

Сверхупругость и распространение ударных волн в кристаллах

Н. А. Иногамов¹⁾, В. В. Жаховский^{∇,+}, В. А. Хохлов, В. В. Шепелев[□]

Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, 142432 Черногловка, Московская обл., Россия

[∇] Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

⁺ Department of Physics, University of South Florida, Tampa, 33620 Florida, USA

[□] Институт автоматизации проектирования РАН, 123056 Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 января 2011 г.

Расщепление ударной волны (УВ) на упругий предвестник и пластическую волну – характерное явление, проявляющееся только в твердых средах. Недавно в численных расчетах и фемтосекундном лазерном эксперименте обнаружено существование упругой УВ при давлениях $p \approx 10$ ГПа, на 1–2 порядка превосходящих динамический предел упругости. Пластическая УВ не успевает сформироваться в этих ультракоротких волнах при $p \approx 10$ ГПа. В данной работе проанализированы процессы формирования и распространения упругой и пластической волн в алюминии при еще больших давлениях, полученных с помощью фемтосекундных лазеров. Обнаружено, что упругий предвестник выживает даже в условиях, когда за пластическим фронтом давление доходит до огромной величины $p \sim 1$ Мбар, при которой начинается плавление металла. Показано, что учет сверхупругости необходим для правильной интерпретации предыдущих лазерных экспериментов.

Изобретение лазеров, способных излучать фемтосекундные импульсы, открыло дорогу к исследованию быстропротекающих процессов в веществе. Исключительное значение имела разработка методов диагностики на субпикосекундном масштабе времен. С диагностикой стала возможна не только генерация, но и измерение быстропротекающих процессов, инициированных фемтосекундным лазером. Инициация и измерения проводятся с помощью пары ультракоротких импульсов на основе принципа стробоскопа [1–7]. Первым в паре является мощный нагревающий импульс (pump), а вторым – слабый зондирующий импульс (pump-probe методика). Оба импульса формируются из единого исходного импульса путем его разделения. Они проходят по путям разной оптической длины и прибывают на мишень в разные моменты времени. Задержка по времени прибытия t_{delay} зондирующего импульса относительно нагревающего импульса варьируется за счет контролируемого изменения оптического пути. Таким образом получают серию по t_{delay} значений фазы и амплитуды зондирующего импульса, отраженного от места воздействия нагревающего импульса. Фазы и амплитуды дают сведения об изменении оптических характеристик во времени, по ним судят о быстропротекающей эволюции нагретого вещества. Для успеха pump-probe методики нагревающие импульсы и места облучения мишени, составляющие серию, должны быть одинаковы в разных опытах серии.

Фемтосекундные лазеры оказались весьма удачными генераторами ударной волны (УВ) в конденсированной фазе. Они применяются вместе с pump-probe техникой измерений [1, 2, 4–7]. С их помощью диапазон давлений легко расширяется до значений 1–3 Мбар, достигнутых уже в первых опытах Эванса и др. [1] (1 Мбар = 100 ГПа). Кроме того, фемтосекундные эксперименты позволяют исследовать ранние стадии формирования скачков уплотнения. Эти исследования невозможно осуществить традиционными средствами (наносекундные лазеры, ударники и т.п.), которые относятся к другим пространственно-временным масштабам. В результате получены данные относительно прочности вещества при рекордных темпах деформации $\dot{V}/V \sim 10^9 \text{ с}^{-1}$ [6–9]. Эти данные относятся как к жидкой фазе (фронтальная абляция [8, 9]), так и к твердой фазе (тыльный откол [6, 8]); фронтальной является та сторона пленки, которая облучается нагревающим импульсом. В традиционных методиках исследования жидкой фазы затруднены.

Интересные результаты о сверхупругом поведении кристалла при ультракоротком ударном сжатии получены в работах [6, 7]. Обнаружено продолжение упругой ударной адиабаты далеко за обычно принимаемое значение динамического предела упругости HEL (Hugoniot Elastic Limit) p_{HEL} . Значения p_{HEL} приведены в руководствах [10–13], см. также сводку данных по p_{HEL} на рис.4 в статье [6]. Доказательство того, что в фемтосекундных опытах распространяются именно мощные упругие скачки, опира-

¹⁾ e-mail: nailinogamov@googlemail.com

ется на согласие между экспериментом [6] и теорией [7].

Результаты по сверхупругости [6, 7] ставят новые проблемы. Дело в том, что они сильно отрываются от предыдущих представлений о расщеплении волны на упругую и пластические волны. Ясно, что при наращивании давления пластический переход должен появиться даже на масштабах ~ 1 мкм, рассмотренных в статьях [6, 7]. Действительно, в алюминии при давлении на поршне ≈ 120 ГПа, скорости поршня ≈ 5.5 км/с и скорости УВ ≈ 13 – 14 км/с имеет место плавление за фронтом волны. При этом толщина фронта плавления порядка нескольких межатомных расстояний и фактически совпадает с толщиной фронта УВ (вопрос о переходе в жидкую фазу требует отдельного обсуждения [14]). Очевидно, что при несколько меньших давлениях должны иметь место мощные пластические деформации, которые приводят к формированию узкого фронта пластической УВ. Для решения вопроса об упруго-пластическом расщеплении в алюминии при давлениях порядка 100 ГПа нужны новые эксперименты и расчеты.

В данной работе представлены результаты моделирования процесса распространения волны сжатия с упруго-пластическим расщеплением. Численные расчеты позволили дать правильную интерпретацию предыдущих экспериментов [1, 2, 5]. Из анализа этих экспериментов следует, что экспериментальная программа на будущее должна включать опыты при интенсивностях I вплоть до оптического пробоя воздуха при $I \sim 10^{14}$ – 10^{15} Вт/см². Фокусировка лазерного луча на мишени в опытах [1, 2, 4–6, 8] осуществляется в воздухе при нормальном давлении. Необходимо использовать металлические пленки малой (200–700 нм), средней (1–2 мкм) и большой (5–20 мкм) толщины. На тонких пленках должна изучаться картина двухтемпературной релаксации с горячими электронами $T_e \gg T_i$. Процесс формирования волны сжатия вследствие резкого подъема давления в зоне нагрева должен исследоваться на средних пленках. Наконец, на толстых пленках выясняются вопросы распространения, затухания и перестройки упругой и пластической УВ. Желательно составлять пары из измерений на свободновисящих пленках вместе с измерениями на пленках на стекле. Причем лазерный импульс и толщина пленок в такой паре должны быть одинаковыми. Дело в том, что информация о процессах внутри пленки извлекается из траекторий движения ее тыльной границы [1, 2, 5–8]. Движение границы начинается после прохождения волны через пленку на тыльную сторону. Траектории зависят от того, какая среда (воздух или стекло) прилегает к границе.

Стеклянная пластинка, поддерживающая металлическую пленку, должна располагаться с тыльной стороны пленки. В обратном случае (нагрев пленки через стекло) давления ограничены относительно низким значением ~ 10 ГПа из-за оптического пробоя стекла [2, 6]. Отсчет времени t_{delay} ведется от момента прибытия ршпр-импульса на фронтальную поверхность пленки. Для фиксации момента прибытия используется очень тонкая (~ 10 нм) пленка [1, 2]. Кроме того, определяется количество энергии F_{abs} , поглощенной в мишени. Эта величина необходима для аккуратного численного моделирования эксперимента, см. рис.7 в работе [15].

Суть данной работы поясняет рис.1. На нем показана плоскость $(V/V_0, p)$, где V_0 – удельный объем перед фронтом волны. Точка (1,0) на этой плоскости

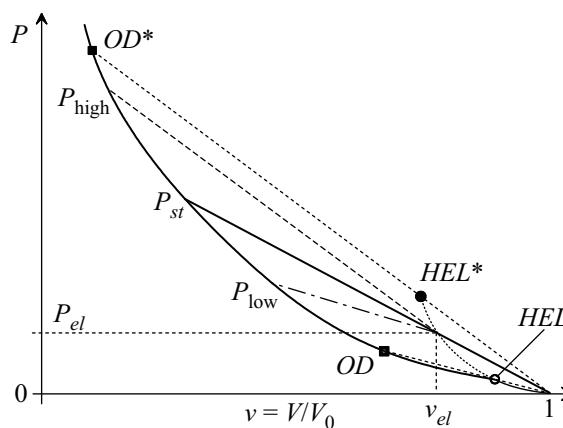


Рис.1. Схема взаимного расположения упругой и пластической ударных адиабат. Метастабильный (по отношению к зарождению дислокаций) участок $HEL - HEL^*$ упругой ударной адиабаты изображен пунктиром. При $p_{\text{high}} > p_{\text{st}}$ пластический скачок догоняет упругий предвестник, а при $p_{\text{low}} < p_{\text{st}}$ пластический фронт отстает от упругого. Это следует из наклона соответствующих прямых Релея

ти представляет состояние невозмущенного кристалла перед волной. В экспериментах достаточно больших пространственных масштабов²⁾ упругая ударная адиабата ограничена отрезком кривой между точками (1,0) и HEL . Точка HEL соответствует обычному значению динамического предела упругости [10–12]; для разных марок алюминия $p_{HEL} \sim 0.04$ – 1 ГПа, см. рис.4 в статье [6]. В работах [6, 7] доказано существование продолжения упругой адиабаты при $p > p_{HEL}$. Это продолжение соответствует пунктирной кривой, соединяющей точки HEL и HEL^* на рис.1.

²⁾ От долей миллиметра и больше, см. сопоставление размеров в работе [6].

Как показано в работе [16], это продолжение заканчивается в точке HEL^* с давлением $p_{HEL^*} \approx 33 \text{ ГПа}$ для ударного сжатия в направлении 111. В [16] рассматриваются монокристаллы алюминия с концентрацией вакансий в расчете на один атом от нуля до 10^{-3} . Вариация этой концентрации не сказывается на значении p_{HEL^*} .

В работе [16] обнаружено существование нового режима распространения УВ (см. ниже режим III). С учетом этого в классификации волн выделяются четыре режима:

(I). При достаточно малых давлениях распространяется чисто упругая стационарная УВ. Прямая Релея [10, 11, 17, 18], соединяющая начальное $(1,0)$ и конечное состояния перед и за фронтом волны, является отрезком прямой между точкой $(1,0)$ на рис.1 и точкой с давлением в диапазоне $0 < p < p_{HEL}$ на упругой ветви ударной адиабаты. Стационарность волны означает, что, во-первых, развитие во времени получается параллельным переносом профиля волны, и, во-вторых, скорость распространения и наклон прямой Релея не меняются со временем. За фронтом волны вещество остается в эластическом состоянии.

(II). С ростом давления возникает нестационарный двухволновой режим, в котором распространяются упругий предвестник и следующая за ним медленная пластическая УВ [10–12]. Расстояние между предвестником и пластическим фронтом растет, поскольку скорость предвестника выше. На плоскости $(V/V_0, p)$ на рис.1 режим II составлен из двух прямых Релея [10–12]. Одна прямая соединяет точки $(1,0)$ и HEL , а другая – точки HEL и (v, p) , $v = V/V_0$. Состояние (v, p) в диапазоне давлений $p_{HEL} < p < p_{OD}$ находится на отрезке пластической ветви ударной адиабаты между точками HEL и OD , см. рис.1. Точка на этом отрезке представляет пластически деформированное состояние за пластической УВ. Наклон прямой $(1,0)–HEL$ выше, чем наклон прямой $HEL–(v, p)$. В точке OD при $p \rightarrow p_{OD}$ эти наклоны сравниваются, поскольку три точки $(1,0)$, HEL и OD на рис.1 лежат на одной прямой. Анализу пластической адиабаты в окрестности точки OD посвящена работа [19]. В работе [20] рассмотрены медленные пластические волны (скорость поршня $u_p \sim 100 \text{ м/с}$) при давлении p_p за пластическим фронтом, лишь немного превышающем p_{HEL} .

(III). Стационарная одноволновая двухзонная конфигурация соответствует прямой, проходящей через три точки $(1,0)$, (v_{el}, p_{el}) и p_{st} на рис.1. Точка p_{st} принадлежит пластической ударной адиабате. При постоянном давлении на поршне p_{st} , которое лежит в пределах $p_{OD} < p_{st} < p_{OD^*}$, ширина эластической зоны d_{el} между упругим и пластическим

фронтами не меняется со временем. В этом режиме скорости упругого и пластических фронтов равны и, соответственно, имеются две стационарные зоны сжатия – упругая и пластическая. Так как подобная двухзонная конфигурация движется как единое целое и не изменяется во времени, то она должна рассматриваться как стационарная одноволновая. На рис.1 состояние вещества в упругой зоне представлено точкой el с координатами (v_{el}, p_{el}) . Это состояние находится на найденном в статьях [6, 7] продолжении упругой ударной адиабаты выше HEL (жирная пунктирная линия на рис.1). Упругое вещество жестче пластически трансформированного, соответственно упругая адиабата идет круче пластической. Поэтому прямая $(1,0) – el – p_{st}$ сначала пересекает упругую ударную адиабату. При дальнейшем повышении давления на поршне $p_{st} \rightarrow p_{OD^*}$ толщина d_{el} упругой зоны в двухзонной волне уменьшается. При этом давление p_{el} в упругой зоне стремится к предельному значению p_{HEL^*} . Прямой, проходящей через три точки $(1,0)$, HEL^* и OD^* , соответствует волна, в которой толщина упругой зоны d_{el} становится порядка межатомного расстояния.

(IV). При высоком постоянном давлении на поршне $p_p > p_{OD^*}$ по веществу бежит чисто пластическая волна, в которой практически отсутствует эластическая зона. В этом режиме волна образует стационарную одноволновую конфигурацию. Ее прямая Релея проходит выше точки HEL^* на рис.1.

Прежняя классификация состояла из трех режимов: I, II и IV. Поясним причины, по которым режим III оставался неизвестным. Скорость УВ D растет с давлением поршня p_p на участке давлений I. При увеличении p_p в диапазоне II ($p_{HEL} < p_p < p_{OD}$) скорость упругого предвестника D_{HEL} фиксирована, а скорость пластического фронта $D_{pl}(p_p)$ возрастает с p_p . Соответственно расстояние между фронтами растет медленнее при увеличении p_p . Другими словами, скорость расширения упругой зоны со временем, $D_{HEL} – D_{pl}(p_p)$, убывает и обращается в нуль при $p_p \rightarrow p_{OD}$. При этом считалось, что при $p_p > p_{OD}$ (то есть выше точки OD на рис.1) скорость пластической УВ начинает превышать предельную скорость D_{HEL} распространения упругого сигнала, и пластический скачок полностью поглощает упругий. Поэтому полагали, что с ростом давления происходит переход в точке OD из режима II в режим IV с одноволновой конфигурацией без упругой зоны. Из расчетов [16] следует, что это не так – имеется промежуточный режим III с конечной упругой зоной.

Рассмотрим вопрос о генерации двухзонной волны (режим III) в фемтосекундном эксперименте. Не-

обходимо учитывать физическую специфику фемтосекундного лазерного генератора высоких давлений, а именно, образование слоя вещества с горячими электронами, перегретыми относительно кристаллической решетки ($T_e \gg T_i$). Имеются две основные стадии формирования УВ – это двухтемпературная стадия ($T_e \gg T_i$) и акустическая стадия [7–9, 21]. Начальный профиль давления образуется во время двухтемпературной релаксации, продолжительность которой t_{eq} составляет ≈ 7 пс, а бегущая УВ формируется за следующие $t_s \approx 10$ пс. Данные значения t_{eq} и t_s относятся к эксперименту [1] на алюминии с параметрами: поглощенная энергия $F_{abs} = 2.6$ Дж/см², длительность импульса $\tau_L = 0.12$ пс. В этой работе интенсивность падающего излучения $I_{inc} = 7.7 \cdot 10^{13}$ Вт/см² соответствует значению $F_{abs} = AF_{inc} = 2.6$ Дж/см². Коэффициент поглощения $A(I_{inc}) = 1 - R = 0.28$ при этой интенсивности берется согласно статье [22]. Время релаксации $t_{eq}(F_{abs})$ медленно растет вместе с ростом энергии F_{abs} . Вложенная энергия $F_{abs} = 2.6$ Дж/см² велика – она в 40 раз превосходит порог абляции для алюминия [15]. Пиковые по времени и в пространстве значения электронных температуры и давления равны 190 кК и 350 ГПа. Они достигаются в момент окончания нагревающего импульса. К моменту $t = 2$ пс максимальное давление p_e падает до 120 ГПа. В момент $t = 3$ пс максимальные значения p_e и p_i сравниваются на значении 90 ГПа, хотя при $t = 3$ пс электронная внутренняя энергия превосходит ионную. Это связано с тем, что электронное уравнение состояния имеет параметр Грюнрайзена $\Gamma = 2/3$ [17], что ниже параметра $\Gamma \approx 2$ в ионном уравнении состояния. Со временем $t > 3$ пс электронное давление постепенно становится динамически несущественным.

На рис.2 показано распространение волны сжатия по пленке. Профили скорости вещества $u(x, t)$ получены путем молекулярно-динамического (МД, кривая с мелкими флуктуациями) и двухтемпературного гидродинамического (2Т-ГД, сплошная кривая) моделирования. Кристаллическое направление 110 ориентировано вдоль оси движения x . За начало координат $x = 0$ принята исходная позиция фронтальной границы пленки, облучаемой греющим импульсом. Толщины пленок в расчетах были 400 нм, 2 и 9 мкм. Концентрация случайно распределенных вакансий в исходном кристалле составляет 10^{-3} в расчете на один атом, что близко к реальной концентрации в точке плавления алюминия. Вакансии введены для того, чтобы приблизить свойства моделируемого кристалла к реальному кристаллу. В коде 2Т-ГД используется пластическое уравнение состояния [7, 8, 23], поэтому упругая зона на гидродинамичес-

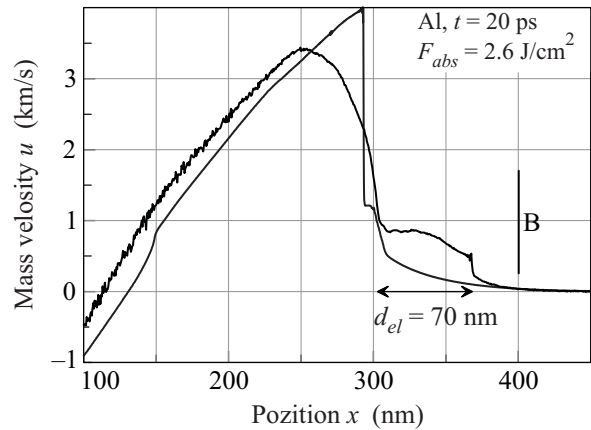


Рис.2. МД моделирование (кривая с мелкими флуктуациями) совместного распространения слева направо упругого предвестника и пластического фронта при воздействии импульса $I_{inc} = 7.7 \cdot 10^{13}$ Вт/см², взятого из работы [1]. Упругая зона толщиной $d_{el} = 70$ нм между фронтом упругой УВ (правый скачок) и пластическим фронтом (левый скачок) отмечена двусторонней горизонтальной стрелкой. Результаты МД согласуются с двухтемпературным гидродинамическим расчетом по амплитуде и ширине пластической сжатой зоны. Граница Al пленки со стеклом показана вертикальным отрезком B

ком профиле отсутствует. Упругое p_{el} и пластическое p_{high} (см. рис.1) давления в момент, показанный на рис.2, составляют 20 и 93 ГПа соответственно. Таким образом, значение p_{el} примерно вдвое превышает величину давления, достигнутую в экспериментах [6, 7].

Главный результат настоящей работы следует из сравнения расчетных и экспериментальных [1] траекторий границы алюминиевой пленки со стеклом, см. рис.3. Толщина пленки 400 нм. Граница выделена от-

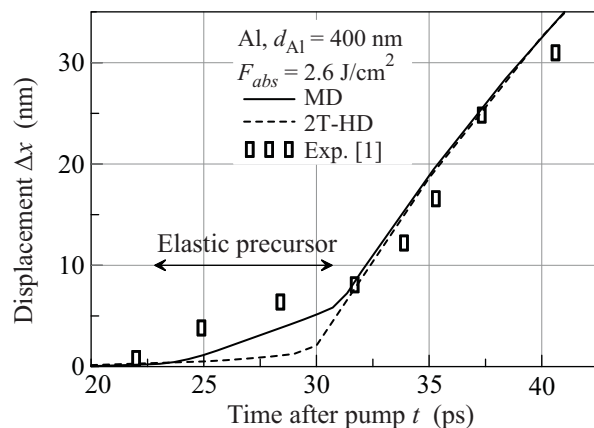


Рис.3. Смещение границы со стеклом Δx при прохождении волны сжатия через границу. Горизонтальная стрелка отмечает упругий предвестник

резком B на рис.2. На рис.3 показано смещение границы $\Delta x = x_{400}(t) - x_{400}(-\infty)$, где индекс 400 означает, что до прихода гидродинамического возмущения позиция границы была равна $x_{400}(-\infty) = 400$ нм. В расчетах пренебрегалось небольшой разницей в акустических импедансах на границе.

Сравним МД и 2Т-ГД расчеты, которые показаны на рис.2 и 3. Видим, как упругий предвестник влияет на закон смещения $\Delta x(t)$. Область предвестника выделена двусторонней стрелкой на рис.2 и 3. В отличие от МД результатов в расчете методом 2Т-ГД упругий предвестник отсутствует вследствие использования модели пластического твердого тела. Опытные данные из статьи [1] показаны прямоугольниками на рис.3 для данного греющего импульса и мишени. Замечательно, что такой же предвестник наблюдается в эксперименте! Расчетные и экспериментальные данные согласуются по времени выхода предвестника и пластической волны, а также по скоростям вещества за предвестником и пластическим скачком (соответственно 0.7 и 3–4 км/с, сравните с МД профилем на рис.2). Таким образом эксперимент подтверждает существование упругого предвестника перед пластическим скачком с амплитудой 1 Мбар. Следует подчеркнуть, что в работе [1] наличие предвестника было отмечено ([1], с. 3361), но его происхождение осталось неясным³⁾. Тогда казалась невероятной мысль о существовании упругого предвестника перед волнами такой большой амплитуды.

Для понимания упруго-пластических процессов на больших временах необходимо проследить эволюцию волны в толстых алюминиевых пленках. С этой целью проведем анализ недавних опытов [5], в которых применялись пленки с толщинами 3–9 мкм. Для этого используем результаты 2Т-ГД и МД расчетов воздействия фемтосекундного лазерного импульса на пленки толщиной 2 и 9 мкм.

Расчеты показывают, что волна сжатия, сформированная из начального профиля давления, опрокидывается на два ударных фронта. Сначала возникает эластический фронт за время примерно 5 пс, и затем пластический в следующие 10 пс. Таким образом, имеет место раздельное опрокидывание двух участков волны сжатия с образованием эластической и пластической УВ. На начальной стадии эти две УВ являются независимыми. При этом в момент возникновения лидирующей упругой УВ давление на ее фронте составляет $p \approx 13$ ГПа. Формирование пластической УВ начинается с границы расплава, где

имеется излом в профиле давления на уровне примерно 20 ГПа. Таким образом, в задней части эластической зоны, где она примыкает к пластическому фронту, давление равно $p_{el} \approx 20$ ГПа. При этом давление в пике пластического фронта $p_{high} = 95$ ГПа. В течение примерно 20 пс давление во всей эластической зоне выравнивается на уровне 20 ГПа, и эластическая УВ приобретает постоянную скорость.

В дальнейшем такая упруго-пластическая конфигурация (флуктуирующая кривая на рис.2) продолжает изменяться под действием двух причин. Это, во-первых, затухание УВ по мере распространения в толщу мишени и, во-вторых, взаимодействие между упругой и пластической волнами. В момент времени, показанный на рис.2, давление в пластическом фронте выше стационарного значения $p_{st} \approx 63$ ГПа, которое соответствует давлению $p_{el} \approx 20$ ГПа в стационарной двухзонной волне в режиме III. Поэтому прямая Релея $p_{el} \rightarrow p_{high}$ к пластическому состоянию идет круче, чем прямая Релея $(1, 0) \rightarrow p_{el}$ для упругого скачка (см. рис.1). Соответственно, скорость пластического фронта больше, и он приближается к упругому скачку. Это приводит к постепенному уменьшению толщины упруго сжатой зоны.

Интересно, что на интервале времен до $t \approx 200$ пс давление за пластическим фронтом снижается в три раза, а давление за упругим скачком и скорость этого скачка остаются практически постоянными и равными: $p_{el} \approx 20$ ГПа и 8.6–8.8 км/с соответственно. При этом МД и 2Т-ГД расчеты с высокой точностью согласуются по мгновенной позиции пластической УВ и по профилю давления в пластической зоне.

Как сказано выше, на интервале времен до 70 пс давление за пластическим скачком p_{high} выше, чем стационарное значение $p_{high} > p_{st} = 63$ ГПа; см. пояснения на рис.1. Соответственно, пластический фронт догоняет эластический, и толщина $d_{el}(t)$ упругой зоны сокращается. Минимальное значение $d_{el} = 20$ нм достигается в момент $t = 70$ пс, когда давления p_{high} и p_{st} сравниваются. В этот момент упругий и пластический отрезки прямых Релея образуют единую прямую, см. рис.1. Отметим, что минимальная толщина $d_{el} = 20$ нм значительно превышает постоянную решетки 0.4 нм. Поэтому единая прямая Релея, складывающаяся при $t \approx 70$ пс, соответствует стационарной двухзонной волне в режиме III, а не в режиме IV.

На временах $t > 70$ пс давление за пластическим скачком становится меньше, чем $p_{st}(p_{el} = 20 \text{ ГПа}) = 63$ ГПа. При этом меняется знак угла между отрезками упругой и пластической прямых Релея. На рис.1 это отрезки $(1, 0) \rightarrow p_{el}$ и $p_{el} \rightarrow p_{low}$. Теперь упругий отрезок идет круче – скорость упругой вол-

³⁾ Как показано в [1], предположения о связи предвестника с радиационным прогревом или с быстрыми электронами не могут быть выполнены в данной ситуации.

ны выше, $p_{high} > p_{st}$ и $p_{low} < p_{st}$, см. рис.1. Следовательно, фронт пластических трансформаций распространяется медленнее, чем упругий предвестник. В этом случае толщина $d_{el}(t)$ упругой зоны начинает увеличиваться. Например, при $t = 200$ пс имеем $d_{el} = 130$ нм. Соответствующее пластическое давление $p_{low}(t = 200 \text{ пс})$ составляет 30 ГПа.

Профили давления и скорости имеют форму, схожую с треугольной. За максимумом профиля величина давления снижается с приблизительно однородным по пространству мгновенным градиентом $\partial p(x, t_{fix})/\partial x$. С течением времени этот треугольник уширяется, а его высота уменьшается. Ширина треугольника на полувысоте $\Delta(t)$ нм в разные моменты времени равна: 230(100){50}, 440(200){30}, 700(500){20}, 1000(1000){13}, где в круглых скобках приведено время в пс, а в фигурных скобках – максимальное давление в ГПа.

Ширина упругой зоны $d_{el}(t)$ становится порядка ширины $\Delta(t)$, когда УВ уходит на глубину ~ 3 мкм. При этом скорость пластического фронта резко снижается до нуля – происходит его остановка. Толщина пластически трансформированного слоя $\Delta_{pl}(F_{abs})$ определяется местом остановки. С ростом энергии F_{abs} величина Δ_{pl} увеличивается. Это открывает путь к созданию пластически модифицированных слоев регулируемой толщины на поверхности обрабатываемой детали. Отметим, что если строить оценки величины Δ_{pl} , ориентируясь на обычно принимаемые низкие значения p_{HEL} , то величина Δ_{pl} будет намного больше. Из сказанного относительно остановки пластического фронта следует, что после момента остановки двухзонная конфигурация из упругого и пластического ударных фронтов вырождается в мощный ($p_{el} \gg p_{HEL}$) чисто упругий скачок, который сохраняет высокую скорость распространения.

Опыты [5] проведены на алюминиевой пленке при такой же интенсивности $7.7 \cdot 10^{13}$ Вт/см², как и в статье [1]. Было найдено, что при прохождении пленки толщиной 9 мкм средняя скорость волны составила около 9 км/с. Если вместе с авторами [5] предположить, что волна представляет собой пластическую УВ, то (согласно пластической ударной адиабате) для обеспечения такой высокой скорости необходимо давление за пластическим фронтом около 70 ГПа в конце пробега УВ по пленке 9 мкм. Однако наши расчеты для такой же интенсивности лазерного импульса показывают, что при удалении УВ на расстояние 9 мкм давление за скачком составляет всего лишь 13 ГПа. Тем не менее УВ проходит промежуток 3–9 мкм со скоростью 8.3–8.7 км/с, поскольку фронт этой волны оставляет вещество в эластическом состоянии. Высокая скорость упругого скачка определяется более

крутой эластической ударной адиабатой. Таким образом, представление о полностью пластическом характере УВ привело к неправильной интерпретации интересных опытов, выполненных в работе [5].

Важно подчеркнуть, что существование сверхупругих УВ является общим явлением, проявляющимся во всех кристаллических веществах. В важной работе [2] обнаружено существование высоких скоростей распространения УВ в пленках из никеля. В статье [2] это явление не нашло объяснения. Расчеты упругих ударных адиабат никеля, приведенных ниже, позволяют понять необычно высокую скорость волны. Для этого необходимо предположить, что УВ имела упругий фронт. Поэтому мы заключаем, что в фемтосекундных экспериментах [2] наблюдались не пластические, а упругие УВ. Покажем это.

Гидродинамические и МД расчеты, подобные проведенным в [7] для алюминия, весьма трудоемки. В случае никеля они еще не окончены. Поэтому используем численно-аналитический метод вычисления упругих ударных адиабат никеля. Представим ударную адиабату для скорости скачка D в виде разложения $D/c = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} a_i (u_p/c)^i$ по скоростям поршня u_p . Здесь c – скорость звука перед УВ. Записывая условия сохранения потоков массы, импульса и энергии [17, 18] на фронте УВ, с помощью программы символьческих вычислений Mathematica находим выражения для коэффициентов a_i (выражения для старших коэффициентов оказываются громоздкими и здесь не приводятся):

$$a_1 = \frac{1 + A_1}{2}, a_2 = \frac{1 + 2A_1 - 3A_1^2 + 4A_2}{8} + \Gamma_0 \frac{a_1}{6}. \quad (1)$$

Здесь использованы разложения

$$p_c(\rho) = K \sum_{n=0}^{\infty} A_n x^{n+1}$$

кривой холодного давления и параметра Грюнаузена

$$\Gamma(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} \Gamma_m x^m,$$

где $K = \rho c^2$, ρ – плотность перед УВ, $A_0 = 1$. Сжатие в УВ равно $\rho_{sw}/\rho = 1 + x$. В [24] приведена совпадающая с (1) формула для a_1 .

Холодные кривые никеля и алюминия для объемного и одноосных сжатий по направлениям 100, 110, 111 находились путем квантовомеханических расчетов методом функционала плотности с помощью пакетов VASP и ABINIT (изложение квантовых вычислений выходит за рамки статьи). Коэффициенты $\Gamma_0 = 1/3 + A_1$, $\Gamma_1 = A_1 - 2A_1^2 + 3A_2$ и т.д. были вычислены по холодной кривой с помощью формулы Слетера [25]. Подсчитанные таким образом пластические ударные адиабаты алюминия ($c = 5.4$ км/с,

$a_1 = 1.4$) и никеля (4.6, 1.4) согласуются с данными экспериментов [24] с точностью 1% по c и 3% по a_1 . Анализ старших поправок a_2 и a_3 показывает, что в интересующем нас (в связи с упругими УВ) диапазоне до $u_p \sim 2$ км/с они несущественны. Для упругой ударной адиабаты алюминия 111 получаем $a_1 = 1.7$. Это значение соответствует величине $a_1 \approx 1.75$ по МД данным [7]. В случае никеля расчеты дают: $(c, a_1) = (5.3, 0.7)_{100}, (6, 1.7)_{110}, (6.2, 1.4)_{111}$.

На рис.4 представлены упругие ударные адиабаты никеля $D_{ijk} = c_{ijk} + a_{ijk} u_p$ вместе с пластической

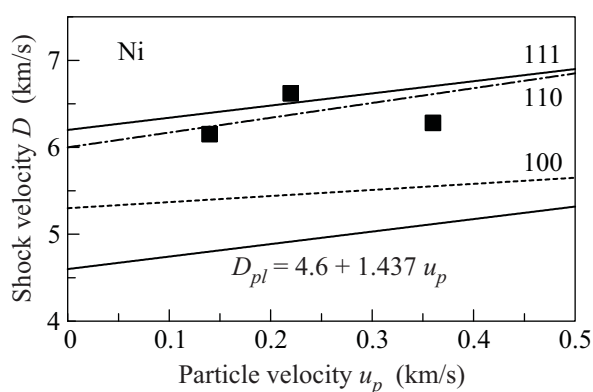


Рис.4. Сопоставление экспериментальных точек [2] с упругими (100, 110, 111) и пластической ударными адиабатами

адиабатой $D_{pl} = 4.6 + 1.437 u_p$ (скорости в км/с) и экспериментальными точками из табл. 1 в статье [2]; здесь индексы $ijk = 100, 110, 111$. Видим, что точки фемтосекундного эксперимента лежат далеко от пластической ударной адиабаты. Эти точки зажаты между упругими ударными адиабатами по направлению 100 снизу и направлениям 110 и 111 сверху. Отсюда следует, что в опытах [2] наблюдались упругие УВ. Эти волны существуют при давлениях, которые намного превышают значение p_{HEL} для никеля.

Заключение. В работе представлены результаты детального численного моделирования формирования и распространения ультракоротких УВ, возникающих в металлах под действием фемтосекундного лазера. Показано, что такие УВ могут иметь два скачка и обладать широкой эластической зоной одноосно-сжатого кристалла между упругим и пластическим скачками.

Авторы (И.Н.А и Х.В.А) благодарят Российский фонд фундаментальных исследований (грант # 09-08-00969-а). МД моделирование было проведено на NSF TeraGrid суперкомпьютерах Ranger и Kraken по гранту TG-MCA08X040.

1. R. Evans, A.D. Badger, F. Fallies et al., Phys. Rev. Lett. **77**, 3359 (1996).
2. K. T. Gahagan, D.S. Moore, D. J. Funk et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 3205 (2000).
3. V. V. Temnov, K. Sokolowski-Tinten, P. Zhou, and D. von der Linde, J. Opt. Soc. Am. B **23**, 1954 (2006).
4. М.Б. Агранат, Н.Е. Андреев, С.И. Ашитков и др., Письма в ЖЭТФ **85**, 328 (2007).
5. Li Huang, Yanqiang Yang, Yinghui Wang et al., J. Phys. D **42**, 045502 (2009).
6. С.И. Ашитков, М.Б. Агранат, Г.И. Канель и др., Письма в ЖЭТФ **92**, 568 (2010).
7. В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, Письма в ЖЭТФ **92**, 574 (2010).
8. М.Б. Агранат, С.И. Анисимов, С.И. Ашитков и др., Письма в ЖЭТФ **91**, 517 (2010).
9. B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, and I. I. Oleynik, Phys. Rev. B **82**, 064113 (2010).
10. G. I. Kanel', S. Razorenov, and V. E. Fortov, *Shock-Wave Phenomena and the Properties of Condensed Matter*, Springer, 2004.
11. J.R. Asay and M. Shahinpoor, Eds., *High-Pressure Shock Compression of Solids*, Springer, 1993.
12. Г.И. Канель, В.Е. Фортов, С.В. Разоренов, Успехи физ. наук **177**, 809 (2007).
13. T. Antoun, L. Seaman, D.R. Curran et al., *Spall Fracture*, Springer, 2003.
14. M. M. Budzevich, V. V. Zhakhovsky, I. I. Oleynik, and C. T. White, Phys. Rev. B (in preparation).
15. S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov et al., Appl. Phys. A **92**, 797 (2008).
16. V. V. Zhakhovsky, M. M. Budzevich, N. A. Inogamov et al., Science (in preparation).
17. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика*, М.: Наука, 1986.
18. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических процессов*, М.: Наука, 1966.
19. А. М. Молодец, Теплоф. выс. темпер. **40**, 521 (2002).
20. J. N. Johnson and L. M. Barker, J. Appl. Phys. **40**, 4321 (1969).
21. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, S. I. Ashitkov et al., Contr. Plasma Phys., n/a. doi: 10.1002/ctpp.201010111.
22. D. F. Price, R. M. More, R. S. Walling et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 252 (1995).
23. A. V. Bushman, G. I. Kanel', A. L. Ni, and V. E. Fortov, *Intense dynamic loading of condensed matter*, Taylor & Francis Transl., 1993.
24. R. F. Trunin, in: *High-Pressure Shock Compression of Solids VII*, Eds. V. E. Fortov et al., NY, Springer, 2004.
25. J. C. Slater, *Introduction to Chemical Physics*, NY, London: McGraw-Hill Book Comp. Inc., 1939.