Письма в ЖЭТФ, том 113, вып. 5, с. 311 – 319

Фемтосекундное лазерное воздействие на многослойную наноструктуру металл–металл

С. А. Ромашевский[+1)], *В. А. Хохлов*[*], *С. И. Ашитков*[+], *В. В. Жаховский*[+×], *Н. А. Иногамов*[+*×], *П. С. Комаров*[+], *А. Н. Паршиков*[+×], *Ю. В. Петров*[*∘], *Е. В. Струлева*[+], *П. А. Цыганков*[∇]

[+] *Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия*

[*] *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черноголовка, Россия*

[×] *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, 127055 Москва, Россия*

[∘] *Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия*

[∇] *Universidad Industrial de Santander, 680003 Bucaramanga, Colombia*

Поступила в редакцию 26 ноября 2020 г.
После переработки 24 января 2021 г.
Принята к публикации 25 января 2021 г.

В работе исследуется селективная модификация верхних слоев многослойной наноструктуры Ni/Al при однократном воздействии фемтосекундного лазерного импульса. Из анализа топографии поверхности следует, что в зависимости от поглощенной энергии возможно, как частичное, так и полное удаление двух верхних слоев. Сканирование поверхности осуществлялось атомным силовым микроскопом. Численное моделирование явления с использованием двухтемпературного гидродинамического кода обнаруживает несинхронную динамику электронных подсистем Ni и Al и неоднородный прогрев ионных подсистем. В результате инициируется сложная комбинация волн сжатия и разрежения в многослойной мишени. Численно продемонстрировано, что с ростом поглощенной энергии первоначально имеет место разрыв первого слоя никеля вследствие локализации растягивающих напряжений. Экспериментальные и численные значения толщины оторванного слоя и порогового значения энергии согласуются. Следовательно, параметры двухтемпературных моделей никеля и алюминия подобраны правильно.

DOI: 10.31857/S1234567821050049

Введение. Многослойные структуры (наноламинаты) состоят из чередующихся слоев наноразмерной толщины из двух или более материалов. Наноламинаты находят широкое применение во многих областях современной техники: это микроэлектроника, зеркала для фокусировки монохроматического мягкого рентгена (современная фотолитография), устройства фотовольтаики для солнечной энергетики, плазмоника и магнитоплазмоника [1–5]. За последние годы был достигнут значительный прогресс в селективной модификации многослойных наноматериалов с помощью фемтосекундных лазерных импульсов (ФЛИ) в интересах такого рода приложений [6–9].

Нагрев металла ФЛИ умеренной интенсивности $\sim 10^{12}$–10^{13} Вт/см^2 переводит металл в двухтемпературное состояние с горячей электронной и холодной ионной подсистемами. Процессы электрон-ионной термализации, переноса тепла и плавления поверхностного слоя сопровождаются акустическими явлениями: зарождением, распространением и интерференцией волн сжатия и разрежения с последующим формированием мощных растягивающих напряжений. При превышении порога прочности, растяжение приводит к отрыву тонкого поверхностного слоя и образованию абляционного кратера на поверхности [10–14]. Размеры зоны термического влияния минимальны, если использовать ФЛИ. Указанное обстоятельство имеет большое значение для развития технологий обработки перспективных пленочных наноматериалов.

В настоящее время проблемы селективной лазерной обработки наноламинатов изучены недостаточно (см. последний абзац введения). Это обусловлено разнообразием термодинамических и механических свойств соседних слоев, вариацией межслоевой адгезии и граничного термосопротивления. Все это существенно влияет на результаты микро/нанообработки, например, на возможность избирательного удаления требуемых слоев. Особенности транспорта и релак-

[1)]e-mail: sa.romashevskiy@gmail.com

сации поглощенной энергии, а также интерференция отраженных от контактных границ акустических волн приводят к сложной морфологии модифицированных слоев.

При близких значениях акустических импедансов, как в структуре полупроводник–металл Si/Al [15], разрыв происходил на контактных границах, поскольку величина адгезии слоев меньше их объемной прочности. При различии импедансов и сильной адгезии (это специфика систем металл–металл) ситуация существенно усложняется. В данном случае важную роль играют как термодинамические и транспортные свойства слоев, так и последовательность их чередования [16–20]. В этих важных работах детально изучены системы Ti/Al, Ni/Ti и Ag/Cu.

В опытах [21] было продемонстрировано, что для пленок Ni (с толщиной несколько десятков нанометров) отрыву пленки от подложки предшествует откол внутри нее. По сути, именно для пленки толщиной 20 нм обнаружен частичный откол на глубине 7–10 нм (для объемной мишени из никеля минимальная глубина кратера составляет 20 нм).

Кроме перечисленных выше приложений (электроника, литография, фотовольтаика), интерес к лазерному воздействию на ламинат Ni/Al связан с экзотермическими реакциями при образовании интерметаллидов NiAl, $NiAl_3$, Ni_3Al [22, 23]. Поэтому такой ламинат может рассматриваться как энергетический материал. Реакция протекает при диффузионном смешивании на контактной границе никеля и алюминия в сплав на атомарном уровне. Сплав распадается на кристаллиты интерметаллидов. Тепловой эффект реакции значительный, но заметно меньше теплоты реагирования химических взрывчатых веществ. Тепловой эффект определяется энергией усиления металлической связи между атомами Ni и Al в интерметаллиде по сравнению с чистыми металлами Ni и Al.

В настоящей работе экспериментально и теоретически исследуется лазерная модификация многослойной структуры Ni/Al (чередующиеся слои никеля и алюминия, 1-й слой – никель). Продемонстрирована возможность частичного либо полного удаления верхних слоев структуры при варьировании энергии ФЛИ. Проведенное численное моделирование показало хорошее совпадение расчетных значений глубины и порога откола с полученными экспериментальными данными. В работе для моделирования абляционных процессов в многослойных структурах при воздействии ФЛИ впервые был применен двухтемпературный гидродинамический код, позволивший получить новые данные о распространении акустических возмущений, аномальном поведении электронного теплового потока, фазовому составу слоев в момент разрыва, величине и локализации соответствующих растягивающих напряжений.

В перечисленных выше предыдущих исследованиях авторы обычно ограничивались экспериментом. Если же работа содержала расчеты, то для моделирования наноламинатов применялась либо молекулярная динамика [20, 24] (мишень состояла из одного или двух слоев), либо двухтемпературная модель в одномерной или двухмерной геометрии [17, 25, 26], но без учета гидродинамических явлений. Между тем, как будет видно ниже, гидродинамика играет определяющую роль при разрушении мишени (термомеханическая абляция).

Лазерный эксперимент. Исследуемым образцом служила многослойная структура Ni/Al общей толщиной 1.28 мкм, состоящее из двух верхних слоев Ni (1) толщиной ≈ 46 нм и Al (2) толщиной ≈ 50 нм, 28 чередующихся слоев Ni и Al толщиной 28 нм каждый и базового слоя Ni толщиной 400 нм. Эта структура была нанесена на кварцевую подложку толщиной 120 мкм. Модификация наноразмерных бислоев металл–металл была реализована с помощью локализованного воздействия излучения линейно поляризованных лазерных импульсов иттербиевого лазера длительностью 270 фс на длине волны 1028 нм. Лазерный луч фокусировался по нормали к поверхности образца в пятно с гауссовым пространственным распределением диаметром 3 мкм на уровне $1/e$ с помощью 20-кратного микрообъектива.

Таблица 1. Пороги абляции $F_a^{\rm in}$ по падающему флюенсу, глубины отколов h, и шероховатости R_a на границах разрыва

	$F_a^{\rm in}$, Дж/см^2	h, нм	R_a, нм
$F_{a1}^{\rm in}$ внутри слоя Ni (1)	0.14	19 ± 3	8.6 ± 0.8
$F_{a2}^{\rm in}$ между слоями Ni(1) и Al(2)	0.73	46 ± 5	6.0 ± 0.2
$F_{a3}^{\rm in}$ внутри слоя Al (2)	1.83	71 ± 3	4
$F_{a4}^{\rm in}$ между слоями Al(2) и Ni(3)	3.11	96 ± 3	5

Поверхность образца облучалась через воздух одиночными лазерными импульсами в широком диапазоне плотностей энергии $F_0 = 0.4{-}21$ Дж/см^2 (где F_0 – плотность энергии падающего лазерного излучения в центре фокального пятна). Модифицированные области мишени исследовались с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) марки Veeco Multimode 5 в контактном режиме и оптического микроскопа Olympus. Разрешение АСМ по глубине составляло 0.05 нм. Энергия падающих лазерных импульсов измерялась с погрешностью 2 %. Эксперименты были выполнены на оборудовании центра коллективного пользования (ЦКП) "Фемтосекундный лазерный комплекс" Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН).

На рисунке 1 приведены результаты измерений морфологии модифицированной поверхности многослойной структуры Ni/Al после однократного воздействия ФЛИ с различной плотностью энергии F_0. В правой колонке также приведены изображения кратеров на поверхности, полученные с помощью оптического микроскопа.

При плотности энергии лазерного излучения 0.42 Дж/см^2 происходит частичная абляция верхнего слоя Ni (1) в виде двухуровневого концентрического кратера глубиной 30 нм в центре и 19 нм на периферии (рис. 1a). Кратер окружен бортиком (rim), характерным для термомеханической абляции металлов, и является следствием кавитационного расширения расплава вблизи абляционного порога [27]. С ростом плотности энергии ФЛИ (рис. 1b) глубина центральной области кратера увеличивается до 46 нм, достигая границы раздела слоев Ni (1) и Al (2). При этом глубина внешнего кратера остается на уровне 19 нм.

При дальнейшем увеличении F_0 (рис. 1c) структура кратера становится трехуровневой. Глубина в центральной части кратера достигает примерно 71 нм, при этом его дно находится внутри слоя Al (2). Глубины же двух периферийных уровней остаются примерно теми же. На оптических изображениях (рис. 1a, b) светлая область в центральной части кратеров обусловлена высоким отражением алюминия на границе раздела слоев. Темная центральная область на рис. 1c, очевидно, связана с меньшей отражательной способностью наноструктурированной поверхности алюминия [28] после разрыва внутри слоя Al(2). Этим же объясняется темное внешнее кольцо на рис. 1a–c, являющееся следствием абляции внутри слоя Ni(1).

Исходная шероховатость поверхности образца по данным АСМ составляла $R_a = 4.6$ нм. Шероховатость на границе разрыва слоев Ni (1)/Al (2) всего на 30 % превышала исходное значение (табл. 1). Шероховатость на границе разрыва слоев Al(2)/Ni(3) была примерно аналогичной, но ее точное измерение было затруднено из-за малой величины площади откола.

На рисунке 2 приведены зависимости поперечного размера многоуровневых кратеров от логарифма энергии ФЛИ. Эти зависимости используются для определения пороговых значений и параметров гауссова пучка по известной методике [29]. Квадратные маркеры соответствуют отколу внутри верхнего слоя Ni (1), круглые – на границе слоев Ni (1) и Al (2), треугольные – внутри слоя Al (2). Результаты измерений глубин и порогов при модификации многослойной структуры суммированы в табл. 1.

В таблице 1 пороги абляции даны по падающей плотности энергии (флюенсу). Согласно работам [30, 31], коэффициент отражения Ni при нормальном падении на длине волны 1028 нм равен $R = 0.73$. Соответственно, значение первого порога по поглощенной плотности энергии будет составлять $F_{a1}^{\rm abs} = (1 - R)F_{a1}^{\rm in} \approx 0.04$ Дж/см^2; верхний индекс "in" в обозначении $F_{a1}^{\rm in}$ указывает на то, что это *падающая* на мишень энергия, $F_{a1}^{\rm abs}$ – это поглощенная в мишени энергия, чтобы различать падающую и поглощенную энергии, используем индексы "in" и "abs". Отметим, что приведенное значение F_{a1} для нашего ламината в три раза меньше значения порога абляции для массивной мишени никеля, измеренного в работе [32]. Причина низкой величины первого порога откола внутри слоя Ni(1) будет рассмотрена ниже.

Численное моделирование. Быстрый лазерный нагрев металла с помощью ФЛИ ведет к резкому превышению электронной температуры T_e над ионной температурой T_i (двухтемпературность). Это в свою очередь ведет к значительному росту электронной теплопроводности (по сравнению с однотемпературными значениями из справочников) на временах, меньших характерного времени электрон-фононного теплообмена [33–35]. Кроме того, при описании явлений при высокой энергетике лазерного воздействия, вызывающего абляцию материала мишени, существенную роль начинают играть гидродинамические процессы смещения, сжатия и растяжения вещества.

В приведенных ниже расчетах лазерной модификации многослойной структуры Ni/Al используется разработанный нами ранее двухтемпературный гидродинамический (2Т-ГД) код; см., например, [36, 37]. Данная работа ограничивается расчетом первого порога $F_{a1}^{\rm abs}$ и соответствующей ему глубины кратера. В расчетах используется пластическое приближение. Сквозное описание твердой и жидкой фаз необходимо, поскольку имеет место плавление и кристаллизация вещества.

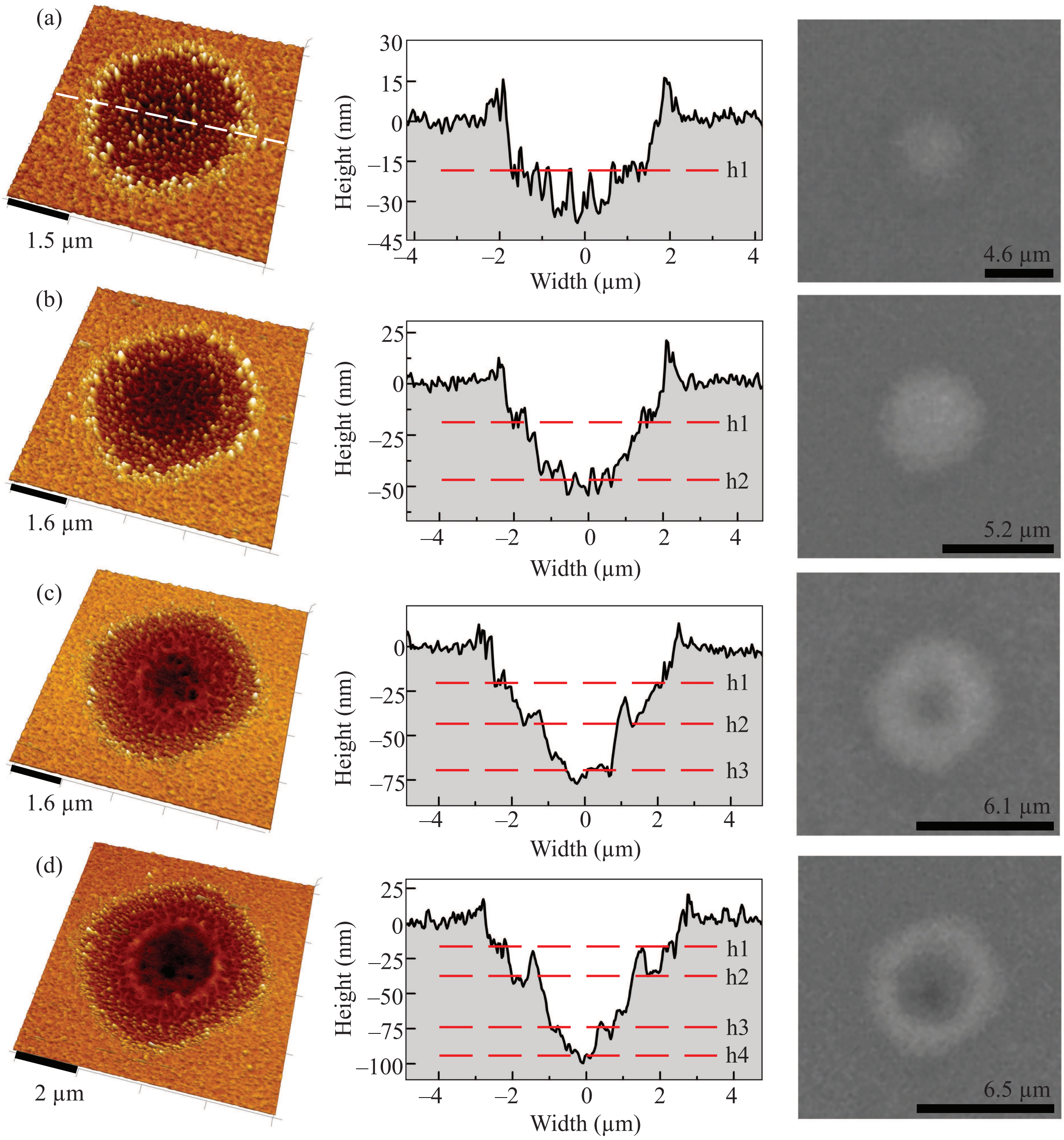

Рис. 1. (Цветной онлайн) Модификация многослойной структуры после однократного воздействия ФЛИ с различной плотностью энергии F_0: (a) – 0.42 Дж/см^2; (b) – 1.07 Дж/см^2; (c) – 2.27 Дж/см^2; (d) – 3.12 Дж/см^2. Слева приведены сканы АСМ, в центре – сечения кратеров, справа – их оптические изображения

Сравнение расчетов с результатами описанного выше эксперимента позволяет оценить адекватность применяемой физической модели. Для многослойной мишени подобные расчеты (с учетом гидродинамики) проводятся впервые. В будущем с применением такого проверенного подхода будет выполнено численное моделирование для определения второго порога F_{a2}^{abs}, а также силы адгезии на контакте между слоями никеля и алюминия.

Сопоставим характеристики никеля и алюминия, существенные для описания ультракороткого воздействия.

Во-первых, при нормальной плотности теплоемкость $C_e(T_e, \rho)$ электронной подсистемы никеля на порядок больше. Это связано со структурой элек-

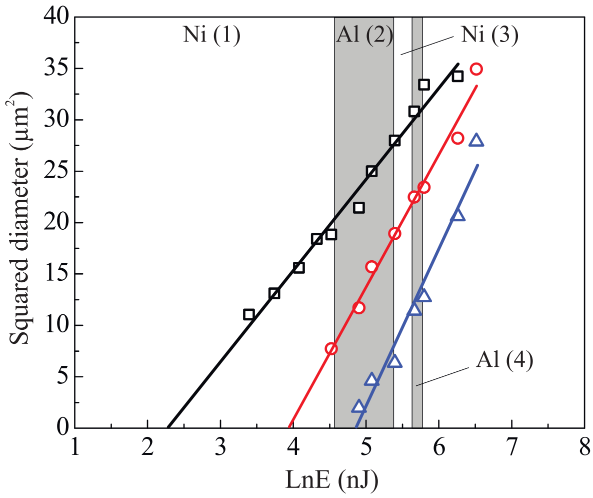

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости поперечного размера многоуровневых кратеров на поверхности Ni/Al структуры от энергии ФЛИ

тронного спектра никеля $3d^{8-9}4s^{2-1}$ по сравнению с алюминием $3s^2 3p^1$. У никеля имеется намного более густой спектр электронных состояний ниже и выше уровня Ферми по сравнению с алюминием. Из-за разницы в теплоемкости C_e электронная температура T_e никеля ниже, чем в алюминии, при равных плотностях электронной энергии на единицу объема.

Во-вторых, ионная теплоемкость никеля C_i на единицу объема в 1.5 раза выше, чем у алюминия. Если не учитывать процессы теплопроводности, то данное обстоятельство является причиной более высоких ионных температур T_i в алюминии при равных плотностях ионной энергии на единицу объема.

Наконец, в-третьих, никель существенно жестче довольно мягкого алюминия, акустический импеданс которого втрое меньше.

С отмеченной выше разностью теплоемкостей C_e связана аномалия профилей электронной температуры на ранней стадии (рис. 3). Видно, что привычный ход с убыванием температуры T_e вглубь мишени нарушен. А именно, появляется инверсный участок, на котором электронный тепловой поток $q_e = -\kappa \partial T_e/\partial x$ течет не в толщу мишени, а в обратном направлении – в сторону фронтальной (т.е. облучаемой) поверхности. Инверсия потока локализована в окрестности контакта, поскольку на контакте происходит скачок теплоемкости C_e. Кривая, показанная на рис. 3a, b малиновым цветом, представляет мгновенный (на момент $t = 0$) профиль потока q_e. Максимум обратного потока располагается на контактной границе. Синяя кривая соответствует мгновенному ($t = 0$) профилю плотности электронной энергии в расчете на единицу объема. Красная кривая на рис. 3b – это электронная температура.

Время в расчетах отсчитывается от максимума интенсивности лазерного импульса $I(t) \propto \exp(-t^2/\tau_L^2)$, где ширина импульса по уровню $1/e$ равна $2\tau_L = 100$ фс. К моменту $t = 0$ в мишень введена половина поглощенной энергии ФЛИ F^{abs}. Излучение поглощается согласно закону Бугера с длиной затухания $\delta = 20$ нм: где $I(x,t) \propto \exp(-t^2/\tau_L^2)\exp(-x/\delta)$. На рисунке 3 показан вариант с поглощенной энергией $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см^2. На момент $t = 0$ немонотонность температуры T_e наблюдается во всей серии расчетов с $F^{\text{abs}} = 35$, 40, 50 и 60 мДж/см^2.

Начальная электронная энергия наноламината $E_e(x, t = -\infty)$, находившегося при комнатной температуре, ничтожна по сравнению с приобретенной энергией $E_e(x, t = 0)$. Профили I/δ [Вт/см^3] (малиновые точки) и E_e [Дж/см^3] (синяя кривая) на рис. 3a совмещены искусственно. Понятно, что эти профили подобны $E_e(x,t) = \int_{-\infty}^{t} dt'\, I(x,t')/\delta$, если в среде несущественны перетоки энергии и объемное охлаждение. Значительное нарушение подобия между I/δ и E_e обусловлено перетоком поглощаемой энергии из алюминия в никель, хотя на границе тепловыделение I/δ непрерывно.

Отметим, что электронный тепловой поток q_e составляет единицы ГВт/см^2 (см. рис. 3), а поглощаемая интенсивность светового потока на два порядка больше. Таким образом, во время действия лазерного импульса, энергии в скин-слой δ прибывает в единицу времени на два порядка больше, чем отводится за счет электронной теплопроводности. Поэтому, во-первых, электронная температура нарастает во время импульса, и, во-вторых, отвод тепла из скин-слоя продолжается после окончания импульса. Но перенести за счет потока q_e заметное количество энергии из никеля в подстилающий слой алюминия при нашей толщине слоя никеля (это поглощающий свет 1-й слой) нельзя, см. профиль температуры T_e на рис. 4 в момент 2 пс.

Дело в том, что электрон-ионная релаксация протекает в никеле за время t_{eq} примерно 3–4 пс. После этого теплопроводность существенно снижается. Поэтому за время порядка длительности акустической стадии $t_s = d_f/c_s \approx 10$ пс нет заметного нагрева слоя алюминия Al(2) за счет тепла слоя Ni(1); здесь d_f и c_s – это толщина 1-го слоя никеля Ni(1) и скорость звука. На акустической стадии происходит механический разрыв (если энергия F^{abs} выше порога). После этого остывание наружных слоев за счет передачи в

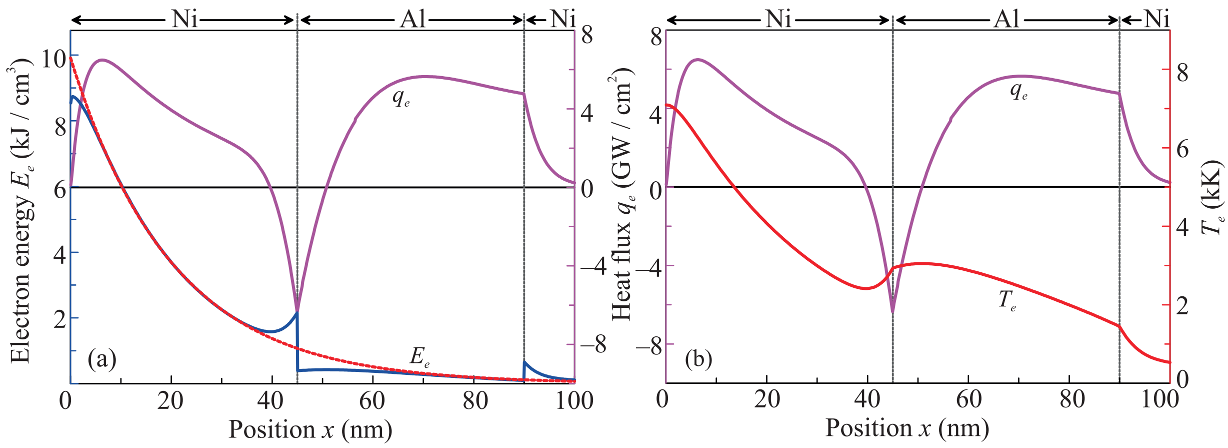

Рис. 3. (Цветной онлайн) Момент времени $t = 0$ – мишень поглотила половину от предназначенной ей энергии F^{abs}, равной 40 мДж/см^2. (a) – Красными точками показан мгновенный профиль мощности диссипации энергии лазерной электромагнитной волны $I/\delta \propto \exp(-t^2/\tau_L^2)\exp(-x/\delta)$ Вт/см^3 с передачей мощности в энергию электронной подсистемы. Тепловой поток q_e показан малиновой кривой. Электронная энергия — это синяя кривая. (b) – Профиль T_e – красная кривая. Нарушение монотонного хода температуры T_e связано с инверсией потока q_e

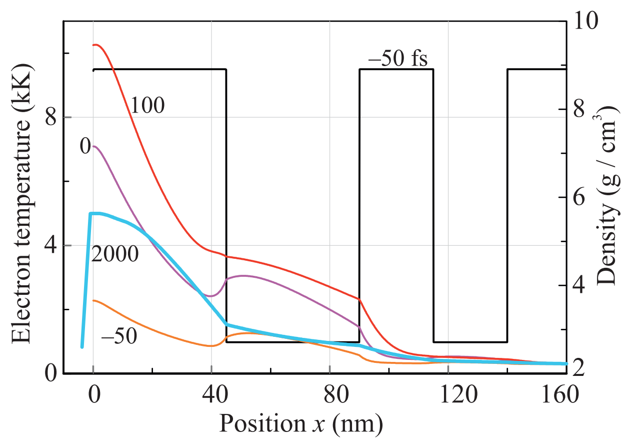

Рис. 4. (Цветной онлайн) Ступенчатая кривая дает профиль плотности на момент $t = -50$ фс; цифры у зависимостей – суть время в фс, $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см^2. Видим, как эволюционирует профиль электронной температуры $T_e(x,t)$. При эволюции немонотонность исчезает и небольшое дополнительное количество энергии передается за счет теплопроводности в слой алюминия Al(2)

толщу мишени не влияет на интересующую нас толщину h унесенного абляцией слоя.

На ранних временах степень немонотонности выше, см. рис. 4. Действительно, сравним отношение $\Delta T_e/T_e|_s$ на моменты времени -50 фс и 0 на рис. 4; здесь $T_e|_s$ – температура поверхности в соответствующий момент времени, ΔT_e – разность температур между локальным максимумом и локальным минимумом профиля T_e; минимум и максимум находятся слева и справа в окрестности контакта никель-алюминий. Видим, что это отношение равно 0.18 для момента $t = -50$ фс и 0.09 для $t = 0$. Цифры у профилей на рис. 4 указывают время в фемтосекундах. Аномальное поведение температуры T_e (нарушение монотонности) продолжается недолго. Это обусловлено малостью количества световой энергии, попадающей в алюминий через слой никеля. За счет теплопроводности в алюминий поступает больше энергии, чем пришло с электромагнитной волной. Уже к первой пикосекунде после ультракороткого лазерного воздействия профили электронной температуры и электронного потока энергии принимают обычный монотонный вид, см. рис. 4.

Определяющее гидродинамическое движение начинается на акустической стадии, на временах начиная с нескольких пикосекунд. Движение заключается в распространении волны сжатия и волны разрежения от границы с вакуумом в толщу ламината. Нас интересует процесс разрыва первого слоя никеля. Разрыв происходит при флюенсе F_{a1} (см. табл. 1), когда растягивающее напряжение начинает превосходить прочность никеля.

Для инициации процесса разрушения важное значение имеет фазовый состав вещества, поскольку прочность вещества на разрыв (термомеханическая абляция) при растяжении существенно уменьшается при плавлении [38, 39]. На рисунке 5 показано фазовое состояние слоев многослойной структуры на стадии, когда передача энергии из электронной подсистемы в ионную подсистему практически завершена. Буквой "s" обозначена граница конденсированной фазы. Левее этой границы находится испа-

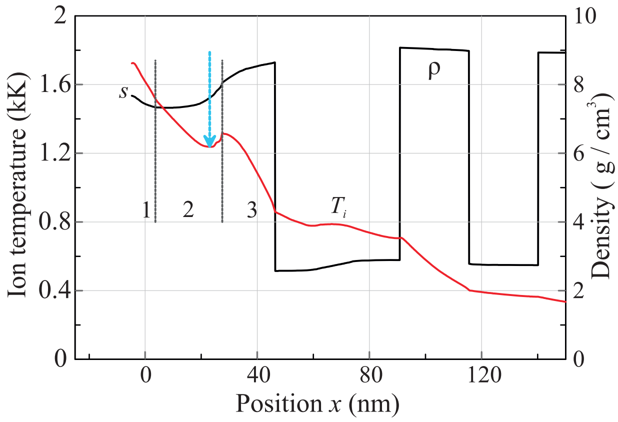

Рис. 5. (Цветной онлайн) Фазовые состояния слоев: 1 – расплав, 2 – двухфазная смесь жидкой и твердой фаз, кристаллическая фаза располагается правее вертикальной прямой, разделяющей слои 2 и 3. Показаны профили ионной температуры T_i (красная кривая) и плотности ρ (черная ступенчатая кривая); $t = 14$ пс, вариант расчета с $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см^2 и без возможности разрыва вещества

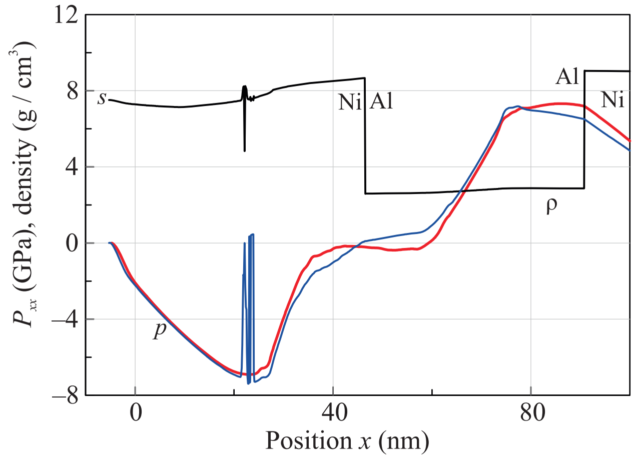

Рис. 6. (Цветной онлайн) Профили давления (красная и синяя кривые) и плотности (черная кривая) в момент $t = 14$ пс, при $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см^2. Плотность испытывает скачки на контактах между Ni и Al. Представлены результаты, полученные по версиям кода без учета (красная кривая) и с учетом разрыва (синяя и черная кривые). В зоне разрыва плотность начинает резко снижаться, растягивающее напряжение обращается в нуль (разгрузка при разрыве). Разрыв происходит там, где находится минимум красной кривой

ренное вещество. В случае с поглощенной энергией $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см^2 пара мало, его массовая толщина составляет $0.9 \cdot 10^{-7}$ г/см^2 – это 0.02 % от массы слоя 1-го слоя никеля. На момент, показанный на рис. 5, толщина парового слоя примерно 15 нм. Цифрами 1 и 2 отмечены соответственно слои жидкости и смеси жидкость–кристалл. Если энергию $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см^2 равномерно распределить по слою никеля с начальной толщиной 45 нм, то этой энергии хватит, чтобы расплавить слой и поднять его температуру на несколько сот градусов выше температуры плавления.

На рисунке 5 правая граница смеси (слой 2) движется направо со скоростью 450 м/с. Небольшое снижение температуры левее этой границы связано с расходами на плавление и с растяжением вещества (растяжение приводит к снижению температуры плавления $T_m(p)$ и, следовательно, облегчает плавление [40]). Минимум температуры, отмеченный голубой стрелкой на рис. 5, находится точно в минимуме давления на красной кривой на рис. 6 (красная кривая – это расчет без учета возможности разрыва вещества). Наше гидродинамическое моделирование с широкой зоной смеси (широкой на пикосекундных временах) хорошо согласуется с молекулярно-динамическими расчетами, явно учитывающими кинетику плавления [40, 41]. Приближение Стефана в такой ситуации неприменимо; в этом приближении смеси нет, фронт плавления тонкий, а разница градиентов температуры равна скорости движения фронта по веществу, помноженной на теплоту плавления в расчете на единицу объема. В нашем подходе используются широкодиапазонные уравнения состояния никеля и алюминия [42–44]. Это позволяет аккуратно и в сквозном режиме счета при фазовых превращениях учитывать теплоты испарения и плавления.

На рисунке 6 показаны профили плотности (черная кривая) и давления p (синяя и красная кривые). Профили p приведены для двух версий расчетов. В 1-й версии возможности разрыва нет – красная кривая на рис. 6. Во 2-й версии такая возможность добавлена. Для сравнения результатов необходимы рис. 5–7. Профили плотности для 2-х версий представлены на рис. 5 и 6 (черные кривые со ступеньками). Профили давления p для 2-х версий изображены на рис. 6 (красная и синяя кривые).

Как видим, имеется весьма впечатляющая особенность, различающая версии. Она связана с внутренним разрывом никеля. На момент 14 пс разрыв только зарождается. Поэтому зона разрыва является очень узкой. От разрыва направо и налево бегут скачки разгрузки – снятие растягивающего напряжения происходит “скачком” от конечной величины до нуля. В природе это связано с быстрым (субпикосекундным) развитием процесса нуклеации зародышей. В расчете разрыв происходит на одном шаге интегрирования по времени – по достижении критерия разрыва. Скачки разгрузки называются также откольными импульсами. Вещество снаружи от скачков о разрыве "не знает". Разрыв происходит в минимуме давления (красная кривая на рис. 6). С этим минимумом связан минимум температуры на рис. 5 – отмечен голубой стрелкой.

Согласно работе [38] прочность жидкой фазы σ убывает с ростом температуры и вблизи температуры плавления T_m при реализуемых скоростях растяжения $\sim 3 \cdot 10^9\,\text{с}^{-1}$ составляет около 8 ГПа. Данная величина в пределах 10 % погрешности согласуется с расчетным значением растягивающих напряжений на рис. 6. Для более точного определения прочности необходимы дополнительные молекулярно-динамические расчеты. Массовая толщина откольной пластины определена на рис. 7. За

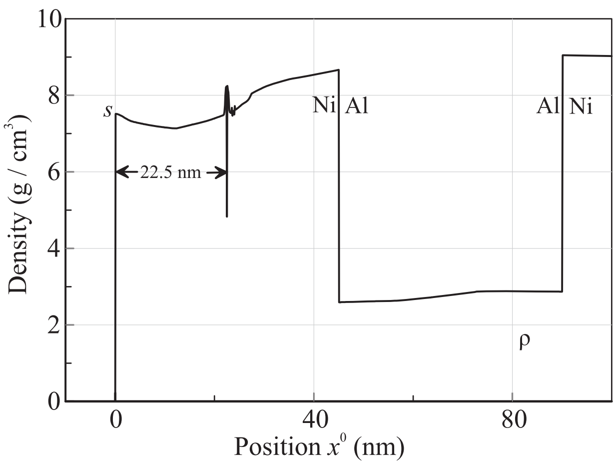

Рис. 7. Версия с учетом возможности разрыва. Начало формирования разрыва. Мгновенный ($t = 14$ пс) профиль плотности, как функция лагранжевой координаты x°. На предыдущем рисунке этот же профиль дан в зависимости от эйлеровой координаты x. Координата x° позволяет точно определить массу оторвавшегося (аблировавшего) слоя $\rho_0 \times 22.5$ нм, здесь ρ_0 – начальная плотность никеля

лагранжеву координату x° принята пространственная позиция материальных частиц относительно границы с вакуумом до воздействия лазера. Полученные численно данные о пороге разрыва по энергетике $F_{a1}^{\text{abs}} = 0.04\,\text{Дж/см}^2$ (при коэффициенте отражения R) и глубине $h = 22.5$ нм (рис. 7) хорошо согласуются с $h = 19 \pm 3$ нм из эксперимента, см. табл. 1.

Заключение. В работе исследованы особенности модификации многослойной структуры, состоящей из последовательности наноразмерных слоев никеля и алюминия. Модификация осуществляется с помощью фемтосекундных лазерных импульсов. Экспериментально найдено, что первый разрыв происходит внутри верхнего слоя никеля, а не на контакте двух верхних слоев. Причиной этого является интерференция волн разрежения, движущихся навстречу друг другу от свободной поверхности образца и от границы никеля с алюминием. При этом, по данным моделирования, никель в области наибольшего растяжения находится в состоянии двухфазной смеси. Расчетная величина первого порога и глубины откола хорошо согласуется с экспериментальными значениями. Теоретически показано наличие инверсного поведения электронного теплового потока в области границы между верхними слоями на начальной двухтемпературной стадии. Это явление несколько ослабляет нагрев алюминия.

Авторы (С. А. Ромашевский, С. И. Ашитков, П. С. Комаров, Е. В. Струлева (экспериментальная часть) и В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, А. Н. Паршиков (теоретическая часть)) благодарят Российский научный фонд (грант # 19-19-00697) за поддержку. Работа В. А. Хохлова и Ю. В. Петрова (гидродинамическое моделирование) выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН # 075-15-2020-785).

1. J. A. Syed, S. Tang, and X. Meng, Sci. Rep. **7**, 4403 (2017).
2. S. J. Bull and A. M. Jones, Surf. Coat. Technol. **78**, 173 (1996).
3. М. М. Барышева, А. Е. Пестов, Н. Н. Салащенко, М. Н. Торопов, Н. И. Чхало, УФН **182**, 727 (2012).
4. V. V. Temnov, Nature Photon. **6**, 728 (2012).
5. V. V. Temnov, C. Klieber, K. A. Nelson, T. Thomay, V. Knittel, A. Leitenstorfer, D. Makarov, M. Albrecht, and R. Bratschitsch, Nat. Commun. **4**, 1468 (2013).
6. C.-Yu Chen and T.-Li Chang, Microelectron. Eng. C **143**, 41 (2015).
7. B. Gakovic, C. Radu, M. Zamfirescu, B. Radak, M. Trtica, S. Petrovic, P. Panjan, F. Zupanic, C. Ristoscu, and I. N. Mihailescu, Surf. Coatings Technol. **206**, 411 (2011).
8. M. Ulmeanu, M. Filipescu, N. D. Scarisoreanu, G. Georgescu, L. Rusen, and M. Zamfirescu, Appl. Phys. A **104**, 247 (2011).
9. N. L. LaHaye, J. Kurian, P. K. Diwakar, L. Alff, and S. S. Harilal, Sci. Rep. **5**, 13121 (2015).
10. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, С. И. Ашитков, Ю. В. Петров, М. Б. Агранат, С. И. Анисимов, К. Нишихара, and В. Е. Фортов, ЖЭТФ **134**, 5 (2008).
11. M. E. Povarnitsyn, T. E. Itina, M. Sentis, K. V. Khishchenko, and P. R. Levashov, Phys. Rev. B **75**, 235414 (2007).

12. П. А. Данилов, Д. А. Заярный, А. А. Ионин, С. И. Кудряшов, Ч. Т. Х. Нгуен, А. А. Руденко, И. Н. Сараева, А. А. Кучмижак, О. Б. Витрик, Ю. Н. Кульчин, Письма в ЖЭТФ **103**, 617 (2016).
13. Н. А. Смирнов, С. И. Кудряшов, П. А. Данилов, А. А. Руденко, А. А. Ионин, А. А. Настулявичус, Письма в ЖЭТФ **108**, 393 (2018).
14. Н. А. Иногамов, В. А. Хохлов, В. В. Жаховский, Письма в ЖЭТФ **108**, 470 (2018).
15. S. A. Romashevskiy, P. A. Tsygankov, S. I. Ashitkov, and M. B. Agranat, Appl. Phys. A **124**, 376 (2018).
16. B. Gaković, S. Petrović, C. Albu, M. Zamfirescu, P. Panjan, D. Milovanović, G. Popescu-Pelin, and I. N. Mihailescu, Optics & Laser Technology **89**, 200 (2017).
17. B. Gaković, G. D. Tsibidis, E. Skoulas, S. M. Petrović, B. Vasić, and E. Stratakis, J. Appl. Phys. **122**, 223106 (2017).
18. S. I. Kudryashov, B. Gakovic, P. A. Danilov, S. M. Petrovic, D. Milovanovic, A. A. Rudenko, and A. A. Ionin, Appl. Phys. Lett. **112**, 023103 (2018).
19. S. Petrović, B. Gaković, M. Zamfirescu, C. Radu, D. Peruško, B. Radak, C. Ristoscu, S. Zdravković, C. L. Luculescu, and I. N. Mihailescu, Appl. Surf. Sci. **417**, 16 (2017).
20. A. Naghilou, M. He, J. S. Schubert, L. V. Zhigilei, and W. Kautek, Phys. Chem. Chem. Phys. **21**, 11846 (2019).
21. R. D. Murphy, B. Torralva, and S. M. Yalisove, Appl. Phys. Lett. **102**, 181602 (2013).
22. J. Roth, H.-R. Trebin, A. Kiselev, and D.-M. Rapp, Appl. Phys. A **122**, 500 (2016).
23. V. Turlo, O. Politano, and F. Baras, J. Appl. Phys. **121**, 055304 (2017).
24. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, and K. P. Migdal, Nanoscale Res. Lett. **11**, 177 (2016).
25. S. Zhou, K. Zhao, and H. Shen, Optics & Laser Technology **132**, 106495 (2020).
26. V. V. Shepelev and N. A. Inogamov, J. Phys: Conf. Ser. **946**, 012010 (2018).
27. 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).
28. С. И. Ашитков, С. А. Ромашевский, П. С. Комаров, А. А. Бурмистров, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, М. Б. Агранат, Квантовая электроника **45**, 547 (2015).
29. J. M. Liu, Opt. Lett. **7**, 196 (1982).
30. M. A. Ordal, R. J. Bell, R. W. Alexander, L. L. Long, and M. R. Querry, Appl. Opt. **2**, 744 (1987).
31. A. D. Rakić, A. B. Djurišić, J. M. Elazar, and M. L. Majewski, Appl. Opt. **37**, 5271 (1998).
32. Е. В. Струлева, П. С. Комаров, С. И. Ашитков, ТВТ **57**, 689 (2019).
33. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, 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, Contributions to Plasma Physics **51**, 367 (2011).
34. Ю. В. Петров, Н. А. Иногамов, К. П. Мигдал, Письма в ЖЭТФ **97**, 24 (2013).
35. Ю. В. Петров, Н. А. Иногамов, Письма в ЖЭТФ **98**, 316 (2013).
36. S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov, V. V. Zhakhovskii, K. Nishihara, M. B. Agranat, S. I. Ashitkov, and P. S. Komarov, Appl. Phys. A **92**, 939 (2008).
37. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, ЖЭТФ **154**, 92 (2018).
38. A. E. Mayer and P. N. Mayer, J. Appl. Phys. **118**, 035903 (2015).
39. P. N. Mayer and A. E. Mayer, J. Appl. Phys. **124**, 035901 (2018).
40. B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, and I. I. Oleynik, Phys. Rev. B **87**, 054109 (2013).
41. 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).
42. A. V. Bushman, G. I. Kanel', A. L. Ni, and V. E. Fortov, *Intense dynamic loading of condensed matter*, Taylor & Francis, Washington, D.C. (1993).
43. K. V. Khishchenko, S. I. Tkachenko, P. R. Levashov, I. V. Lomonosov, and V. S. Vorobev, Int. J. Thermophys. **23**, 1359 (2002).
44. I. V. Lomonosov, Laser Part. Beams **25**, 567 (2007).