой. Поэтому ниже рассматривается режим 2. Разумеется, при продолжительном расширении в воду давление $p_{CB}(t)$ на КГ сильно уменьшается. Если со стороны золота температура контакта $T_{CB}(t)$ сохраняется, то в конце концов давление насыщенных паров золота $p_{sat}(T_{CB})$ превысит $p_{CB}(t)$. Но, во-первых, это произойдет не скоро, и, во-вторых, это может вообще не иметь места, если температура золота $T_{CB}(t)$ снижается в достаточно быстром темпе, так что давление $p_{sat}(T_{CB}(t))$ уменьшается быстрее, чем $p_{CB}(t)$. Эти вопросы будут рассматриваться после анализа численных расчетов.

Главное заключается в том, что в режиме 2 область однородного течения возле КГ со стороны металла сохраняется. Это опять плато, но теперь давление на плато не равно $p_{sat}(T_{bin})$, а определяется внешним давлением p_{CB} : $p_{CB} > p_{sat}(T_{bin})$.

При интересующих нас больших значениях поглощенной энергии F_{abs} при разлете в вакуум высота плато $p_{sat}(T_{bin})$ мала по сравнению с давлением на изохоре:

$$p_{sat}(T_{bin}) \ll p_0(F_{abs}) \sim 100$$
 ГПа,
 $p_{sat}(T_{bin}) \le p_{cr} = 0.53$ ГПа,

здесь $p_0(F_{abs})$ — давление на изохоре $\rho = \rho_0$ после мгновенного нагрева (см. рис. 5 и 7). С другой стороны, адиабата Гюгонио воды такова, что при наших значениях F_{abs} давление p_{CB} на КГ золото – вода на начальной стадии достаточно высокое (см. обсуждение ниже). Это давление на порядок превышает критическое давление золота $p_{CB} \gg p_{cr}^{Au}$. При этом контактное давление мало, $p_{CB} \ll p_0(F_{abs})$, по сравнению с давление на изохоре начальной плотности сразу после нагрева. Таким образом, в нашей ситуации на начальной стадии имеем $p_{cr}^{Au} \ll p_{CB} \ll p_0(F_{abs})$. Это профиль относящийся к режиму 2.

Нами рассматриваются случаи с таким значением *F_{abs}*, что при разлете в вакуум плато слабо выражено, на рис. 7 точка пересечения адиабаты и бинодали находится правее или левее критической точки, профиль похож на разлет газа. Но из-за противодействия воды расширению золота приконтактное плато появляется (режим 2). Впрочем, такое плато появится и в случае газа при распаде разрыва давления. Поясним, что называется распадом разрыва или скачка в газовой динамике. При t < 0 имеем два однородных соприкасающихся через жесткую стенку полупространства. Правое полупространство с большой плотностью и высоким давлением (золото) и левое полупространство с малой плотностью и низким давлением (вода). При t = 0 стенка мгновенно убирается. В результате возникает течение с волной разрежения в золоте, приконтактным плато и ударной волной в воде.

Ясно, что область золота, на которую влияет отличие воды от вакуума, ограничена слоем плато. За этим слоем расширение золота происходит так же, как в случае с вакуумом.

Оценим давление p_{CB} и скорость u_{CB} контакта в рамках линейной акустики как в воде, так и в золоте. Приравнивая давление и скорость в воде давлению и скорости плато, получим

$$p_{CB} = \frac{\xi p}{1+\xi}, \quad u_{CB} = \frac{p_{CB}}{Z_{wt}},\tag{5}$$

где $\xi = Z_{wt}/Z_A \approx 0.03, Z = \rho c_s$ — акустический импеданс, $Z_{\rm Au}$ — импеданс золота, Z_{wt} — импеданс воды, p — давление в золоте вне зоны влияния волны разрежения. Если взять p = 100 ГПа, то

$$p_{CB} = 3 \Gamma \Pi a, \quad u_{CB} = 1.8 \text{ km/c.}$$
 (6)

Другая оценка следует при учете адиабаты Гюгонио воды [57]:

$$D = c + 1.8u_{CB},\tag{7}$$

где D — скорость ударной волны (УВ) в воде, c = 1.6 км/с — скорость звука в воде при нормальных условиях. Ударно-сжатая вода «жестче», чем в линейной акустике. Поэтому давление на КГ получается больше, чем по формуле (5), а скорость контакта — меньше. Найдем p_{CB} и u_{CB} в случае, когда золото описывается в приближении линейной акустики, а вода — с помощью ударной адиабаты (7). Действительно, объемный модуль воды $B_{wt} = \rho_{wt}^0 c^2 = 2.6 \ ГПа сравним с оценкой давления по формуле (5) при <math>p \sim 1 \ Mбар (\rho_{wt}^0 - плотность воды при нормальных условиях). Так что нелинейные эффекты в воде при распаде разрыва существенны. Запишем$

$$u_{CB} = (p - p_{CB})/Z_{Au}, \qquad (8)$$

$$\frac{V}{V_0} = 1 - \frac{u_{CB}}{c + 1.8u_{CB}},\tag{9}$$

$$p_{CB} = B_{wt} \frac{1 - V/V_0}{[1 - 1.8(1 - V/V_0)]^2},$$
(10)

где p — по-прежнему давление в золоте вне зоны влияния волны разрежения, V/V_0 — степень сжатия воды в УВ. Уравнение (8) дает скорость золота при ускорении из неподвижного состояния под действием перепада давлений от p до p_{CB} . Уравнение (9) следует из кинематики УВ и условия сохранения массы. Уравнение (10) представляет закон сохранения импульса в УВ (давлением перед УВ пренебрегаем). Решая эту систему при p = 100 ГПа, находим

$$p_{CB} = 6.9 \ \Gamma \Pi a, \quad u_{CB} = 1.6 \ \kappa m/c.$$
 (11)

Как видим, давление p_{CB} (11) меняется в два раза по сравнению с приведенным в (6), тогда как скорость $u_{CB} \approx p/Z_A$ снижается незначительно (при условии $p \gg p_{CB}$). Условие $p \gg p_{CB}$ означает, что приконтактные явления имеют место у подножия высокой «горы» по давлению (см. кривую 3 на рис. 6). Таким образом, скорость КГ, обозначенная u_{CB} , в основном набирается при разгрузке высокого давления p вдоль первого веера характеристик волны разрежения в нагретом золоте.

На рис. 8 и 9 приведены ударные адиабаты воды по экспериментальным данным, собранным в [48]. Эти данные аппроксимирует зависимость

$$p = 2.25x + 7.07x^2 + 25.08x^3 - 7.04x^4,$$

$$x = \rho/\rho_0 - 1,$$
 (12)

показанная на рис. 8, 9. В формуле (12) давление *р* приведено в ГПа. Аппроксимация (12) обеспечивает скорость звука 1.5 км/с при малых сжатиях и справедлива при давлениях порядка 100 ГПа.



Рис. 8. Адиабата Гюгонио воды в области умеренных сжатий: значки — данные разных серий опытов, взятые из [48], кривая 1 рассчитана по формуле (10), кривая 2 представляет аппроксимационную зависимость (12), справедливую в диапазоне давлений от 0 до примерно 1 Мбар (см. рис. 9)



Рис. 9. Ударная адиабата воды по всем имеющимся на сегодня данным опытов [48] (значки). Кривой показана аппроксимация (12) этих данных

При двухтемпературном одномерном численном гидродинамическом (2*T*ГД-код) моделировании для описания воды будет использоваться зависимость (12). В 2*T*ГД-расчетах будем пренебрегать теплопроводностным прогревом воды, поскольку теплопроводность воды, связанная с вибрациями молекул, мала по сравнению с теплопроводностью золота. В молекулярно-динамических (МД) расчетах этот эффект учитывается. Необратимые нагревы воды, связанные с диссипацией в УВ, при давлениях (6), (11) невелики. В 2*T*ГД-расчетах вместо уравнения состояния воды применяется уравнение (12) в качестве адиабаты сжатия воды. При этом учитывается обратимая часть нагрева, вызванная ударным сжатием.

При оценках (5) и в выражениях (8)–(10) полагается, что золото подчиняется линейной акустике. Действительно, объемный модуль золота (1.8 Мбар) достаточно велик даже по сравнению с давлением $p \sim 1$ Мбар, рассмотренным выше. Однако в ситуации с лазерным излучением повышение давления связано с нагревом. Линеаризация уравнений газодинамики по малым возмущениям приводит к акустическим и энтропийной модам (в многомерном случае энтропийно-вихревая мода). Акустические моды разбегаются из слоя инициации со скоростью звука, а энтропийное возмущение остается «вмороженным» в вещество, т.е. горячий поверхностный слой сохраняется на временах остывания за счет теплопроводности. Именно этот горячий слой является ареной активных гидродинамических явлений (вспенивание, внутреннее испарение), изучаемых ниже. Нуклеация зародышей паровой фазы и вспенивание появляются при учете конечной толщины d_T слоя прогрева. В рассмотренных выше условиях, когда $d_T = \infty$, нуклеации нет.

Условие линейности (т.е. малости) энтропийного возмущения в конденсированной среде означает, что изменение температуры от комнатной до конечной мало по сравнению с критической температурой. Тогда при тепловом расширении уменьшение плотности $\delta \rho$ будет мало по сравнению с плотностью золота ρ_0 при нормальных условиях. Но это условие в интересующих нас ситуациях не выполняется; имеют место нагрев до температур порядка критической и расширение золота большой амплитуды с $\delta \rho \sim \rho_0$. Возникает нелинейный горячий слой (нелинейное энтропийное возмущение) толщиной $d_T \sim 150$ нм. Анализ этой ситуации требует численного моделирования. Любопытно, что волна сжатия, уходя в объем из породившего ее слоя d_T , становится квазилинейной, поскольку давления сжатия в этой волне сопоставимы, но меньше, объемного модуля (при рассматриваемых здесь значениях F_{abs}).

3. УЧЕТ КОНЕЧНОЙ ГЛУБИНЫ ПРОГРЕВА

В разд. 2 рассмотрен случай, который в учебниках по механике жидкости и газа называется распадом разрыва. В момент распада t = 0 снимается перегородка между двумя однородными полупространствами (в нашем случае золото/вакуум или золото/вода), между которыми имеется разница давлений. Течение при t > 0 является автомодельным. В нашем случае имеется волна разрежения, которая бежит со скоростью звука по золоту, находящемуся под высоким давлением, и УВ, которая распространяется в воду.

В разд. 2 толщина прогретого слоя $d_T = \infty$, поэтому полупространство, занятое золотом, однородно (однородны распределения ρ , p, T при t < 0). Если толщина d_T ограничена (в нашем случае $d_T \approx$ ≈ 150 нм), то автомодельное решение существует, пока $t \ll t_s, t_s = d_T/c_s$. На временах $t \sim t_s$ автомодельность перестает соблюдаться, происходит переход на режим движения, который будем называть распадом «мгновенно» нагретого, горячего слоя конечной толщины у КГ с вакуумом или водой.

В акустических терминах при $0 < t \le t_s$ течение представляется в виде суммы четырех акустических (i, ii, iii, iv) и одной энтропийной моды. Энтропийная и три акустические (i, ii, iii) моды находятся в золоте. Из горячего слоя внутри золота бегут две акустические волны (i, ii). Первая из них — это волна сжатия CW⁺ (i); здесь стоит верхний индекс «плюс», потому что волна распространяется в направлении оси x; в работе мы используем ориентацию оси x в толщу золота, как на рис. 6. Волна CW⁺ (i) распространяется направо, в толщу золота. Другая волна сжатия CW⁻ (ii) бежит налево, к КГ. Волна CW⁻ (ii) отражается от КГ в виде волны разрежения в золоте, RF^+ (iii), и проходит в воду в виде УВ в воде, SW (iv). Существование волны CW⁻ (ii) ограничено временным промежутком порядка t_s. По истечении этого промежутка волна CW⁻ (ii) полностью трансформируется: (ii) \rightarrow (iii), (ii) \rightarrow (iv). Волны (i), (iii) и (iv) существуют неограниченно долго.

При $d_T = \infty$ давление p на первой (головной) характеристике волны RF⁺ (iii) держится постоянным, равным давлению p_0 в однородной толще золота. При конечном значении d_T давление p на этой характеристике за время порядка t_s снижается. В линейной акустике и при пренебрежении 2*T*-стадией, на промежутке времени порядка t_s , происходит двукратное снижение этого давления по сравнению с ро. Дальнейшее снижение этого давления, теперь на больших по сравнению с t_s временах, зависит от степени нелинейности волны; в этом месте мы говорим о медленном снижени
иp при $t \gg t_s$ до значений меньше половины начального давления p_0 . Степень нелинейности характеризуется отношением p/B, где B = 1.8 Мбар — объемный модуль золота. В линейном пределе при плоском одномерном распространении давление на первой характеристике волны RF⁺

(iii) остается постоянным после двукратного снижения от p_0 до $p_0/2$.

При учете нелинейности волна сжатия CW^+ (i) со временем опрокидывается, образуя УВ в золоте [15]. После опрокидывания волна разрежения RF⁺ (iii) постепенно «садится» на фронт этой УВ, поскольку течение за УВ является дозвуковым. Волна сжатия CW^+ (i) на этой стадии вырождается в так называемую «треугольную» УВ. Звуковая дисперсия постепенно увеличивает длину треугольника, занятого волной CW^+ (i). Дело в том, что скорость звука за фронтом УВ возле УВ больше, чем на большем расстоянии от фронта УВ. Это так, поскольку на мгновенном профиле давление возле УВ больше. Амплитуда УВ в золоте убывает со временем вследствие звуковой дисперсии и растяжения слоя сжатия за УВ.

Излучение пары последовательных волн, CW⁺ (i) и RF⁺ (iii), из горячего слоя d_T , занятого энтропийной модой, описано в работах [27, 58]. Пара из волны высокого давления (i) и низкого давления (iii) хорошо видна на x, t-диаграммах [59,60]. Из x, t-диаграмм ясно, как на временах порядка t_s происходит пространственное разделение волн (i), (iii), с одной стороны, и «вмороженной» в вещество приконтактной энтропийной моды, с другой стороны. Быстрые моды (i), (iii) уходят в объем, а горячий слой остается у КГ. Нас интересуют приконтактные явления, поэтому далее опускаем обсуждение судьбы волн (i), (iii). Отметим только, что сам по себе вопрос о лазерной УВ и ее затухании интересен. Имеются важные проблемы, связанные с расщеплением УВ на упругую и пластическую волны (см. работу [60] и цитируемые в ней ссылки).

Важно то, что при $d_T < \infty$ при расширении в волну разрежения (iii) давление не просто монотонно снижается до внешнего давления, как в автомодельной ситуации. При расширении в вакуум давление на КГ равно нулю, а между КГ и головной характеристикой волны разрежения имеется участок отрицательных давлений, т.е. появляется немонотонность: вместо плавного изменения давления от максимального значения до нуля возникает минимум, в котором давление отрицательно. Причиной этого является то, что $d_T < \infty$, а значит, начальный (после нагрева) профиль высокого давления, созданный быстрым нагревом, ограничен по толщине. Поэтому скорость расширения $u \approx p/Z$ в вакуум снижается по мере уменьшения давления pвдоль профиля. Следовательно, материальные частицы, которые располагаются ближе к КГ, летят в сторону вакуума быстрее, чем частицы, которые находятся дальше от КГ. Таким образом, возникает растяжение конденсированного вещества, а вместе с ним градиент давления, в соответствии с которым давление возле КГ растет при приближении к КГ. Давление на КГ равно нулю, поэтому у КГ давление становится отрицательным [27, 58].

На мгновенном профиле давления (момент времени t) имеется минимум $|p_{min}(t)|$, в котором давление отрицательно. С течением времени точка минимума движется в глубь золота [27,58]. При этом значение $|p_{min}(t)|$ увеличивается от нуля до некоторого наибольшего значения $|p_{min}|_{max}$. После этого в линейном акустическом приближении величина $|p_{min}(t)|$ не меняется. В линейном приближении имеем $|p_{min}(t)| = p_0/2$. Здесь, как сказано выше, p_0 — максимальное давление на профиле давления $p_{min}|_{max}$ достигается в некоторый момент времени на акустическом масштабе времени t_s .

Описанный выше приконтактный градиент давления тормозит скорость расширения $u_{CB}(t)$. Поэтому скорость $u_{CB}(t)$ движения КГ в сторону вакуума снижается с течением времени. Процесс торможения КГ длится в течение времени порядка t_s , пока волна разрежения (iii) толщиной порядка d_T не покинет горячий слой d_T . Если за счет торможения скорость $u_{CB}(t)$ снизится до нуля, то сплошность конденсированной фазы сохранится, КГ остановится, а волны (i) и (iii) продолжат свое движение от КГ. Таково завершение процесса торможения, когда напряжение растяжения $|p_{min}|_{max}(F_{abs})$ меньше прочности конденсированной фазы.

С ростом поглощенной энергии F_{abs} величина $|p_{min}|_{max}(F_{abs})$ растет. Нуклеация кавитационных пузырьков начинается, когда напряжение $|p_{min}|_{max}(F_{abs})$ превысит прочность конденсированного вещества. Соответствующее значение F_{abs} называют порогом абляции, кавитации, или откола $F_{abs|abl}$. Порог абляции выше, чем порог плавления. Поэтому нуклеация идет в жидкости, соответственно говорится о кавитации. Сравнение фронтальной абляции и тыльного откола в случае пленок проведено в работах [15, 58]; фронтальной является облучаемая лазером поверхность пленки.

Нуклеация резко меняет связь между плотностью и давлением, однофазное уравнение состояния меняется на двухфазное паро-жидкостное уравнение состояния. Кроме того, с нуклеацией и резким падением растягивающего напряжения связано возникновение откольных импульсов, распространяющихся влево и вправо от слоя нуклеации [15,58]. В результате сильно изменяется профиль волны разрежения RF⁺ (iii), тогда как предшествующий этой волне профиль волны сжатия CW⁺ (i) остается без изменений. Изменение профиля RF⁺ (iii) заключается в том, что вместо ямы отрицательного давления, бегущей со скоростью звука по сплошной растянутой конденсированной фазе, появляется область малых (нулевых) напряжений, состоящая из конденсированных фрагментов и пара. При этом в фрагментированном слое прекращается резкое торможение скорости расширения и происходит переход в режим, который примерно соответствует полету вещества по инерции.

Наши оценки и расчеты в работах [61,62] указывают на то, что режимы около порога абляции в вакуум не представляют интереса для задачи о фрагментации на капли или конденсации в капли парожидкостного или парового лазерного выброса золота в воду: при $F \approx F_{abl}$ наночастиц практически нет [63, 64]. Задаче о формировании наночастиц золота в воде соответствуют энергии F_{abs} , которые в значительное число раз превышают порог абляции. В этой ситуации по температурам мы подходим к критической температуре, слой фрагментации оказывается обширным по толщине, в него вовлечена масса порядка массы в слое d_T (все это следует из расчетов, приведенных ниже). Тогда как при $F \approx F_{abl}$ масса фрагментов мала по сравнению с массой в слое d_T . Итак, в интересующих нас условиях значительная масса вещества слоя d_T , проходя волну разрежения RF⁺ (iii), летит по инерции.

С одной стороны, это связано с тем, что температуры велики и когезионная связь слаба на этом горячем фоне. С другой стороны это (полет по инерции) вызвано фрагментацией. Именно эта масса 5–I «аккрецирует» на границу 5 «атмосферы» 4 на приведенных выше рис. 2 и 3. Аккреция происходит при наличии воды, тормозящей свободный разлет и, таким образом, создающей атмосферу 4. Из-за торможения водой КГ и атмосфера движутся медленнее, чем фрагментированное вещество 5–I. Важно, что скорость звука в двухфазной области определяется упругостью пара и довольно мала. Поэтому эффективно аккрецирующий поток сверхзвуковой. На подлете к атмосфере жидкие элементы фрагментированного вещества «не знают» об атмосфере.

Отметим, что порог абляции несколько увеличивается при наличии воды. Это связано с повышением давления на контакте: $p_{CB} \approx 3-7$ ГПа (6), (11) вместо нуля в случае вакуума. Акустический импеданс воды мал по сравнению с импедансом золота, поэтому изменение порога абляции невелико.

4. УРАВНЕНИЯ ОДНОМЕРНОЙ ДВУХТЕМПЕРАТУРНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ

Рассматривается воздействие ультракороткого лазерного импульса на плоскую поверхность металла, погруженного в прозрачную жидкость. Свет проходит через жидкость и поглощается в скин-слое металла. Оптического пробоя жидкости нет, поскольку интенсивности умеренные и длительности импульса малы ($\tau_L = 0.1-1$ пс). Поглощенные энергии F_{abs} составляют 400–1000 мДж/см². Для определенности в данной работе исследуется случай пары золото – вода. Порог термомеханической абляции $F_{abs|abl|vac}$ при аналогичном воздействии на золото в газе или вакууме составляет примерно 100 мДж/см² [15, 27, 52].

В данном разделе для анализа ситуации, описанной на качественном уровне в предыдущих разделах, используется одномерный двухтемпературный (2T) гидродинамический код (2TГД), записанный по лагранжевой координате. Соответствующая система уравнений имеет вид

$$\rho(x_0, t) \frac{\partial x(x_0, t)}{\partial x_0} = \rho_0, \qquad (13)$$

$$\rho_0 \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial P(x_0, t)}{\partial x_0},\tag{14}$$

$$\frac{\partial x(x_0,t)}{\partial t} = u(x_0,t),\tag{15}$$

$$\rho_0 \frac{\partial (E_e/\rho)}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial x_0} - \dot{E}_{ei} + \frac{\rho_0}{\rho} Q - P_e \frac{\partial u}{\partial x_0}, \quad (16)$$

$$\dot{E}_{ei} = \frac{\rho_0}{\rho} \alpha (T_e - T_i), \quad q = -\frac{\rho \kappa}{\rho_0} \frac{\partial T_e}{\partial x_0}, \quad (17)$$

$$\rho_0 \frac{\partial (E_i/\rho)}{\partial t} = \dot{E}_{ei} - P_i \frac{\partial u}{\partial x_0},\tag{18}$$

$$Q = \frac{F_{abs}}{\sqrt{\pi} \tau_L \,\delta} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau_L^2}\right) \exp\left(-\frac{x}{\delta}\right) \theta(x). \tag{19}$$

Выше записаны закон сохранения массы (13), траектория $x(x_0, t)$ материальной частицы с лагранжевой координатой $x_0, x(x_0, t = -\infty) = x_0, \rho_0$ — начальная плотность. Закон сохранения импульса представлен уравнением (14), здесь $u(x_0, t)$ — скорость лагранжевой частицы. Кинематическое условие имеет вид (15). Закон сохранения энергии записан по отдельности для электронной и ионной подсистем. Баланс энергии в электронной подсистеме дается уравнением (16), см. работу [9]. Мощность обмена энергией

между электронной и ионной подсистемами в расчете на единицу объема и электронный тепловой поток даются формулами (17). Баланс энергии в ионной подсистеме описывается уравнением (18). Мощность нагрева на единицу объема за счет поглощения излучения лазерного импульса дается формулой (19), где δ — толщина скин-слоя, τ_L — длительность лазерного импульса. Формула (19) с функцией $\theta(x) = 1, x > 0, \theta(x) = 0, x < 0$ справедлива для ультракоротких импульсов умеренной интенсивности, когда можно пренебречь смещением КГ за время действия импульса. В начальный момент КГ находится в точке x = 0. Поглощающее вещество располагается справа, при x > 0.

Как известно, для решения системы уравнений необходимы данные, которые сквозным образом (от 2Т-до 1Т-состояний) описывают термодинамику системы (уравнение состояния), электронную теплопроводность к и электрон-ионный энергообмен (знания о коэффициенте α). В расчетах, приведенных ниже, используются современные сведения. Термодинамика, которая описывает и 27- и 17-состояния, опирается на приближенное представление свободной энергии золота в виде суммы свободных энергий ионной и электронной подсистем [65-67]. При этом ионная часть берется из широкодиапазонного уравнения состояния [46-48]. В 2ТГД-расчетах вода описывается с помощью аппроксимации (12). В 2ТГД-коде теплопроводностью воды пренебрегаем. Для МД-моделирования воды разработан эффективный межатомный потенциал, в котором молекулы воды представлены в виде точек. В МД-теплопроводность воды невелика, но конечна. Она связана с вибрационными движениями молекул.

Важную роль играет большая электронная теплопроводность золота. Она особенно велика на 2T-стадии. В $2T\Gamma$ Д-расчетах эта теплопроводность бралась согласно моделям работ [18, 19, 68–70]. Не менее важным параметром является величина α , характеризующая темп электрон-ионного теплообмена [18,69–71]. В приведенных ниже расчетах использовалась аппроксимация вида

$$\alpha(\rho, T_e) \left[\text{BT} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{M}^{-3} \right] = \left(\rho / \rho_0 \right)^{5/3} \times \left(0.2 + \frac{4.3}{K_{\alpha}} \frac{T_{\text{eV}}^{3.6}}{1 + T_{\text{eV}}^{3.5} + 0.9 T_{\text{eV}}^{4.1}} \right) \, 10^{17}.$$
(20)

Здесь электронная температура $T_{\rm eV}$ дана в электронвольтах. Параметр K_{α} определяет величину (20) при повышенных значениях T_e .

При малых T_e аппроксимация (20) начинается с экспериментального значения $0.2\cdot10^{17}~{\rm Bt\cdot K^{-1}\cdot m^{-3}}$

[3]. В работе [71] рассматривалась вариация параметра K_{α} в формуле (20) в пределах от 1 до 6. Значения K_{α} около 1 соответствуют зависимости $\alpha(\rho_0, T_e)$, близкой к приведенной в работе [72]. При $K_{\alpha} \approx 1$ функция (20) возрастает на порядок с ростом температуры T_e . При $K_{\alpha} \approx 4$ -6 рост $\alpha(\rho_0, T_e)$ с T_e выше 10 кК гораздо слабее (в 1.5–3 раза) по сравнению со значением α при комнатной температуре. Экспериментальные данные, приводимые в работе [73], по мнению ее автора, свидетельствуют в пользу малого роста параметра α с температурой T_e . При $K_{\alpha} \approx 1$ электрон-ионная релаксация в золоте идет быстрее, чем при $K_{\alpha} \approx 4$ -6. Ниже в расчетах рассмотрим вариант с $K_{\alpha} = 1.15$.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ ОДНОМЕРНОГО РАСЧЕТА ПРИ $F_{abs}=400~{ m MJm/cm}^2$

5.1. Ранняя стадия, 2Т-релаксация

Двухтемпературная (2T) релаксация, протекающая первые пикосекунды после субпикосекундного оптического воздействия на золото, такая же, как в случае с вакуумом. Сближение электронной $T_e(x,t)$ и ионной $T_i(x,t)$ температур показано на рис. 10. Сближение температур происходит одновременно с распространением тепла в толщу объемной мишени из золота. На временах около 10 пс продвижение зоны плавления все еще сверхзвуковое — за промежуток времени от 2 до 15 пс зона плавления «m» смещается от $x \approx 60$ нм до $x \approx 160$ нм (ср. рис. 10 и 11), тогда как головная характеристика волны разрежения на момент 15 пс находится на расстоянии 60 нм от начального положения КГ. На 27-стадии скорость звука несколько повышается по сравнению со значением около 3 км/с из-за дополнительной упругости, связанной с электронным давлением. Зона плавления «m» на рис. 10 и 11 состоит из смеси твердой и жидкой фаз. Картины плавления в гидродинамике и молекулярной динамике сопоставлены в работе [74] (см. также [60]). Там показано, что по интегральным параметрам (профиль температуры, доля жидкой фазы) эти картины согласуются. Ниже будут приведены данные МД-моделирования абляции золота в воду. Отметим, что плавление на ранней стадии происходит под давлением волны сжатия. Поэтому температура в зоне плавления выше температуры тройной точки [60].

Резкий обрыв температур на рис. 10 и 11 и плотности на рис. 11 происходят на КГ между золотом и водой. Как говорилось выше, в 2*T*ГД-расчете небольшой теплопроводностью воды будем прене-



Рис. 10. Кинетика электрон-ионной релаксации. Ранняя стадия расширения золота, нагретого лазерным импульсом. Здесь и на следующем рисунке поглощенная энергия $F_{abs} = 400 \text{ мДж/см}^2$, длительность импульса $\tau_L = 0.1 \text{ пс.}$ Время отсчитывается от максимума интенсивности импульса в виде функции Гаусса по времени (19); скобкой «m» отмечено положение зоны плавления на момент 2 пс



Рис. 11. Профили электронной T_e и ионной T_i температур на фактически «однотемпературной» (1T) стадии t = 15 пс. Тем не менее имеется заметная разница между локальными значениями температур (см. пояснения в тексте)

брегать. Теплопроводность воды на тепловых квазиосцилляциях молекул автоматически учитывается в МД-коде.

Большая разница между T_e и T_i (десятки килокельвинов), существовавшая на первых пикосекундах (ср. профили на рис. 10, относящиеся к 2 пс), нивелируется к 5–10 пс. К этому времени тепловая энергия, перешедшая в ионы, в разы превосходит



Рис. 12. Профили плотности и полного давления, которое входит в уравнение (14). Показаны УВ в воде и слой ударно-сжатой воды (SW); контакт вода – золото (CB); атмосфера (atm) из золота, «нагребаемого» на тормозящую воду. Атмосфере соответствует цифра 4 на рис. 2. Волна разрежения находится левее максимума давления, а волна сжатия — правее

тепловую энергию, оставшуюся в электронах. Тем не менее даже на 15-20 пс остается заметная разница между локальными значениями температур T_e и T_i (см. рис. 11). На участке волны разрежения (слева от максимума плотности на рис. 11) эта разность связана с сильнейшим гидродинамическим растяжением потока золота, втекающего в высокоамплитудную волну разрежения. В этой волне плотность падает до значений, близких к критической плотности золота (5.3 г/см³, см. подпись к рис. 4). Растяжение является причиной расхода внутренней энергии на работу расширения. О влиянии потока расширения на разность температур можно говорить на стадии $t < t_s \approx 50$ пс. На стадии $t > t_s$ волна разрежения постепенно покидает слой прогрева d_T . Вне этого слоя температуры T_e и T_i малы.

Кроме зоны волны разрежения разница температур T_e и T_i на рис. 11 заметна в области плавления. Это связано с расходами энергии на плавление.

5.2. Формирование атмосферы из-за торможения водой и увеличение массы и импульса атмосферы за счет аккреции

Суть динамической картины расширения золота в воду поясняют рис. 12–14. На них мы видим игру акустических волн и торможение КГ. Как и при разлете в вакуум имеются волна разрежения и волна сжатия (см. разд. 3). Они разделены головной характеристикой волны разрежения, которая находится в высоком (есть еще максимум p на фронте УВ) максимуме давления. Мгновенное положение максимума давления примерно совпадает с невысоким (сжатия по плотности невелики) максимумом плотности. Максимум плотности находится немного правее максимума p из-за убывания температуры в толщу золота.

Торможение КГ имеется и при разлете в вакуум. Следовательно, согласно принципу эквивалентности инертной и гравитационной масс, имеется эффективное поле гравитации, вектор свободного падения которого направлен от плотной среды к среде малой плотности. Это означает, что есть фактор неустойчивости КГ по Рэлею – Тейлору [39, 41, 42, 50, 51].

Если среда твердая, то развитию неустойчивости Рэлея – Тейлора (НРТ) препятствует прочность (см. Приложение А). Если среда жидкая, то оценки показывают, что длина мод λ_{RT} , которые могут вырасти за относительно короткое время действия торможения (меньше или порядка t_s), мала по сравнению с толщиной d_T слоя прогрева: $\lambda_{RT} \ll d_T$. Это оценка без учета поверхностного натяжения σ и кинематической вязкости ν . При учете σ и ν появляется минимальный масштаб λ_{stab} , который в наших условиях с фемтосекундным импульсом сопоставим с толщиной d_T . Таким образом, НРТ можно не учитывать при разлете в вакуум (см. Приложение А). Действительно, с одной стороны, $\lambda_{RT} \ll d_T$, тогда как с другой стороны, $\lambda_{RT} > \lambda_{stab} \sim d_T$.

В случае с вакуумом замедление g(t) действует до момента отрыва откольной пластины. При расширении золота в воду стадия торможения более продолжительная; она не ограничена временным интервалом порядка $t_{nucl}; t_{nucl} \sim t_s$ вблизи порога нуклеации $F_{abs|nucl}$ и t_{nucl} уменьшается до нуля, если поглощенная энергия F_{abs} в разы превосходит порог нуклеации. Прочность золота мала в условиях сильного нагрева. Нагрев сильный, если энергия F_{abs} в разы превосходит порог $F_{abs|nucl}$; в интересующей нас постановке это так. Соответственно малым или нулевым становится поверхностное натяжение σ , поскольку по температуре мы приближаемся или превосходим температуру в критической точке при высоких энергиях Fabs. Заметное замедление развития НРТ связано с вязкостью ν (см. Приложение В про вязкость в наших условиях). Ниже мы исследуем этот вопрос. А сейчас вернемся к анализу одномерной динамики.

Расширение быстро нагретого золота создает УВ в воде, отмеченную цифрой 2 на рис. 13, 14. Из-за распада разрыва золото-вода с высоким давлением



Рис. 13. Такая же структура, как на рис. 12, но на момент времени t = 20 пс. Составляющие структуры обозначены цифрами, смысл которых разъяснен на рис. 2. Уменьшение плотности и давления между границами 1 и 5 атмосферы вызвано эффективной гравитацией g (см. рис. 3). Осцилляции плотности внути волны разрежения соответ-

ствуют начальной стадии нуклеации



Рис. 14. Скачкообразное падение Δu скорости расширения на «верхней» (по отношению к вектору ускорения свободного падения g на рис. 3) границе 5 атмосферы 4 (цифры пояснены на рис. 2). Торможение высокоплотной (см. рис. 12, 13) атмосферы 1–4–5 из золота обеспечивает резкое падение давления на атмосферном слое

в золоте (начальным давлением в воде пренебрегаем) в воду бежит УВ, а в золото — волна разрежения. Между УВ и КГ находится слой ударно-сжатой воды (SW на рис. 12). Торможение КГ становится заметным по мере увеличения толщины слоя золота, охваченного волной разрежения, по отношению к

толщине d_T . Вследствие замедления КГ появляется

градиент давления: давление снижается от значения

на фронте УВ к значению p_{CB} на КГ. Замедляющаяся КГ генерирует затухающую УВ. С течением времени давление на УВ, степень сжатия в УВ и скорости УВ и воды за УВ монотонно снижаются.

Давление на контакте p_{CB} положительно и постепенно уменьшается со временем. Мгновенная зависимость давления от координаты непрерывна на КГ. Из-за безотрывного прилегания воды и золота на КГ величина замедления g скорости движения КГ одинакова в окрестности КГ для воды и золота. Поэтому в силу резкого скачка плотности на КГ (см. рис. 12, 13) имеет место скачок градиента давления на КГ. Отношение градиентов $dp/dx = -\rho|g|$ равно отношению плотностей на КГ. Таким образом, происходит резкое падение давления в атмосфере-оболочке (1–4–5) на рис. 12–14. На верхней границе атмосферы 5 давление поддерживается за счет давления в хвосте волны разрежения и за счет импульса, втекающего из этой волны в атмосферу.

В силу замедления КГ, вещество в хвосте волны разрежения движется быстрее, чем КГ и атмосфера. С этим и со сверхзвуковым характером движения вещества в хвосте волны разрежения связано появление скачка скорости Δu на верхней границе 5 атмосферы 4 (см. рис. 14).

Давление в воде намного ниже давления в волне сжатия, бегущей на рис. 12–14 направо в толщу золота. Это обусловлено большой разностью в акустических импедансах воды и золота Z_{Au} ; в нормальных условиях $Z_{Au}/Z_{wt} = 40$. В разд. 2 приведены оценки (6), (11) давления в воде. Они согласуются со значениями на рис. 12–14. Влияние воды на волну разрежения в золоте ограничено атмосферой. За границей 5 атмосферы золото «не знает» о воде. Из-за малости импеданса воды атмосфера получается тонкой, ее толщина намного меньше толщины d_T слоя прогрева на ранней и средней стадиях распирения.

Постепенно в атмосфере собирается часть порядка единицы от фрагментированного слоя прогрева. Соответственно толщина атмосферы становится сопоставима с d_T . Это происходит на поздних стадиях торможения. При этом толщина атмосферы существенно меньше пройденного ею при торможении пути.

5.3. Нуклеация и средняя стадия торможения контакта

Начало нуклеации видно на рис. 13 — зубчатый участок в конце волны разрежения на профиле плотности. Нуклеация начинается сначала в хвосте



Рис. 15. Формирование обширной зоны нуклеации F (зубчатый участок профиля ρ) при превышении порога нуклеации по F_{abs} в несколько раз (примерно в 4 раза). Постепенно участок F двухфазной смеси трансформируется в пену золота. В пене объемная доля жидкой фазы мала. Расчет с $\tau_L = 100$ фс, $F_{abs} = 400$ мДж/см², рассматриваемый в разд. 5

волны разрежения, но на некотором конечном расстоянии от тонкой атмосферы. Затем, по мере продвижения волны разрежения, слой нуклеации расширяется (ср. профили плотности на рис. 13 и 15). Толщина слоя нуклеации на момент 70 пс составляет 150 нм (см. рис. 16). Далее по времени происходит существенное расширение двухфазного слоя жидкость-пар. Это связано с полетом по инерции вещества двухфазного слоя и наличием градиента скорости $\partial u/\partial x$ в этом слое. Ниже мы сравним $2T\Gamma Д$ -результаты с МД-моделированием и сделаем выводы относительно трехмерной структуры области жидкость-пар.

Золото в слое нуклеации сильно нагрето, см. рис. 16. Температура в нем поднимается от 3 до 7 кК. При таких температурах прочность снижается до малых значений. Поэтому перед началом нуклеации в расплаве не возникает существенных отрицательных давлений. Отрицательные давления появляются по мере снижения локальной температуры из-за постепенного выхода волны разрежения из слоя нагрева толщиной d_T . На рис. 16 минимум p < 0 находится на глубине 112 нм. На этой глубине температура снижается до 3 кК.

В результате нуклеации формируется двухфазная смесь пар-жидкость. Давление в смеси низкое, если сравнивать его с давлением в волне сжатия в золоте (см. рис. 15 и 16). Двухфазное давление



Рис. 16. Справа от контакта 1 находятся атмосфера и зона нуклеации, взятые с рис. 15. Атмосфера нагрета до температуры, примерно равной критической температуре (см. рис. 4)

определяется давлением насыщенного пара в горячей части смеси, прилегающей к атмосфере. Согласно рис. 4, давление пара золота порядка 0.1 ГПа при T = 6 кК. На рис. 16 в более холодной части двухфазного слоя сохраняются небольшие отрицательные значения p из-за слабого сопротивления пены растяжению за счет поверхностного натяжения [22,25]. Слой пар – жидкость расширяется в режиме, близком к режиму разлета пыли: давление, градиенты давления и скорость звука в этом слое малы. Соответственно разлет происходит с сохранением распределения скорости по лагранжевой координате — значение скорости «вморожено» в лагранжеву частицу.

Как говорилось, вследствие торможения водой атмосфера движется медленнее, чем двухфазное вещество вблизи атмосферы. Скорость звука в смеси мала, поэтому поток смеси, натекающий на атмосферу, является сверхзвуковым, т. е. скорость звука в смеси меньше разности скоростей Δu на рис. 17. Следовательно, двухфазное вещество «не знает» о том, что ему предстоит столкнуться с атмосферой. Таким образом, верхней границей 5 атмосферы (см. рис. 2, 3, 12–14) является УВ, отделяющая атмосферу от аккрецирующего на нее потока. Структура профилей давления и скорости внутри этой УВ показана на рис. 17 и 18. Толщина атмосферы в момент времени t = 70 пс составляет 15–20 нм. Примерно такова же размытость УВ.

Разность давлений между контактом 1 на рис. 18 и давлением в набегающей смеси составляет примерно 1.8 ГПа. Ниже по траектории КГ мы определим





Рис. 17. Резкое уменьшение скорости разлета при столкновении вещества смеси пар-расплав с верхней границей атмосферы: $\Delta u = 150$ м/с (ср. с рис. 14, где это снижение скорости составляло 240 м/с)



Рис. 18. Структура атмосферы и УВ, которая формирует верхнюю границу атмосферы. Вертикальная метка 1 отмечает мгновенную позицию КГ

скорость и замедление g(t) КГ. В момент t=70пс имеем $g\approx 4.3\cdot 10^{14}~{\rm cm/c^2}.$ Вес атмосферы дает разницу давлений

$$\Delta p_{atm} = \rho g h$$

между границами 1 и 5 атмосферы 4 (см. рис. 2, 13). Подставляя плотность $\rho \approx 10 \text{ г/см}^3$ и толщину атмосферы h = 15–20 нм, находим $\Delta p \approx 1 \text{ ГПа.}$

Оценим приращение давления в УВ на границе 5 атмосферы 4. Запишем закон сохранения массы

$$\Delta u + D = CD$$

здесь Δu — скорость втекающей смеси в системе координат, связанной с атмосферой, D — скорость УВ в этой же системе координат, $C = \rho_2/\rho_1$ — степень сжатия в УВ, ρ_2 и ρ_1 — плотности вещества в атмосфере на ее верхней границе 5 и в смеси перед УВ. Закон сохранения импульса дает

$$\Delta p_{SW} = \rho_1 \Delta u (\Delta u + D),$$

где Δp_{SW} — изменение давления в УВ. Подставляя $\Delta u = 150$ м/с (см. рис. 17), $C \approx 2$, находим $\Delta p_{SW} \approx 0.2$ ГПа. Правда, сумма $\Delta p_{atm} + \Delta p_{SW} \approx 1.2$ ГПа получается меньше, чем 1.8 ГПа. Это связано с погрешностью оценки. Видим, что в основном разность давлений перед и под атмосферой связана с весом атмосферы.

В рассмотренной УВ происходит захлопывание полостей, и, переходя в атмосферу, двухфазная смесь пар – расплав возвращается в однофазное жидкое состояние. На рис. 18 давление в этом состоянии выше критического давления золота.

Постепенно в результате расширения объемная доля жидкой фазы в смеси снижается. Происходит трансформация из состояния жидкость с пузырьками в состояние пены, а потом, после разрыва мембран и нитей в пене, образуется смесь в виде капель в паре [22, 29]. Поверхность II на рис. 2 разделяет область пены 5-II и область капельной смеси. Область двухфазной смеси, как говорилось, приближенно можно описать как область, находящуюся в режиме полета по инерции. Все же из-за слабого взаимодействия, связанного с поверхностным натяжением мембран и нитей, происходит медленное изменение скоростей лагранжевых частиц в смеси [22,29]. Через это взаимодействие часть пены механически связана с атмосферой, а другая часть — с дном формирующегося кратера. В результате нуль скорости, ориентированной по направлению x основного движения, оказывается внутри смеси.

Атмосфера плавно тормозится и в конце концов останавливается. Пена области 5–II и капельное содержимое II–I присоединяются к слою атмосферы на этих временах. Пена слоя от границы I до дна кратера остается на мишени. Точка I внутри вспененного слоя показана на рис. 16. Нуль скорости пены связан с границей I на рис. 2.

На больших временах УВ в воде ослабляется, скорость ее распространения снижается до скорости звука в воде 1.5 км/с. Отметим, что на отрезке времен 0 < t < 70 пс средняя скорость УВ в воде 4 км/с, среднее число Маха 2.7. Скорость КГ уменьшается до значений 1–10 м/с на временах порядка долей микросекунды. Описываемый в данном разд. 5 расчет с $F_{abs} = 400$ мДж/см² доведен до времен 200 нс.



Рис. 19. Исключение из расчета пассивной части пены и толщи золота для экономии численных ресурсов. Внизу профиль плотности до исключения, вверху — после. Сокращение расчетного отрезка практически не сказывается на движении атмосферы и УВ в воде

На момент t = 200 нс КГ смещается на 2.8 мкм, а УВ в воде уходит на расстояние 340 мкм.

Для снижения объема вычислений на столь больших масштабах и временах мы, начиная с момента t = 70 пс, отбрасываем часть золота, относящуюся к веществу правее границы I на рис. 15, 16. В точке разрезания расчета ставится непроницаемая неподвижная стенка, которая удерживает пар внутри полости между атмосферой и дном кратера. Отбрасывание вещества правее стенки I на рис. 15, 16 практически никак динамически не сказывается на движении атмосферы и прилегающей к атмосфере двухфазной смеси. Аналогично мы поступаем при МД-моделировании, представленном ниже.

Благодаря разрезанию цепочки лагранжевых ячеек в точке I, мы отказываемся от слежения за волной сжатия, уходящей далеко в толщу золота (см. рис. 15). Вскоре после момента, показанного на рис. 15, волна сжатия опрокидывается. За короткое время образуется треугольная УВ в золоте, на фронте которой «сидит» волна разрежения. Итак, пара волн, состоящая из волны разрежения и волны сжатия, на рис. 12–15 вырождается в пару, состоящую из волны разрежения и УВ [15, 60]. Звуковая дисперсия растягивает веер характеристик волны разрежения, покрывающий слой ударно-сжатого золота, а сама эта волна плавно снижает амплитуду УВ.



Рис. 20. Средняя стадия распространения и затухания УВ (метка 2) в воде. Затухание вызвано постепенным замедлением «поршня», толкающего УВ. Поршнем является КГ (метка 1) между золотом и водой

На рис. 19 представлены профили плотности в момент 70 пс до обрезания правой части расчетного отрезка и после обрезания в момент 80 пс. Проверки показывают, что отсутствие или наличие правой части очень слабо сказывается на динамике левой части, т.е. на динамике УВ в воде, динамике КГ, атмосферы и пены, прилегающей к атмосфере.

5.4. Поздние стадии торможения контакта

На рис. 20 показано, как ослабляется УВ в воде в начале субнаносекундного интервала времени. Одновременно происходит уширение атмосферы за счет, во-первых, снижения темпа замедления д КГ и, во-вторых, за счет аккумуляции массы из двухфазной смеси. На интервале 70-250 пс, представленном на рис. 20, УВ (метка 2) снижает свою скорость с 3.55 до 3.0 км/с; замедление КГ уменьшается с $43 \cdot 10^{13}$ до $8.8 \cdot 10^{13}$ см/с²; скорость КГ убывает с 750 до 410 м/с; средняя плотность золота в атмосфере повышается с 10.2 до 11.7 г/см³. Уплотнение атмосферы вызвано снижением давления на КГ и уменьшением температуры атмосферы с 7.60 до 6.44 кК. Охлаждение атмосферы в 2ТГД-расчете связано с присоединением к атмосфере холодной пены вследствие аккреции пены на атмосферу (напоминаем, что в 2ТГД-расчете теплопроводностью воды пренебрегаем). В МД-расчетах учитывается и теплопроводность пены (теплоотвод по мембранам и нитям), и вибрационная теплопроводность по молекулам воды.



Рис. 21. Эволюция профиля плотности от состояния атмосфера плюс вспененная смесь к состоянию с исчерпанным запасом смеси

Изменение распределения плотности на интервале 0.25 нс < t < 1 нс проиллюстрировано на рис. 21. Координата УВ в воде возрастает с 870 до 2850 нм на этом интервале. Скорость УВ падает до 2.5 км/с; сжатие воды в УВ при t = 1 нс составляет 20%. УВ находится сильно левее профиля плотности на рис. 21; толщина атмосферы h(t = 1 нс) = 65 нм. Поэтому УВ не показана на этом рисунке. Отметим, что толщина атмосферы увеличилась в 2–3 раза за промежуток времени от 70 пс до 1 нс (ср. рис. 21 и рис. 17–19). На интервале 0.25 нс < t < 1 нс аккреция двухфазной смеси в атмосферу постепенно прекращается, поскольку большая часть смеси успевает высадиться в атмосферу.

Давления на УВ и КГ составляют $p_{SW}(t = 1 \text{ hc}) = 1.1 \Gamma \Pi a$ и $p_{CB}(t = 1 \text{ hc}) =$ $= 0.22 \Gamma \Pi a = 2200 \text{ бар, т.е. давление на далеко}$ отошедшей УВ становится намного больше, чем давление на контакте. Температура T(t = 1 hc) = = 5.93 кK выравнивается по толщине атмосферы. Давление насыщенных паров золота при этой температуре равно 750 бар (см. рис. 4).

Профили давления в воде на поздней стадии распирения КГ представлены на рис. 22 и 23. УВ ушла далеко, поэтому участок с золотом в этом масштабе виден как слабый всплеск справа от нуля. Этот всплеск медленно (по сравнению со скоростью УВ) смещается влево. Профили течения, показанные на рис. 23, не являются автомодельными. В относительных координатах слой крутого снижения давления за УВ становится все тоньше и тоньше по сравнению с расстоянием, которое пробежала УВ.



Рис. 22. Снижение давления в УВ по мере ее 1D-распространения. Обычно диаметр пятна нагрева составляет сотни микрометров, поэтому 1D-приближение все еще применимо



Рис. 23. Изменение профиля давления со временем в координатах, нормированных на текущую позицию и амплитуду УВ

По рис. 23 и 24 видим, что со временем давление на КГ падает быстрее, чем давление на УВ.

Сравнение хода давления со временем на УВ и на КГ показано на рис. 24. После $t \approx 100$ пс УВ в воде затухает приблизительно по закону $p_{SW}(t) \propto t^{-1/2}$ (см. § 102 в [75]). Это связано с звуковой дисперсией, которая растягивает волну разрежения, «сидящую» на УВ в воде. Здесь речь идет о приблизительно треугольной части спада давления и скорости за УВ (см. рис. 22 и 23). Давление и скорость воды за УВ приблизительно пропорциональны друг другу в слабонелинейной УВ. Поэтому скорость за фронтом УВ также затухает как $t^{-1/2}$. Выход на закон $t^{-1/2}$ озна-



Рис. 24. Зависимости от времени давления на УВ в воде (кривая p_{SW}) и нескольких параметров на КГ: давления (кривая p_{CB}), температуры (кривая T_{CB}) и давления насыщенного пара золота при данной температуре (кривая — $p_{vap}(T_{CB})$)

чает, что подталкивание УВ поршнем (т. е. КГ) уже не играет существенной роли.

На субнаносекундном интервале времен давления p_{SW} и p_{CB} сопоставимы. Затем давление на КГ начинает резко снижаться. Это связано с торможением КГ (см. разд. 5.5). Ситуация меняется, когда снижающееся внешнее давление (давление воды) на КГ опускается до давления насыщенного пара золота при температуре слоя золота, см. рис. 24 — сближение кривых P_{CB} и P_{vap} . Последняя кривая рассчитана при температуре (кривая T_{CB}) с помощью аппроксимации, приведенной в подписи к рис. 4. Далее по времени (после достижения p_{vap}) испарение (при наличии ограничения водой объема пара золота) поддерживает давление на КГ на уровне давления насыщенного пара. В результате темп снижения давления на КГ замедляется (см. рис. 24).

5.5. Степень неустойчивости контакта

На рис. 25 и 26 приведены временные зависимости соответственно координат и скоростей за УВ и на КГ. Скорость УВ снижается до скорости звука в воде 1.5 км/с при уменьшении давления УВ существенно ниже объемного модуля воды 2.3 ГПа (см. рис. 24). Расширение УВ на рис. 25 прослежено примерно до 400 мкм. Далее в экспериментах с диаметром пятна $2R_L$ в сотни микрометров происходит трансформация УВ из одномерной плоской (зависимость параметров от x) в сферическую УВ с зависимостью параметров от радиуса r, отсчитываемого от центра пятна лазерного нагре-



Рис. 25. Смещение КГ (кривая CB) и УВ (кривая SW) в зависимости от времени. Первые несколько десятков пикосекунд скорость КГ велика и смещения КГ и УВ сопоставимы. Но затем КГ сильно отстает, поскольку скорость КГ быстро снижается, а скорость УВ не может быть меньше скорости звука. На момент 200 нс эти смещения разнятся на два порядка. Отметим некоторое уменьшение темпа замедления из-за смены закона убывания давления с вы-

ходом на давление насыщенного пара (ср. с рис. 24)



Рис. 26. Текущая скорость воды u_{SW} за фронтом УВ (кривая u_{SW}). По мере ослабления УВ эта скорость уменьшается примерно пропорционально давлению на фронте УВ (см. рис. 24): $u_{SW} \approx p_{SW}/Z_{wt}$, Z_{wt} — акустический импеданс воды. Кривая u_{CB} представляет данные $2T\Gamma$ Драсчета, $F_{abs} = 400$ мДж/см². Кривая Fit — аналитическая аппроксимация (см. текст)

ва. На момент t = 200 нс отношение масс воды за УВ и оторвавшегося слоя золота очень велико: $x_{SW}/h \approx 350 \cdot 10^3/50 = 7000.$

Смещение L КГ составляет около 3 мкм на момент 200 нс на рис. 25. К этому моменту скорость КГ снижается до единиц м/с (см. рис. 24), т.е. слой



Рис. 27. Замедление КГ. Оно складывается в результате торможения водой и ускорения аккреционным потоком вещества в двухфазном состоянии (см. рис. 2, 3 и 17). Функция g(t) получена дифференцированием аналитической аппроксимации скорости (21). Отметим, что ускорения атомов золота под действием межатомного взаимодействия зависят от температуры. В случае рассматриваемого здесь горячего расплава они порядка 10^{18} см/с²

близок к остановке своего движения. Получается, что в одномерной постановке слой золота (атмосфера) толщиной h = 50-100 нм проходит до остановки путь L в 60–30 своих толщин. Поскольку КГ очень быстро набирает скорость и далее долго тормозится, имеем

$$L = \int dt \int dt \, g(t) \sim \bar{g}t^2/2,$$

где \bar{g} — среднее замедление, а интегрирование ведется назад от момента остановки.

Рэлей-тейлоровское перемешивание на границе двух сред, сильно различающихся по плотности (золото – вода), идет по закону $h_+ = \alpha_+ g t^2$ (см. Приложение A). Здесь h_+ — путь, пройденный пузырями воды в толщу атмосферы золота от начального положения поверхности КГ. Слой золота толщиной h_+ фрагментирован на струи и капли. Остаток атмосферы $h - h_+$ на момент t еще сохраняет свою сплошность и выдерживает перепад давления между своей внутренней границей и текущей границей h_+ проникновения пузырей. Внутренней является граница атмосферы и двухфазной смеси (см. рис. 3).

Атмосфера полностью перемешивается с водой, когда величина h_+ становится порядка толщины атмосферы, $h_+ \approx h$. Отсюда следует оценка пути L_{max} , пройденного атмосферой до полного перемешивания: $2\alpha_+ L_{max} \approx h$, или $L_{max} \approx h/2\alpha_+$. Поскольку $\alpha_+ = 0.03-0.05$ (см. Приложение A), имеем $L_{max} \approx (10-15)h$, т.е. до своего распада атмосфера может пройти путь в 10–15 своих толщин. Поскольку одномерный расчет указывает на торможение атмосферы после прохождения 30–60 толщин, вопрос о неустойчивости Рэлея – Тейлора (НРТ) является актуальным и требует своего анализа; слой может перемешаться до того, как произойдет его остановка согласно одномерному моделированию кодом 2*T*ГД. Дадим сначала полуаналитический анализ линейного развития НРТ на фоне течения, представленного на рис. 25–27. Затем выполним полный анализ (без линейного приближения) с помощью МД-моделирования.

На рис. 26 показана аналитическая аппроксимация скорости КГ (кривая Fit). Она имеет компактный вид

$$u_{CB} = 4.0554 \exp[-0.631255(t_{ps} - 1.10875)^{0.23302}], \quad (21)$$

где u_{CB} — скорость КГ в км/с, t_{ps} — время в пикосекундах, отсчитанное от максимума лазерного импульса.

Инкремент НРТ в вязкой жидкости с учетом поверхностного натяжения (но без учета конечной толщины атмосферы) имеет вид [51]

$$\gamma = \sqrt{(2k^2\nu)^2 + gk\operatorname{At} - k^3\sigma/(\rho_{\mathrm{Au}} + \rho_{wt})} - 2k^2\nu. \quad (22)$$

В выражении (22) члены $gkAt, k^3\sigma/(...)$ и $k^2\nu$ связаны соответственно с плавучестью, капиллярностью и вязкостью. Отношение плотностей $\rho_{Au}/\rho_{wt} \approx 10$, поэтому число Атвуда (см. Приложение A) равно At ≈ 0.8 . Волновое число равно $k = 2\pi/\lambda$. Для волн $\lambda < h$ атмосферу можно считать толстой: kh > > 6 > 1.

Поверхностное натяжение будем аппроксимировать выражением

$$\sigma(T) = \sigma_0 \left(\frac{1 - T/T_{cr}}{1 - T_m/T_{cr}} \right)^{1.25}.$$
 (23)

Здесь использованы следующие величины: $\sigma_0 = 1150 \text{ дин/см}$; критическая температура, см. рис. 4, $T_{cr} = 7.8 \text{ кK}$, температура плавления золота $T_m = 1.338 \text{ кK}$, поверхностное натяжение расплава золота в точке плавления взято из [76]. При околокритических температурах имеем $\sigma = 155$, 84, 25 дин/см при T = 6.5, 7.0, 7.5 кК. Про МД-расчеты σ см. работу [77]. Формула (23) заимствована из работы [78] (см. также рис. 15 в [79]).

В выражении (22) за кинематическую вязкость ν будем принимать вязкость золота (см. Приложение В).



Рис. 28. Инкремент НРТ (22). Амплитуда растет на интервале времен $0 < t < t_*$. При t_* мода стабилизируется поверхностным натяжением (см. текст). Параметры $\sigma = 100$ дин/см, $\nu = 0.002$ см²/с

Как видно из формулы (22), вязкость замедляет рост НРТ, но стабилизировать КГ не может. При любой вязкости стабилизация определяется поверхностным натяжением. Неустойчивой КГ становится при длинах мод, превышающих капиллярный масштаб

$$k_{\sigma} = \sqrt{\frac{\operatorname{At} g(\rho_{\operatorname{Au}} + \rho_{wt})}{\sigma}}, \quad \lambda_{\sigma} \ [\operatorname{HM}] = \frac{21}{\sqrt{g_{14}}}$$

При оценке принято $\sigma = 100$ дин/см, At = 0.8, $\rho_{Au} = 10 \text{ г/см}^3$, $\rho_{wt} = 1 \text{ г/см}^3$, $g = 10^{14}g_{14} \text{ см/c}^2$ (см. также Приложение A). Видим, что при фиксированных поверхностном натяжении и плотностях масштаб $\lambda_{\sigma}(g)$ растет по мере убывания темпа замедления g(t) со временем (см. рис. 27). Таким образом, если фиксировать длину волны λ , то рост возмущения на этой длине продолжается на конечном интервале времен до момента t_* , в который величина $g(t_*)$ уменьшится до значения $g = 10^{14}(21 \text{ нм}/\lambda)^2$, см. рис. 28–30, т.е. рост мод большего масштаба продолжается дольше; правда, инкремент их роста меньше.

На рис. 28–30 показано, как развивается НРТ в рамках линейной теории. Значения параметров были следующими: $\sigma = 100$ дин/см; $\nu = 0.002$ см²/с (см. Приложение В); $\rho_{Au} = 10$ г/см³, $\rho_{wt} = 1$ г/см³; замедление находилось по формуле $g = du_{CB}/dt$, где $u_{CB}(t)$ дается формулой (21). На рис. 28 представлена зависимость инкремента неустойчивости γ от времени согласно формуле (22). На рис. 29 показано, как со временем t накапливается величина



Рис. 29. Рост числа $\int^t \gamma(t') dt'$ со временем. Здесь это число названо логарифмическим накоплением



Рис. 30. Усиление амплитуды возмущения $a(t) = a(t_0) \exp\left(\int^t \gamma(t') dt'\right)$ в десятки и сотни раз при типичных параметрах задачи

 $\int^{t} dt' \gamma(t')$. На рис. 30 проиллюстрировано, как происходит экспоненциальное усиление амплитуды линейного возмущения в квазиклассическом приближении $a(t)/a(t_0) = \exp(\int^{t} \gamma(t') dt')$. Видим, что усиление значительное — выше на полтора-два порядка. Перейдет ли возмущение на нелинейную стадию, зависит от спектра амплитуд начальных возмущений $a(t_0, \lambda)$. Возмущения $a(t_0, \lambda)$ связаны с начальной шероховатостью мишени, тепловыми флуктуациями и бомбардировкой внешней границы атмосферы «продуктами нуклеации», т.е. жидкими фрагментами двухфазной смеси (см. рис. 3). Необходимо МД-моделирование, чтобы понять, как развивается ситуация возле КГ золото – вода.

6. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Были проведены серии МД-расчетов. Они отличались друг от друга шириной и длиной расчетного параллелепипеда $L_x \times L_y \times L_z$ и начальными данными (поглощенная энергия F_{abs}). Как и выше, ось xбыла вдоль направления основного движения. Прямой расчет абляции золота в воду требует огромных численных ресурсов. Даже если мы хотим ограничиться временами порядка 3 нс (а не 200 нс, как в разд. 5), толщина ударно-сжатого слоя воды составит около 10 мкм; примерно на такую же глубину уходит волна сжатия в толщу золота за 3 нс. Поперечный размер должен быть не меньше нескольких толщин атмосферы, т. е. $L_y = L_z > 100$ нм. В таком объеме содержится больше 10 миллиардов атомов, причем число шагов интегрирования до 3 нс с шагом порядка 1 фс составляет три миллиона.

Поэтому вместо прямого расчета была разработана схема с эквивалентным по физике подходом, но с гораздо меньшими требованиями к ресурсам, а именно, атомов на два порядка меньше. Во-первых, мы пожертвовали гидродинамической трехмерностью. Толщина L_z расчетного параллелепипеда составляет 8.2 нм. Из теории НРТ известно, что количественно двумерный и трехмерный случаи различаются умеренно [41,42,80]. Коэффициенты перемепивания α_+ примерно одинаковы. Скорости всплытия пузырей сопоставимы [81].

Во-вторых, ширина L_y варьировалась. Сначала для проверки начальных условий выполнялись расчеты с относительно малой шириной 25 нм. Затем выполнялся расчет с большой шириной 250 нм.

Кроме того, использовались приемы с отсечением «лишней» воды и «лишнего» золота. Дело в том, что большая длина $L_{total} = L_{Au} + L_{wt}$ (по направлению x) слоя, охваченного движением, получается из-за разбегания волны сжатия в золоте и УВ в воде от начальной плоскости КГ. Эти волны движутся со скоростями, которые близки к скорости звука или превышают ее. Скорость звука очень велика по сравнению со скоростями, с которыми происходят движения в интересующем нас намного более тонком (по сравнению с L_{total}) приконтактном слое около КГ. Только на акустической стадии длительностью порядка $t_s = d_T/c_s$ скорость КГ $u_{CB}(t)$ порядка c_s (см. рис. 26).

Между тем после завершения стадии нуклеации волну сжатия в золоте и приконтактную область разделяет двухфазный слой, который находится при околонулевых давлениях и скорость звука в котором мала. События, происходящие с волной сжатия в золоте (ее распространение, опрокидывание, упругопластическое расщепление [60]), никак не сказываются на приконтактном слое. Длительность нуклеации порядка t_s. Нуклеация продолжается пока волна разрежения не покинет слой лазерного прогрева толщиной d_T вслед за волной сжатия в золоте. Поэтому на временах порядка нескольких масштабов t_s выбран момент времени t_{crop}, в который толстый двухфазный слой рассекается плоскостью. Атомы золота, находящиеся на глубинах за этой плоскостью, при $t > t_{crop}$ не участвуют в моделировании. Аналогичный прием использован для сокращения числа лагранжевых ячеек в 2ТГД-коде. Отсечение «лишнего» золота проиллюстрировано выше на рис. 19.

Как сказано выше в разд. 3, за парой волн, уходящих в толщу золота, остается область покоя с нулевым давлением. Поэтому отсечь золото несложно. С отсечением «лишней» воды сложнее.

После подбора нужных начальных условий, а другими словами, нужного режима прогрева, делался расчет до 400 пс с малой шириной $L_y = 25$ нм. Находилась траектория лагранжевой частицы (материальной частицы) $x_{140}(t)$, которая до лазерного воздействия находилась на расстоянии 140 нм от КГ. Функция $x_{140}(t)$ после момента t = 400 пс гладко аналитически продолжалась до t = 1 нс. Что же это за «лагранжева» частица в МД-расчете? Выбиралась группа соседних молекул воды на расстоянии 140 нм от начальной позиции КГ. Записывалась траектория их центра масс. Это и есть зависимость $x_{140}(t)$.

Теперь вместо расчета с толстым слоем воды выполняется МД-расчет с более тонким слоем воды, находящимся в промежутке между КГ и границей $x_{140}(t)$. В случае «толстой воды» отслеживалась УВ в воде вплоть до t = 400 пс. Сравнение расчета A с «толстой водой» и полным слоем ударно-сжатой воды и расчета В, ограниченного границей $x_{140}(t)$, показывает, что эти расчеты практически эквивалентны. В расчете В граница слоя воды принудительно смещалась по закону $x_{140}(t)$.

Отсечение «лишней» воды комбинировалось с десятикратным увеличением ширины L_y от 25 до 250 нм. Ширина L_y исключительно важна для полноценного моделирования развития НРТ. В узких каналах развитие НРТ сильно тормозится. Расчет с большой шириной назовем (В-мульти).

Десятикратное увеличение ширины L_y от 25 до 250 нм заключается в том, что расчет В в момент t_{multi} размножается на десять полос (или каналов) и каналы эти объединяются в единый канал. При $t > t_{multi}$ расчет В-мульти ведется в расчетном параллеленинеде с $L_y = 250$ нм. Из-за другого расположения ячеек Вороного в расчете В-мульти по сравнению с расчетом В, эти расчеты неэквивалентны. НРТ быстро усиливает эту неэквивалентность. Так что вскоре широкий канал В-мульти действительно начинает работать как широкий канал с самого начала лазерного нагрева. Таким образом, осуществлялся расчет с большой шириной L_y и с намного уменьшенным числом молекул воды по сравнению с прямым моделированием.

Чтобы не пропустить важную стадию замедления КГ, расчет В-мульти начинается с момента времени t_{start} порядка времени до начала нуклеации. Все стадии замедления КГ существенны для накопления и усиления возмущений механизмом НРТ (см. рис. 28–30).

Результат расчетов методиками А, В и В-мульти представлен на рис. 31. Размер кадра по горизонтали $L_u = 249.2$ нм, размер пикселя 0.623 нм, верхней границей кадров на рис. 31 является указанная выше лагранжева частица $x_{140}(t)$. После выхода УВ в воде за границу $x_{140}(t)$ толщина слоя воды медленно увеличивается из-за постепенного снижения давления в приконтактном слое (см. зависимость $p_{CB}(t)$ на рис. 24). Снижение давления уменьшает плотность воды; в числах это эффект умеренный. Соответственно возрастает толщина слоя воды, показанного на рис. 31 (область, занятая водой, окрашена в голубой цвет). Эффект уменьшения степени сжатия воды и расширения слоя, ограниченного поверхностью $x_{140}(t)$, сплетается с сильной деформацией КГ вода-золото из-за развития возмущений Рэлея – Тейлора и с эффектом сильного нагрева воды возле КГ (горячая вода при этом дополнительно расширяется). Общее число атомов в расчете, показанном на рис. 31, около 50 миллионов.

Из рис. 31 ясны процессы аккреции двухфазной смеси из фрагментов расплава и каверн с паром на границу атмосферы (ср. с рис. 2, 3, 15–18). На рис. 31 атмосферой является сплошной однофазный слой золота. Давление в нем растет по направлению снизу вверх. Из-за аккреции толщина атмосферы на рис. 31 увеличивается с течением времени, несмотря на повышение плотности золота в атмосфере вследствие постепенного охлаждения атмосферы. Остывание происходит из-за нагрева воды и из-за теплопередачи по мембранам и нитям пены в толщу пены, где температура вспененного золота ниже, чем в горячей атмосфере. Вода обладает небольшой, но существенной атомной теплопроводностью. В золо-



Рис. 31. (В цвете онлайн) Усиление возмущений Рэлея – Тейлора из-за торможения атмосферы давлением воды. Желтым цветом показано золото, голубым — вода. Из-за сильного нагрева вода возле границы золото – вода меняет свой цвет с синего на голубой. На последнем кадре видна оторвавшаяся капля золота. Это один из механизмов формирования наночастиц при абляции в жидкость

те электронная теплопроводность намного больше. Она моделируется блоком Монте-Карло, встроенным в МД-алгоритм с динамической декомпозицией по многогранникам Вороного [82].

Пока неясно, каким образом сказывается на развитии НРТ шум всплесков от ударов жидких фрагментов на границе между атмосферой и двухфазной смесью. Влияние удара фрагмента длиной λ по y экспоненциально затухает в толщу атмосферы на глубине $1/k = \lambda/2\pi$, $k = 2\pi/\lambda$. Во-первых, скорость удара Δu невелика (см. рис. 17 и 18); правда, и скорость развития НРТ мала. Во-вторых, глубина $\lambda/2\pi$ меньше текущей толщины атмосферы. С течением времени величина $\lambda(t)$ растет — укрупнение ячеек пены. Но и толщина атмосферы увеличивается.

Из аналогичных соображений (относительно затухания влияния на глубине $\lambda/2\pi$) была выбрана толщина слоя воды 140 нм, определяющая описанную выше функцию $x_{140}(t)$. Рост НРТ-мод с масштабом по оси y, показанном на рис. 31, не сказывается на поверхности $x = x_{140}(t)$. Соответственно граница $x = x_{140}(t)$, составленная из лагранжевых частиц воды, остается плоской (горизонтальной на рис. 31), несмотря на сильнейшую деформацию КГ.

На рис. 32–34 показана эволюция профилей в случае, соответствующем расчету на рис. 31.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрен процесс абляции поверхности золота в воду под действием фемтосекундного лазерного импульса, энергия которого поглощается



Рис. 32. Профили давления и плотности в МД-моделировании в версии А: узкий канал $L_y = 25$ нм, без отрезания части пены, прилегающей к дну кратера, и без границы $x_{140}(t)$. Результаты аналогичны приведенным в разд. 5. Цифрами обозначены: 2 — УВ в воде, 1 — КГ, 5 — верхняя граница атмосферы (ср. с рис. 2, 3)

в скин-слое золота после прохождения через прозрачную воду. Приводятся результаты двухтемпературных одномерных гидродинамических расчетов расширения сильно нагретого поверхностного слоя расплава золота в воду. Расширение приводит к нуклеации паровых полостей в расплаве. В результате возникает слой двухфазной смеси жидкой и паровой фаз золота. Торможение водой расширения золота приводит к формированию контактного слоя золота, в котором происходит возвращение двухфазной смеси в однофазное состояние. Одно-



Рис. 33. Приконтактная область. Стадия, когда волна сжатия ушла направо. Перепад давления на атмосфере связан с весом слоя золота в атмосфере, которая тормозится водой



Рис. 34. Скачок скорости вниз (торможение) на верхней границе атмосферы, где двухфазная смесь входит в атмосферу (ср. с аналогичным поведением в $2T\Gamma$ Д-расчете со скачком скорости Δu на рис. 14, 17, 18)

фазный контактный слой золота граничит с водой, по которой распространяется ударная волна. В неинерциальной системе координат, связанной с контактом, торможение эквивалентно воздействию гравитационного поля. Таким образом, более плотный расплав золота оказывается в состоянии, в котором расплав поддерживается в поле тяжести давлением жидкости малой плотности. Такие состояния, как известно, являются неустойчивыми. Контактная граница между золотом и водой сильно деформируется вследствие развития неустойчивости Рэлея – Тейлора. Представлены результаты крупномасштабного молекулярно-динамического моделирования абляции золота в воду, которые полностью подтверждают возможность развития неустойчивости Рэлея – Тейлора. Неустойчивость приводит к формированию наночастиц золота капиллярного масштаба при фрагментации струй жидкого золота.

Авторы благодарят Российский научный фонд за поддержку (грант № 14-19-01599).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Замедление границы: откол и неустойчивость

Имеется качественная разница между распадом разрыва давления на контакте двух однородных полупространств и распадом, когда имеется неоднородность. В первом случае течение автомодельно (см. разд. 2), автомодельная координата x/t, контактная граница (КГ) движется в сторону среды низкого давления с постоянной скоростью, замедление КГ равно нулю: g = 0, см. рис. 6; при расчете автомодельной координаты x/t время t отсчитывается от момента распада разрыва. Во втором случае КГ замедляется: $q \neq 0$ (см. разд. 3 о причине торможения). Согласно принципу эквивалентности Эйнштейна (эффект лифта), в неинерциальной системе координат, связанной с КГ, появляется гравитационное поле. В этом состоит качественное различие первого и второго случаев.

Замедление g складывается из сопротивления конденсированной фазы растяжению, g_{intrn} , и торможения внешней инертной средой, g_{extrn} . Рассмотрим расширение в вакуум. Тогда остается только торможение силами когезии. В простейшей модели имеем горизонтальный слой жидкости в поле тяжести на потолке. Пусть атомы жидкости когезионно прочно сцеплены с несдвигаемыми атомами потолка. На КГ с вакуумом давление равно нулю. В гидростатическом равновесии имеем $p = -\rho |g| x$, т. е. давление линейно убывает в глубь жидкости; принято, что x = 0 на КГ; уменьшение плотности конденсированной фазы из-за растяжения легко включить в уравнение гидростатики (здесь этим изменением пренебрежено).

Максимальный рост неустойчивости Рэлея – Тейлора имеет место при отсутствии стабилизации поверхностным натяжением и вязкостью. Инверсный каскад укрупнений масштаба [41, 42, 80, 83] создает ансамбль пузырей, продвигающихся вверх по слою жидкости. Толщина слоя, в котором в результате подъема пузырей давление повышается от отрицательного до нулевого давления вакуума, равна приблизительно

$$h_{+} = \alpha_{+} \operatorname{At} g t^{2}, \quad \operatorname{At} = \frac{\rho_{2} - \rho_{1}}{\rho_{2} + \rho_{1}},$$

где время t отсчитывается от момента создания первоначально неподвижного подвешенного слоя, толщина h_+ измеряется от начальной плоскости КГ x = 0, число Атвуда At = 1 в случае вакуума.

Время роста слоя $h_+ = \alpha_+ gt^2$ фрагментации сплошной жидкости ограничено временем замедления КГ. От $F_{abs} = 0$ и до порога нуклеации время замедления определяется временем отражения от КГ акустической волны сжатия, идущей к КГ (см. разд. 3). Это время порядка акустического масштаба времени $t_s = d_T/c_s$. Поэтому максимальная толщина раздробленной жидкости порядка

$$h_{max} = \alpha_+ gt_s^2 \sim \alpha_+ ut_s \approx \alpha_+ (p/Z) t_s,$$
$$h_{max} \sim \alpha_+ (u/c_s) d_T,$$

где $g \sim u/t_s$, $u \approx p/Z$. Величина $\alpha_+ \approx 0.03-0.05$ [41, 42, 80, 83] существенно меньше единицы. Отметим, что на этой величине мало сказывается вариация числа Атвуда At $\in [0, 1]$ и размерности пространства 2D–3D. Хотя случаи с At = 1 или 2D-геометрией принципиально отличаются от ситуации 3D, At < 1 отсутствием колмогоровской диссипации.

Скорость u и число Маха u/c_s растут с увеличением поглощенной энергии F_{abs} , поскольку $u \approx p/Z$, $p \sim F_{abs}/d_T$. Этот рост продолжается до достижения порога нуклеации. Порог нуклеации немного ниже порога откола [25, 26, 84]; разница от единиц до десятка процентов. В наших оценках здесь этой разницей пренебрежем. На пороге нуклеации величина p в акустической оценке $u \approx p/Z$ примерно равна прочности вещества *p*_{strng} на разрыв. В экспериментах с ультракороткими импульсами прочность p_{strng} существенно повышена (на порядок) по сравнению с прочностью на больших пространственно-временных масштабах. Но даже в ситуации с ультракороткими импульсами число Маха $u_{nucl}/c_s \approx p/Z/c_s \approx p_{strng}/B$ мало (проценты); здесь В — объемный модуль. В случае больших масштабов (скажем, $d_T \sim 1$ мм, $t_s \sim 10^{-6}$ с) отношение u_{nucl}/c_s еще на порядок меньше.

Таким образом, отношение $h_{max}/d_T \sim \alpha_+(u/c_s) \sim 10^{-4}$ очень мало. Кроме того, чтобы возмущения с размерами гармоник $\langle \lambda \rangle \sim h_+$ появились, требуется чтобы средняя длина $\langle \lambda \rangle$ превзошла капиллярный и вязкий масштабы:

$$\lambda_{\sigma} = 2\pi \sqrt{\sigma/g/\rho} =$$

$$= 80 \left(\frac{\sigma}{300 \,\mathrm{дин/cm}} / \frac{g}{10^{13} \,\mathrm{cm/c}^2} / \frac{\rho}{19.3 \,\mathrm{r/cm}^3} \right)^{1/2} \,\mathrm{hm},$$

$$\lambda_{\nu} = 2\pi (\nu^2 / \text{At}/g)^{1/3} =$$

= 40 $\left(\frac{\nu}{0.0015 \text{ cm}^2/\text{c}}\right)^{2/3} / \left(\frac{g}{10^{13} \text{ cm/c}^2}\right)^{1/3}$ HM,

где ν — кинематическая вязкость золота (см. Приложение В), которая получается из динамической вязкости делением на плотность ρ . В приведенных оценках мы положили At = 1. Вязкая длина λ_{ν} находится из условия Re = $v_{\nu} k_{\nu}^{-1} / \nu = 1$, где Re — число Рейнольдса, $v_{\nu} = \sqrt{\operatorname{At} g k_{\nu}^{-1}}$, $\lambda_{\nu} = 2\pi/k_{\nu}$.

Из приведенных формул видно, что HPT-эффекты весьма слабы в случае воздействия ультракороткого импульса и расширения в вакуум поверхностного нанослоя объемной мишени. Действительно, отношение h_{max}/d_T мало, порядка 10^{-4} ; тогда при $d_T \sim 100$ нм величина h_{max} становится ненаблюдаемой. Плюс ограничения по капиллярности и вязкости.

Для полноты картины посмотрим, можно ли наблюдать НРТ при очень больших толщинах $d_T \sim 100$ см. Тогда $h_{max} \sim 100$ мкм, $t_s \sim 300$ мкс, $g \approx 3 \cdot 10^7$ см/с², если $\Delta u \sim 100$ м/с (здесь Δu — уменьшение скорости КГ на участке торможения КГ силами когезии). Как видим, увеличение d_T сильно уменьшает замедление g. Соответственно возрастают капиллярный (до 50 мкм) и вязкий (до 3 мкм) масштабы. Капиллярный масштаб сопоставим с h_{max} , так что НРТ мелкомасштабна и слаба.

Отметим, что выше порогов нуклеации и откола в приведенные выше формулы следует подставлять не скорость u, набранную КГ в момент распада разрыва, а скорость Δu . Дело в том, что выше порога откола не происходит остановки КГ под действием сил когезии. Величина u растет с ростом отношения $F_{abs}/F_{abs|abl}$, а величина Δu уменьшается. Отношение $F_{abs}/F_{abs|abl}$ характеризует надпороговость. В достаточно «горячей» ситуации с большой надпороговостью 3–5 как торможение, так и уменьшение скорости становятся малыми.

Подводя итоги этого Приложения, скажем, что силы когезии являются причиной как эффектов НРТ, так и откола. Таким образом, эти явления связаны через торможение и неинерциальность. Оба явления ведут к нарушению сплошности. Откол вызывается ограничением когезии конечной величиной прочности. Отметим, что аналогичная ситуация (слабость HPT) возникает при отколе за счет выхода УВ толщиной d_T на свободную поверхность в жидкости. В случае первоначально холодного твердого металла порог откола обычно ниже порога плавления в УВ. Если амплитуда УВ достигает порога плавления, то, как правило, снижение скорости за счет когезии, Δu , мало.

В данном Приложении рассмотрен случай, когда торможение КГ полностью обусловлено когезией конденсированной фазы. В тексте настоящей статьи, посвященной абляции золота в воду, основное внимание уделяется ситуации, когда, во-первых, когезия слаба, поскольку велика надпороговость $F_{abs}/F_{abs|abl}$. Соответственно золото нагревается до около- или сверхкритических температур, поверхностное натяжение становится очень малым или исчезает. Во-вторых, торможение осуществляется за счет инерции внешней среды — воды. При этом имеется подпитка слоя торможения (атмосферы) за счет потока еще не заторможенного вещества, разлетающегося в волне разрежения (см. рис. 2 и 3). Происходит подпитка массой и импульсом.

В основном тексте отмечена схожесть этой задачи с задачами астрофизики (неустойчивость магнитосферы, разлет остатков сверхновой) [38-43] и физики взрыва [44, 45] (см. разд. 1). Подчеркнем, что геометрия разлета оказывает существенное влияние на интенсивность перемешивания. Медленнее всего развитие HPT происходит в 1D-геометрии. Выше задача об абляции золота в воду рассматривалась именно в 1D-случае, когда диаметр $2R_L$ пятна нагрева велик — сотни микрометров. Динамикой разрушения «нагребаемой» оболочки и формированием наночастиц в воде можно управлять за счет уменьшения диаметра 2R_L до десятков и единиц микрометров. Эта задача требует отдельного анализа. Недавно была детально изучена задача о разлете вещества в вакуум из малых пятен нагрева [85,86].

приложение в

Вязкость горячего золота

На рис. 35 показаны экспериментальные данные, относящиеся к вязкости золота на бинодали. МД-расчеты вязкости на бинодали и вне ее (т. е. под высоким давлением) требуют отдельного исследования. Кривые 1 и 2 на рис. 35 представляют собой далекую экстраполяцию аппроксимационных формул, приведенных в работе [87], в которой измерены вязкости в первых двух точках (T = 1.336 кК и T == 1.637 кК) слева на кривых 1 и 2. Также использо-



Рис. 35. Кинематическая вязкость ν золота в широком диапазоне температур от температуры плавления до окрестности критической точки. Кривая ρ теплового расширения расплава золота согласно данным работ [46–48]

ваны данные относительно плотности жидкой фазы на бинодали золота из работ [46–48].

Сначала подсчитывается динамическая вязкость в пуазах по формуле из работы [87]

$$\eta [\Pi 3] = 0.01133 \exp(1.91/T [\kappa K])$$

Полученные значения делим на плотность золота на бинодали $\rho_{bin}(T)$. Приходим к кинематической вязкости $\nu = \eta/\rho$, показанной кривой 1 на рис. 35. В случае кривой 2 заменяем формулу для η :

$$\eta \ [\Pi_3] = 0.00232T \ [\kappa K] \exp(3.67/T \ [\kappa K]).$$

Кривая 3 дает оценку вязкости по молекулярно-кинетической теории:

$$u = u_T l, \quad u_T = \sqrt{\frac{3k_B T}{M}}, \quad l = n^{1/3}$$

где u_T — тепловая скорость, M — масса атома золота, n — концентрация атомов золота в расплаве на бинодали.

ЛИТЕРАТУРА

- C.-K. Sun, F. Vallee, L. H. Acioli, E. P. Ippen, and J. G. Fujimoto, Phys. Rev. B 50, 15337 (1994).
- X. Y. Wang, D. M. Riffe, Y. S. Lee, and M. C. Downer, Phys. Rev. B 50, 8016 (1994).
- J. Hohlfeld, S.-S. Wellershoff, J. Guedde, U. Conrad, V. Jaehnke, and E. Matthias, Chem. Phys. 251, 237 (2000).

- D. Strickland and G. Mourou, Opt. Comm. 55, 447 (1985).
- M. Pessot, P. Maine, and G. Mourou, Opt. Comm. 62, 419 (1987).
- K. Phillips, H. Gandhi, E. Mazur, and S. Sundaram, Adv. Opt. and Photon. 7, 684 (2015).
- M. C. Downer, R. L. Fork, and C. V. Shank, J. Opt. Soc. Amer. B 4, 595 (1985).
- V. V. Temnov, K. Sokolowski-Tinten, P. Zhou, and D. von der Linde, J. Opt. Soc. Amer. B 23, 1954 (2006).
- С. И. Анисимов, Б. Л. Капелиович, Т. Л. Перельман, ЖЭТФ 66, 776 (1974).
- N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskii, S. I. Ashitkov, V. A. Khokhlov, V. V. Shepelev, P. S. Komarov, A. V. Ovchinnikov, D. S. Sitnikov, Yu. V. Petrov, M. B. Agranat, S. I. Anisimov, and V. E. Fortov, Contrib. Plasma Phys. 51, 367 (2011).
- K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, A. Cavalleri et al., Phys. Rev. Lett. 81, 224 (1998).
- 12. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, Ю. В. Петров, Н. В. Шапошников, С. И. Анисимов, Д. фон дер Линде, Ю. Майер-тер-Фен, Письма в ЖЭТФ 69, 284 (1999).
- В. В. Жаховский, К. Нишихара, С. И. Анисимов, Н. А. Иногамов, Письма в ЖЭТФ 71, 241 (2000).
- 14. L. V. Zhigilei and B. J. Garrison, J. Appl. Phys. 88, 1281 (2000).
- B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, and I. I. Oleynik, Phys. Rev. B 82, 064113 (2010).
- 16. D. S. Ivanov and L. V. Zhigilei, Phys. Rev. B 68, 064114 (2003).
- 17. M. Gill-Comeau and L. J. Lewis, Phys. Rev. B 84, 224110 (2011).
- 18. Ю. В. Петров, Н. А. Иногамов, К. П. Мигдал, Письма в ЖЭТФ 97, 24 (2013).
- Ю. В. Петров, К. П. Мигдал, Н. А. Иногамов, С. И. Анисимов, Письма в ЖЭТФ 104, 446 (2016).
- 20. P. Lorazo, L. J. Lewis, and M. Meunier, Phys. Rev. B 73, 134108 (2006).
- 21. C. Wu, M. S. Christensen, J.-M. Savolainen, P. Balling, and L. V. Zhigilei, Phys. Rev. B 91, 035413 (2015).
- 22. P. N. Mayer and A. E. Mayer, J. Appl. Phys. 120, 075901 (2016).

- 23. E. T. Karim, M. V. Shugaev, Chengping Wu, Zhibin Lin, Hisashi Matsumoto, M. Conneran, J. Kleinert, R. F. Hainsey, and L. V. Zhigilei, Appl. Phys. A 122, 407 (2016).
- 24. Chengping Wu and L. V. Zhigilei, J. Phys. Chem. C 120, 4438 (2016).
- 25. В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, К. Nishihara, Письма в ЖЭТФ 87, 491 (2008).
- 26. V. Zhakhovskii, N. Inogamov, and K. Nishihara, J. Phys.: Conf. Ser. 112, 042080 (2008).
- 27. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, С. И. Ашитков, Ю. В. Петров, М. Б. Агранат, С. И. Анисимов, К. Нишихара, В. Е. Фортов, ЖЭТФ 134, 5 (2008).
- 28. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov, S. I. Ashitkov, Yu. N. Emirov, K. V. Khichshenko, A. Ya. Faenov, T. A. Pikuz, M. Ishino, M. Kando, N. Hasegawa, M. Nishikino, P. S. Komarov, B. J. Demaske, M. B. Agranat, S. I. Anisimov, T. Kawachi, and I. I. Oleynik, J. Phys.: Conf. Ser. 510, 012041 (2014).
- N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, S. I. Ashitkov, Yu. N. Emirov, A. Ya. Faenov, T. A. Pikuz, M. Ishino, M. Kando, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Kawachi, M. B. Agranat, A. V. Andriash, S. E. Kuratov, and I. I. Oleynik, J. Phys.: Conf. Ser. 500, 112070 (2014).
- 30. 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, Yu. V. Petrov, K. P. Migdal, T. A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eyama, N. Kakimoto, T. Tomita, M. Baba, Y. Minami, T. Suemoto, and T. Kawachi, Appl. Phys. B **119**, 413 (2015).
- N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, and V. A. Khokhlov, in PIERS Proc. (ISSN 1559-9450), Prague, Czech Republic, July 6–9 (2015), p. 2413.
- 32. С. И. Ашитков, С. А. Ромашевский, П. С. Комаров, А. А. Бурмистров, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, М. Б. Агранат, КЭ 45, 547 (2015).
- 33. A. Y. Vorobyev and Chunlei Guo, Opt. Express 14, 2164 (2006).
- 34. A. A. Ionin, S. I. Kudryashov, S. V. Makarov, A. O. Levchenko, A. A. Rudenko, I. N. Saraeva, D. A. Zayarny, Ch. R. Nathala, and W. Husinsky, Laser Phys. Lett. 13, 025603 (2016).
- 35. M. B. Agranat, S. I. Anisimov, S. I. Ashitkov, V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, K. Nishihara, A. M. Oparin, Yu. V. Petrov, V. E. Fortov, and V. A. Khokhlov, Appl. Surf. Sci. 253, 6276 (2007).

- 36. С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, К. Нишихара, Ю. В. Петров, В. А. Хохлов, ЖЭТФ, 130, 212 (2006).
- 37. С. Г. Бежанов, А. П. Канавин, С. А. Урюпин, КЭ 46, 119 (2016).
- 38. Н. Р. Сибгатуллин, Колебания и волны в сильных гравитационных и электромагнитных полях, Наука, Москва (1984).
- 39. J. Arons and S. M. Lea, Astrophys. J. 207, Pt. 1, 914 (1976).
- **40**. Н. А. Иногамов, Р. А. Сюняев, Письма в Астрон. ж. **25**, 323 (1999); **36**, 896 (2010).
- 41. Н. А. Иногамов, А. Ю. Демьянов, Э. Е. Сон, Гидродинамика перемешивания: периодические структуры, усиление субгармоник, инверсный каскад, Изд-во МФТИ, Москва (1999).
- 42. N. A. Inogamov, Astrophys. and Space Phys. Rev. 10, Pt. 2, 1-335 (1999).
- 43. F. Fraschetti, R. Teyssier, J. Ballet, and A. Decourchelle, Astron. and Astrophys. 515, id.A104 (2010).
- 44. S. I. Anisimov, Y. B. Zeldovich, N. A. Inogamov, and M. F. Ivanov, Progr. Astronaut. Aeronaut. 87, 218 (1983).
- 45. K. Balakrishnan, F. Genin, D. V. Nance, and S. Menon, Shock Waves 20(2), 147 (2010).
- 46. A. V. Bushman, V. E. Fortov, G. I. Kanel, and A. L. Ni, Taylor & Francis Translation, London (1993).
- 47. K. V. Khishchenko, S. I. Tkachenko, P. R. Levashov, I. V. Lomonosov, and V. S. Vorobev, Int. J. Thermophys. 23, 1359 (2002).
- 48. http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/ http://www.ihed. ras.ru/rusbank/.
- 49. https://en.wikipedia.org/wiki/Gold.
- **50**. S. Chandrasekhar, *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*, Oxford Univ. Press, London (1968).
- 51. K. O. Mikaelian, Phys. Rev. E 54, 3676 (1996).
- **52**. Г. Э. Норман, С. В. Стариков, В. В. Стегайлов, ЖЭТФ **141**, 910 (2012).
- 53. Н. А. Иногамов, С. И. Анисимов, Б. Ретфельд, ЖЭТФ 115, 2091 (1999).
- 54. С. И. Анисимов, Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, Изв. АН, сер. МЖГ 34(6), 149 (1999).

- 55. S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, A. M. Oparin, B. Rethfeld, T. Yabe, M. Ogawa, and V. E. Fortov, Appl. Phys. A 69, 617 (1999).
- B. Chimier and V. T. Tikhonchuk, Phys. Rev. B 79, 184107 (2009).
- **57**. Р. И. Нигматулин, Р. Х. Болотнова, ТВТ **49**, 310 (2011).
- 58. V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, S. I. Ashitkov, and K. Nishihara, Appl. Surf. Sci. 255, 9592 (2009).
- 59. M. E. Povarnitsyn, V. B. Fokin, and P. R. Levashov, Appl. Surf. Sci. 357, 1150 (2015).
- 60. B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, and I. I. Oleynik, Phys. Rev. B 87, 054109 (2013).
- M. E. Povarnitsyn, T. E. Itina, P. R. Levashov, and K. V. Khishchenko, Phys. Chem. Chem. Phys. 15, 3108 (2013).
- 62. M. E. Povarnitsyn and T. E. Itina, Appl. Phys. A 117, 175 (2014).
- 63. T. E. Itina, J. Phys. Chem. C 115, 5044 (2011).
- 64. Cheng-Yu Shih, Chengping Wu, M. V. Shugaev, and L. V. Zhigilei, J. Colloid Interface Sci. 489, 3 (2017).
- N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, V. V. Zhakhovsky,
 V. A. Khokhlov, B. J. Demaske, S. I. Ashitkov,
 K. V. Khishchenko, K. P. Migdal, M. B. Agranat,
 S. I. Anisimov, V. E. Fortov, and I. I. Oleynik, AIP Conf. Proc. 1464, 593 (2012).
- 66. M. E. Povarnitsyn, T. E. Itina, M. Sentis, P. R. Levashov, and K. V. Khishchenko, Phys. Rev. B 75, 235414 (2007).
- 67. Yu. Petrov, K. Migdal, N. Inogamov, and V. Zhakhovsky, Appl. Phys. B 119, 401 (2015).
- 68. Ю. В. Петров, Н. А. Иногамов, Письма в ЖЭТФ 98, 316 (2013).
- 69. K. P. Migdal, Yu. V. Petrov, and N. A. Inogamov, Proc. SPIE 9065, 906503 (2013).
- K. Migdal, Yu. Petrov, D. Il'nitsky, V. Zhakhovsky, N. Inogamov, K. Khishchenko, D. Knyazev, and P. Levashov, Appl. Phys. A 122, 408 (2016).
- D. K. Ilnitsky, V. A. Khokhlov, V. V. Zhakhovsky, Yu. V. Petrov, K. P. Migdal, and N. A. Inogamov, J. Phys.: Conf. Ser. 774, 012101 (2016).
- 72. Zh. Lin, L. V. Zhigilei, and V. Celli, Phys. Rev. B 77, 075133 (2008).
- 73. A. Ng, Intern. J. Quant. Chem. 112, 150 (2012).

- 74. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskii, S. I. Ashitkov, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, P. S. Komarov, M. B. Agranat, S. I. Anisimov, and K. Nishihara, Appl. Surf. Sci. 255, 9712 (2009).
- 75. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Гидродинамика. Теоретическая физика, т. VI, Наука, Москва (1986).
- 76. E. B. Webb III and G. S. Grest, Phys. Rev. Lett. 86, 2066 (2001).
- 77. S. I. Anisimov, D. O. Dunikov, V. V. Zhakhovskii, and S. P. Malyshenko, J. Chem. Phys. 110, 8722 (1999).
- **78.** V. K. Semenchenko, *Surface Phenomena in Metals and Alloys*, Pergamon, New York (1961).
- **79**. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, ЖЭТФ **147**, 20 (2015).
- 80. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, А. Ю. Демьянов, Л. Н. Дембицкий, В. А. Хохлов, ЖЭТФ 119, 822 (2001).
- 81. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, ЖЭТФ 116, 908 (1999).

- 82. V. Zhakhovskii, K. Nishihara, Y. Fukuda, S. Shimojo, T. Akiyama, S. Miyanaga, H. Sone, H. Kobayashi, E. Ito, Y. Seo, M. Tamura, and Y. Ueshima, in *IEEE Proc. of the 5th Intern. Symp. on Cluster Computing* and Grid (CCGrid 2005), May 9–12, 2005, Cardiff, UK, Vol. 2 (2005), p. 848.
- 83. G. Dimonte, D. L. Youngs, A. Dimits, S. Weber, M. Marinak, S. Wunsch, C. Garasi, A. Robinson, M. J. Andrews, P. Ramaprabhu, A. C. Calder, B. Fryxell, J. Biello, L. Dursi, P. MacNeice, K. Olson, P. Ricker, R. Rosner, F. Timmes, H. Tufo, Y.-N. Young, and M. Zingale, Phys. Fluids 16, 1668 (2004).
- 84. С. И. Ашитков, Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, Ю. Н. Эмиров, М. Б. Агранат, И. И. Олейник, С. И. Анисимов, В. Е. Фортов, Письма в ЖЭТФ 95, 192 (2012).
- N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, and K. P. Migdal, Nanoscale Res. Lett. 11, 177 (2016).
- 86. П. А. Данилов, Д. А. Заярный, А. А. Ионин, С. И. Кудряшов, А. А. Руденко, А. А. Кучмижак, О. Б. Витрик, Ю. Н. Кульчин, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, Письма в ЖЭТФ 104, 780 (2016).
- 87. D. Ofte, J. Nucl. Materials 22, 28 (1967).