Письма в ЖЭТФ, том 115, вып. 9, с. 576 – 584 

# Плавление титана ударной волной, вызванной мощным фемтосекундным лазерным импульсом

*В. А. Хохлов*[a], *В. В. Жаховский*[b,c], *Н. А. Иногамов*[a,b,c1)], *С. И. Ашитков*[c], *Д. С. Ситников*[c,d], *К. В. Хищенко*[c,d,e,f], *Ю. В. Петров*[a,d], *С. С. Манохин*[e], *И. В. Неласов*[e], *В. В. Шепелев*[g], *Ю. Р. Колобов*[e]

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

[b] *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, Росатом, 127030 Москва, Россия*

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

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

[e] *Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка, Россия*

[f] *Южно-Уральский государственный университет, 454080 Челябинск, Россия*

[g] *Институт автоматизации проектирования РАН, 123056 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 6 апреля 2022 г.
После переработки 6 апреля 2022 г.
Принята к публикации 7 апреля 2022 г.

Лазерная ковка с помощью ультракоротких лазерных импульсов (УКЛИ) исследуется методами гидродинамического и атомистического моделирования, а также экспериментально. Показано, что в отличие от традиционных наносекундных импульсов, УКЛИ позволяет поднять уровень создаваемых давлений на 2–3 порядка с 1–10 ГПа до 1000 ГПа (1 ТПа). При этом физика явлений меняется принципиально, так как ударные волны (УВ) с давлениями, превышающими объемный модуль сжатия металла, плавят его. Впервые показано, что при давлениях $\sim 1$ ТПа глубина ударного плавления на порядок превышает толщину слоя расплава за счет теплопроводности. Изучено возникновение, распространение и затухание плавящей УВ в титане. Затухание УВ позволяет модифицировать подповерхностный слой, в котором происходит смена режимов плавления от быстрого в УВ-скачке к медленному распространению фронта плавления в хвосте разгрузки за УВ. Экспериментально показано, что при сверхбыстрой кристаллизации расплава формируется твердый слой со структурой, резко отличной от той, которая была до воздействия. Измеренная глубина этого слоя хорошо согласуется с расчетом.

DOI: 10.31857/S1234567822090051

**1. Введение.** Лазерная ковка (*laser shock peening*, LSP) – это индустриальная технология существенного поверхностного упрочнения изделий. Имеется достаточное число научно-промышленных групп, которые отрабатывают соответствующие заказы. В кратком перечне – компании Китая, Франции, Чехии[2)], и Ирландии[3)]. В январе 2022 г. появилось сообщение[4)] о полном LSP-упрочнении военного самолета. При стоимости самолета в \$100 млн. увеличение длительности его эксплуатации в 1.5–2 раза дает экономический выигрыш в \$50–100 млн. Этот выигрыш на 2 порядка превосходит затраты на его LSP-обработку – смотрите стоимость LSP-работ[3)].

Имеются две версии LSP. Разница между ними в длительности используемых лазерных импульсов. С одной стороны, это наносекундная (нс) ковка (нс-LSP) [1–4], с другой – относительно молодое ответвление, в котором применяются ультракороткие лазерные импульсы (УКЛИ) – импульсы фемтосекундной (фс) – пикосекундной (пс) длительности (фс-пс LSP) [5–10]. Более разработанным и более применяемым является нс-LSP. Однако фс-пс LSP имеет свои достоинства. Во-первых, не нужно применять защитную пленку, во-вторых, теряет смысл облучение через воду, и, в-третьих, на несколько порядков увеличивается амплитуда возбуждаемых ударных волн [7, 8, 10]. Обсудим эти особенности.

Защитная пленка препятствует испарению и плавлению. Между тем, слой расплава исключи-

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

[2)] www.beamtech-laser.com, www.alphanov.com, www.hilase.cz.

[3)] www.lsptechnologies.com.

[4)] www.naval-technology.com/news/frce-verification-milestone-peened-f-35b.

тельно важен для модификации кристаллической структуры (см. раздел 4.2 в [11]). О роли жидкой фазы на поверхности пойдет речь в данной статье. Теперь про воду. Инерция воды увеличивает импульс, передаваемый наносекундным импульсом в мишень [1, 12, 13]. Но в случае УКЛИ наличие жидкости не сказывается на амплитуде ударной волны (УВ), поскольку ультракороткая треугольная волна сжатия за ударным скачком представляет собой простую волну Римана. Протяженность основания треугольника этой волны увеличивается $\propto \sqrt{x_{SW}}$ [14], и сигнал от наличия жидкости не может достичь скачка, пока этот скачок имеет амплитуду, которая необходима для ковки; здесь $x_{SW}$ – это путь, пройденный УВ. Таким образом, при равных поглощенных в мишени энергиях (флюенсах) УКЛИ $F_{abs}$ амплитуда и форма треугольной волны не зависят от наличия или отсутствия жидкости.

Возможность резкого повышения давления – это важнейшее обстоятельство, которое резко отличает воздействие УКЛИ от воздействия нс-импульса. Наличие воды, филаментация лазерного пучка в воде и оптический пробой воды сильно ограничивают интенсивность, падающую на поверхность мишени при нс-воздействии. В результате генерируемые давления не превышают величин порядка единиц ГПа. Тогда как в случае УКЛИ с проводкой пучка через воздух или вакуум без проблем достигаются давления уровня в единицы и десятки ТПа благодаря высокой оптической прочности воздуха и большим значениям $F_{abs}$; до сотен Дж/см$^2$ [8, 10].

Элементарная оценка давления дает $p \sim F_{abs}/d_T$, где $d_T$ – глубина прогрева. Прогрев УКЛИ детально изучен [11]. Глубина прогрева равна $d_T = \delta + d_{EHC}$, где $\delta$ – толщина скин-слоя, которая в случае оптического излучения и металлов составляет 10–20 нм, $d_{EHC}$ – толщина слоя, прогретого сверхзвуковой электронной тепловой волной; на двухтемпературной (2T, $T_e \gg T_i$) стадии эта волна распространяется со сверхзвуковой скоростью [15].

В хорошо проводящих металлах (например, золото) величина $d_{EHC}$ в 5–10 раз превышает толщину скин-слоя $\delta$. В настоящей работе будем изучать практически важный случай титана. Титан, цирконий – это плохо проводящие металлы. При комнатной температуре электропроводность и теплопроводность титана составляет 1/19 и 1/15 соответственно от значений для золота. В случае титана, как показывают наши 2T-расчеты, глубина прогрева порядка толщины $\delta$; изложение деталей 2T-модели выходит за рамки данной статьи. При 2T-ГД (2T-гидродинамическом) численном моделировании 2T-модель применялась вместе с широкодиапазонным многофазным уравнением состояния титана [16, 17]. В эксперименте, который выполнен в рамках данной работы, падающий флюенс $F_{\rm inc}$ составлял 13.8 Дж/см$^2$.

Использовался лазер тераваттной мощности на кристалле хром-форстерита [18], длина волны $\lambda = 1240$ нм, длительность импульса $\tau = 110$ фс (FWHM, полная ширина на полувысоте). Коэффициент поглощения $A = 1 - R$ титана на этой длине волны равен 40 %, см. https://refractiveindex.info/. Поглощенный флюенс $F_{abs} = AF_{\rm inc} = 5.5$ Дж/см$^2$. Оценка $F_{abs}/d_T$ дает начальное давление 2 ТПа (20 Мбар) при $d_T = 30$ нм. 2T-расчет, результаты которого показаны на рис. 1, дает несколько меньшие значения давления на 2T-стадии. Отчасти это связано с небольшим значением электронного параметра Грюнайзена $G_e \sim 0.6$. Кроме того, начальное давление падает примерно в 2 раза из-за генерации акустических волн, расходящихся из слоя высокого давления толщиной $d_T$ с изначально неподвижным веществом. На 4–5 пс 2T-стадия завершается в том смысле, что электронный вклад в давление $p_e$ становится мал.

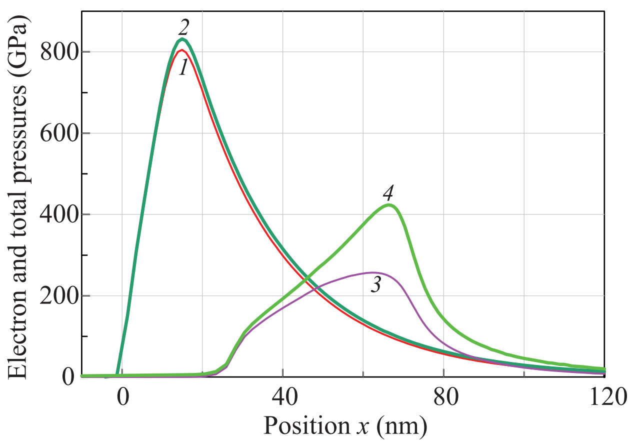


Рис. 1. (Цветной онлайн) Распределения электронного $p_e$ (кривые *1* и *3*) и полного давления $p = p_e + p_i$ (кривые *2* и *4*) в мишени из титана в начале 2T-стадии $t = 0.5$ пс (кривые *1* и *2*) и ближе к ее завершению $t = 3$ пс (кривые *3* и *4*); здесь $p_i$ – ионный вклад в давление, см. например, [11]. Модуль объемного сжатия титана $B = 110$ ГПа. Объемная скорость звука при комнатной температуре 4.9 км/с

Плавление играет определяющую роль во многих лазерных приложениях. Но, как правило, в статьях анализируется плавление за счет поглощения энергии и переноса тепла теплопроводностью. В настоящей работе основные эффекты обусловлены плавлением вследствие диссипации кинетической энергии во фронте УВ. Плавящие УВ изучались [16, 19–21]. Но такое изучение не имело отношения к процессам упрочнения. Между тем, как показано ниже, это важный аспект задачи об упрочнении.

Во-первых, плавление и последующее затвердевание поверхностного слоя принципиально меняет кристаллическую структуру этого слоя. В том числе, сверхвысокая скорость закалки расплавленного приповерхностного слоя в большинстве известных случаев приводит к измельчению зеренной структуры вплоть до формирования нанокристаллического состояния в рассматриваемом случае. Последняя, как известно, позволяет наряду со значительным упрочнением сохранить необходимый уровень пластичности или даже его повысить.

Это является принципиально важным достижением для практического применения, поскольку позволяет достигать рекордных упрочнений в поверхностном слое металлических материалов.

Во-вторых, в ситуациях с плохо проводящими металлами (титан, цирконий) и нагревом УКЛИ толщина прогретого за счет теплопроводности слоя $d_{EHC}$ мала. Следовательно, мала толщина слоя расплава за счет этого эффекта. Ниже будет показано, что толщина ударно-расплавленного слоя на порядок выше при больших поглощенных энергиях.

В-третьих, при давлениях УВ, существенно превышающих модуль сдвига $G$, происходит плавление в УВ. Обычно плавление начинается при давлениях за фронтом УВ порядка величины модуля объемного сжатия $B$.

В-четвертых, при распространении вглубь мишени амплитуда УВ затухает относительно медленно, $p_{SW} \approx p_{\rm ini}/\sqrt{x_{SW}/d_T}$. Записывая $B \approx \approx p_{\rm ini}/\sqrt{x_{SW}/d_T}$, получаем

$$d_m \sim d_T (p_{\rm ini}/B)^2.$$

Таким образом, толщина слоя расплава $d_m$ может быть намного больше толщины зоны плавления за счет теплопроводности (толщина этой зоны не превышает $d_T$).

Цель данной работы проста. Необходимо теоретически подсчитать глубину плавления $d_m$ и сравнить ее со значением, измеренным нами экспериментально.

Мы будем использовать два вида расчетов. Во-первых, это расчет с помощью 2Т-ГД-кода. Во-вторых, это расчет путем применения гибридного кода. В гибридном коде 2Т-ГД-стадия описывается 2Т-ГД-кодом, а однотемпературная (1Т) стадия моделируется молекулярно-динамическим (МД) кодом; на 1Т-стадии электронная и ионная температуры близки, и электронный вклад в давление в конденсированной фазе при температурах порядка температуры плавления $T_m$ мал; для титана $T_m(p = 0) = 1.941$ кК – справочное значение.

Работа состоит из двух основных частей. В первой части будут описаны результаты, полученные гибридным кодом. Во второй части работы мы представим данные наших опытов и сравним их с численным моделированием.

**2. Численное моделирование.** Как сказано, используются гидродинамический (2Т-ГД) и молекулярно-динамический (МД) коды. Оба имеют свои достоинства и недостатки. Их совместное применение в гибридном 2Т-ГД/МД-коде позволяет компенсировать недостатки. Поясним данный тезис. Перед нами сложная физическая проблема. Необходимо описать сквозным образом в пространстве и времени цепь взаимно связанных процессов от создания высокотемпературных состояний (температуры $\sim 10$ эВ) в слое нагрева $d_T$ до холодных упругопластических явлений глубоко в толще мишени: $x \gg d_T$. При этом погрешность МД-приближения нарастает в сторону высоких температур, а 2Т-ГД пластический код не учитывает упругие эффекты в холодной твердой фазе.

Рассматривается воздействие мощного ($F_{abs}$ на два порядка выше порога абляции) субпикосекундного ($\tau = 0.11$ пс) лазерного импульса на твердую мишень. Интересующие нас поглощенные энергии $F_{abs}$ таковы, что в слое нагрева $d_T$ толщиной в десятки нм вещество твердотельной плотности переходит в 2Т-состояние с электронными температурами $T_e \sim 10$ эВ. Гидродинамика такого рода 2Т-течений не описывается МД-кодом. МД оперирует с потенциалом межатомного взаимодействия. Настройка параметров потенциала осуществляется по данным, относящимся к твердой фазе [22]. Поэтому потенциал плохо аппроксимирует состояния с существенным электронным вкладом. В нашем случае это состояния с плотностью в интервале от критической до твердотельной и с температурами на 1–2 порядка выше критической температуры $T_{cr}$ – т.е. состояния высоко над бинодалью на плоскости $(\rho, T)$; бинодаль – это кривая равновесного сосуществования паровой и конденсированной фаз. В то же время плотные среды (кристалл, жидкость) и пар (газ) до температур $T_{cr}$ с высокой точностью охватываются потенциалом [23–25].

Гибридный код 2Т-ГД/МД основан на пространственном разделении зон ответственности ГД и МД. Ранее применялось разделение по времени. Начальная часть задачи $t < t_{eq}$ с 2Т-стадией моделировалась в 2Т-ГД. После электрон-ионной релаксации, т.е. при $t > t_{eq}$, профиль температуры передавался в МД [26]. Но такой подход пригоден при относительно небольших энергиях $F_{abs}$ порядка порога абляции; $F_{abs}|_{abl} \sim 0.1$ Дж/см$^2$ для объемных металлических мишеней. При таких энергиях можно пренебречь в первом приближении изменением плотности к моменту времени $t \sim t_{eq}$. Поэтому в МД передается профиль ионной температуры $T_i(x, t \approx t_{eq})$, а плотность полагается равной плотности невозмущенного кристалла.

В нашем случае с очень большими значениями отношения $F_{abs}/F_{abs}|_{abl}$ слой прогрева $d_T$ тонкий (титан, теплопроводность мала), нагрев сильный, скорость звука в горячем слое $d_T$ повышена за счет нагрева. Поэтому темп расширения высокий (см. рис. 2), и акустический масштаб времени $t_s = d_T/c_s = 6$ пс (для $d_T = 30$ нм, $c_s = 5$ км/с) становится сравнимым с временем 2Т релаксации $t_{eq} = 3-5$ пс в титане. Соответственно подход с разделением работы кодов по времени становится непригодным.

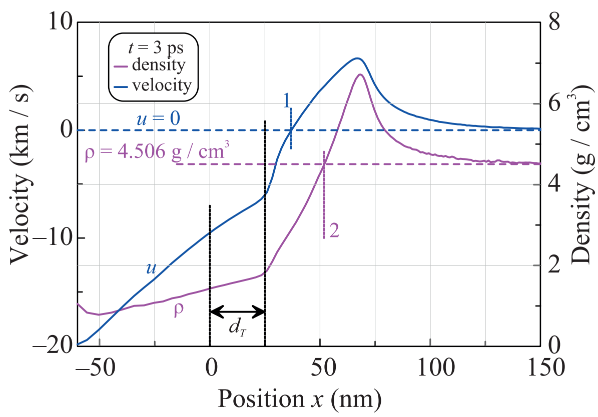


Рис. 2. (Цветной онлайн) Картина разлета слоя нагрева $d_T$ при выбранном в данной работе значении энергии $F_{abs} = 5.5$ Дж/см$^2$. Видим, что скорости расширения высокие, и к показанному моменту времени 3 пс произошло существенное падение плотности в слое $d_T$. Горизонтальные прямые указывают на невозмущенную плотность титана и на состояние покоя $u = 0$ в толще. Вертикальные прямые ограничивают примерное положение слоя прогрева $d_T$. Теплопроводность титана мала, поэтому за указанное время не произошло существенного расширения слоя прогрева за счет теплопроводности по сравнению со скин-слоем. Вертикальные прямые 1 и 2 определяют примерное положение мгновенных плоскостей разворота, где начинается расширение титана в сторону вакуума. Импульс разлета левее вертикалей 1 и 2 передается в мишень в виде импульса УВ

Дело в том, что сложно передать мгновенный (на момент $t_*$ переключения ГД $\to$ МД) профиль плотности $\rho(x, t_*)$ из ГД в МД. На рисунке 2 показано, насколько профиль $\rho$ отличается от невозмущенного значения – постоянной 4.506 г/см$^3$. МД стартует с начальных данных в виде кристалла. Параметр решетки подобран так, что до воздействия (до начала работы термостата) кристалл находится в разгруженном состоянии: тензор напряжений равен нулю. Тогда как профиль температуры передается легко – ланжевеновский термостат тянет распределение температуры в МД образце к заданному распределению $T_i(x, t = t_*)$ [22, 26]. Причем установление заданного распределения температуры происходит за время $t_{\rm therm}$ работы термостата, которое мало по сравнению с масштабом $t_s$; такова заданная настройка параметра $t_{\rm therm}$.

Итак, при больших энергиях подход с разделением по времени применить нельзя. Поэтому для данной статьи разработан гибрид 2Т-ГД/МД с разделением по пространству. Принцип разделения простой. Горячая зона слева на рис. 2 и 3 описывается через 2Т-ГД, а холодная справа – с помощью МД. Поясним основные детали.

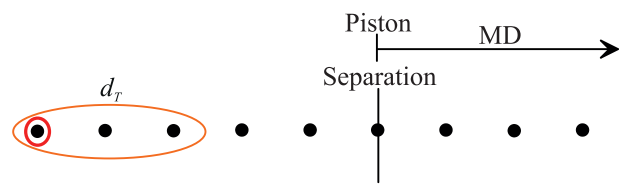


Рис. 3. (Цветной онлайн) Показаны: во-первых, последовательность лагранжевых ячеек 2Т-ГД-кода – черные маркеры; во-вторых, крайняя ячейка слева – граница с вакуумом (охвачена красным кружком); граничное условие на ней $p = 0$; в-третьих, ячейки слева, ограниченные эллипсом $d_T$, символизируют приграничный слой нагрева; в-четвертых, правее границы $x_p^0$ работает МД-код. Эта граница отмечена вертикальным отрезком separation/piston. Взятая из 2Т-ГД расчетная траектория $x_p(t)$ действует как поршень в МД-расчете. Эйлерова (подвижная) и лагранжева (неподвижная) координаты поршня есть $x_p$ и $x_p^0$

На рисунке 3 представлена цепочка лагранжевых узлов в расчете 2Т-ГД – это черные кружочки. Система уравнений лагранжевой 2Т-гидродинамики приведена в [11]. Из решения 2Т-ГД-уравнений определяется траектория $x_p(t)$ и скорость $(d/dt)x_p(t)$ (см. рис. 4) лагранжевой частицы $x_p^0$ на рис. 3. Эта частица находится заведомо правее слоя нагрева $d_T$ (такова наша настройка параметра $x_p^0$). В этой частице (а значит и правее по оси $x$) титан находится в 1Т-состоянии при температуре, которая остается меньше критической температуры $T_{cr}$ после прохождения УВ. Следовательно, аппроксимация межатомного потенциала применима, и МД код работает с хорошей точностью. В приведенных здесь МД расчетах используется потенциал модели погруженного атома (EAM) для титана [27].

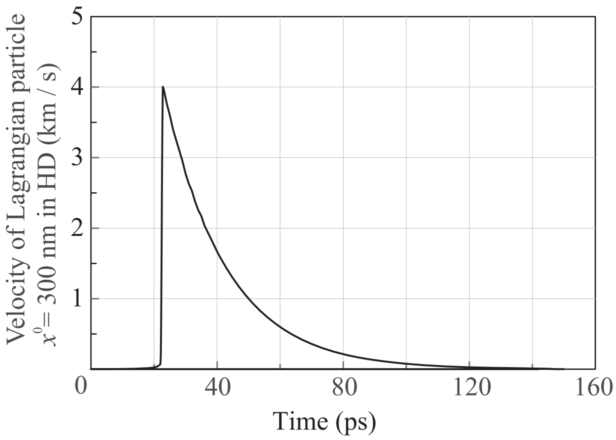


Рис. 4. Скорость поршня separation/piston $(d/dt)x_p(t)$ как функция времени. Эта функция вычислена в 2Т-ГД-расчете. Выбрана лагранжева частица $x_p^0 = 300$ нм, далекая от зоны прогрева, ср. с рис. 1 и 2. Видим приход слабого акустического предвестника перед УВ и приход самой УВ, которая за малый промежуток времени 0.6 пс поднимает скорость поршня до высокого значения 4 км/с. В тексте поясняется происхождение акустического предвестника

В гибридном подходе МД код работает на отрезке переменной длины $x_p(t) < x < x_p(0) + L_x$. Толщина МД слоя $L_x = 1000$ нм выбрана достаточно большой. Это нужно для того, чтобы волна разгрузки, возникающая после отражения УВ от свободной правой границы $x_p(0) + L_x$, пришла к фронту плавления на достаточно далеких временах. На левой границе $x_p(t)$ применяется граничное условие, требующее равенства скорости вещества в МД-расчете скорости $(d/dt)x_p(t)$, показанной на рис. 4.

На рисунке 4 показано прохождение ударного скачка в 2Т-ГД-расчете через лагранжев узел $x_p^0 = 300$ нм. Ударный скачок формируется из плавной (т.е. без скачка) волны сжатия на рис. 1 и 2. Из-за нелинейного эффекта (фокусировка характеристик) волна сжатия опрокидывается – происходит зарождение скачка, см., например, [26]. При этом перед скачком имеется бегущий впереди остаток плавной волны сжатия. С течением времени амплитуда скачка быстро растет за счет поглощения переднего и заднего остатков плавной волны сжатия. Скачок движется со сверхзвуковой скоростью, а остаток впереди бежит со скоростью звука, но имеет некоторый исходный запас по положению характеристик на координате $x$. Только малая часть остатка располагается перед УВ на рис. 4, поскольку выбранная позиция разделителя $x_p^0$ separation/piston на рис. 3 и 4 существенно превышает глубину прогрева $d_T$. За скачком следует волна разрежения, в которой скорость плавно снижается, см. рис. 4.

Сравнение 2Т-ГД-кода и МД-кода с поршнем, показанным на рис. 4, представлено на рис. 5 и 6. 2Т-ГД-код описывает все поле по координате $x$ от $-\infty$ до $\infty$. Тогда как МД-течение ограничено поршнем $x_p^0 = 300$ нм слева. Индексом "0" сверху выделена координата лагранжевой частицы $x^0$ на лагражевой оси координат. Лагранжева метка не меняется во времени, поскольку координаты $x^0$ – это интегралы движения. Сравнению напряжений посвящен рис. 6. Титан в МД жестче, поэтому МД-напряжение больше, а фронт УВ правее. Отметим также, что темп затухания УВ в МД немного выше, чем в ГД – ср. профили на рис. 6 на момент 48 пс.

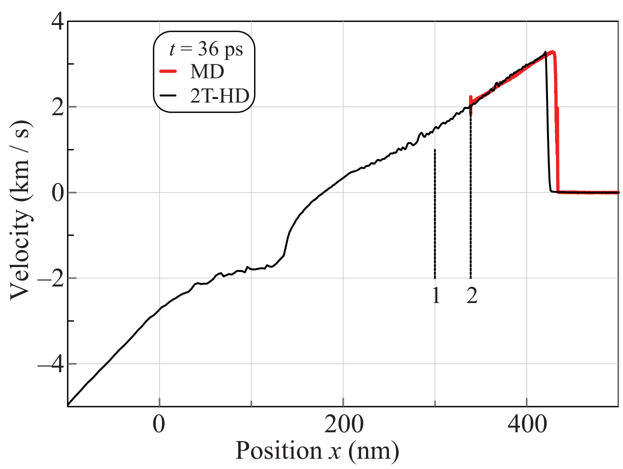


Рис. 5. (Цветной онлайн) Мгновенное поле скорости в ГД (черная кривая) и МД (красная кривая). Как говорилось, МД течение ограничено слева движущимся поршнем. Закон движения берется из 2Т-ГД расчета. Вертикаль 1 отмечает начальное положение лагранжевой частицы $x_p^0 = 300$ нм. Расстояние между вертикалями 1 и 2 – это смещение поршня за время 36 пс. Как видим, ГД и МД-поля скорости хорошо согласуются на поршне. Фронт УВ в МД расчете находится немного дальше. Дело в том, что титан в МД-расчете несколько жестче

Сравнение температур в ГД и МД показано на рис. 7. МД-температуры несколько выше. Возможно, это обусловлено небольшим недоучетом теплоемкости из-за несколько неполного учета электронных

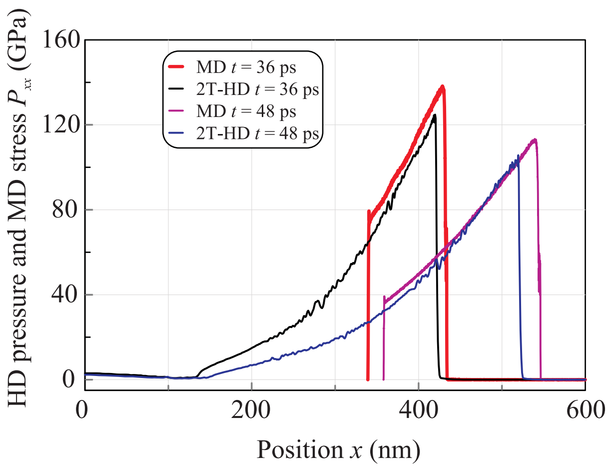


Рис. 6. (Цветной онлайн) Развитие процесса распространения лазер-индуцированной УВ в титан. 2Т-ГД-код охватывает все течение слева направо. МД-течение располагается правее поршня, который толкает титан в МД-расчете. В зоне левее координаты $x \approx 130$ нм находится разгруженное вещество. В нем градиент давления мал. Поэтому полет лагранжевых частиц происходит по инерции – т.е. с сохранением значений скорости в лагранжевой частице, см. рис. 5

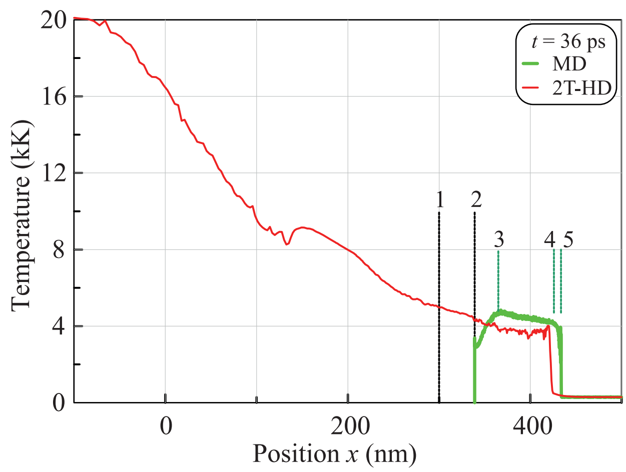


Рис. 7. (Цветной онлайн) Распределение температуры. Видим, что зона, охваченная МД-расчетом, далеко вынесена за горячую зону высоких температур. Вертикали 1 и 2 перенесены с рис. 5. Они показывают путь, пройденный поршнем. Смысл вертикалей 2–5, относящихся к МД расчету, поясняется в тексте

степеней свободы при температурах 4–5 кК. Справочная температура плавления титана при низком давлении равна $T_m(p = 0) = 1.941$ кК. Температура плавления в МД расчете связана с межатомным потенциалом и составляет $T_m(p = 0) = 1.59$ кК. Зона между вертикалями 2 и 3 на рис. 7 – это зона влияния граничного условия на поршне. Поршень в МД моделируется с помощью крутого отталкивательного потенциала. Понижение температуры между вертикалями 3 и 4 связано с распределением энтропии. Ближе к вертикали 3 лагранжевы частицы прошли через более интенсивную УВ. Поэтому их энтропия выше. Этот эффект превышает эффект, действующий в обратную сторону, обусловленный снижением давления в волне разрежения в направлении от вертикали 4 к вертикали 3, см. рис. 6 с профилем давления. Структура 4–5 связана с УВ. Имеется некоторый зародыш упругого предвестника.

**3. О расчетной толщине слоя расплава.** Переход лазер-индуцированной УВ от быстрого плавления в ударном скачке к медленному плавлению в хвосте разгрузки за УВ проиллюстрирован на рис. 8. Скачок в УВ плавит титан до примерно 40 пс, что дает резкий переход из твердой в жидкую фазу сразу за фронтом УВ. Структура фронта УВ в таком режиме показана вертикалями 4–5 на рис. 7, см. также профиль 43.2 пс на рис. 8. В зоне между вертикалями 4–5 на рис. 7 происходит плавление и установление равновесной температуры расплава. На плавление указывает падение параметра локального атомного порядка $Q_6$ ниже значения 0.43. На профиле параметра $Q_6$ имеется глубокая яма в области расплава, как показано на рис. 8. Определение $Q_6$ и его величины для разных кристаллических решеток даны в [28].

На временах после примерно 40-й пс имеет место разделение фронтов УВ и плавления. После этого начинает формироваться слой конечной ширины до примерно 50 нм, в котором параметр $Q_6$ повышается от значения для жидкой фазы до значения для твердой фазы. Причем в пластически сжатом твердом титане значение $Q_6$ больше, чем в холодном (при комнатной температуре) невозмущенном титане перед УВ. Дело в том, что исходный несжатый титан имеет гексагональную плотноупакованную решетку, которой соответствует минимальное значение параметра $Q_6$ среди других типов решеток. Поэтому в пластически деформированном титане, имеющем множественные нарушения исходной упаковки, усредненные значения $Q_6$ больше.

Итак, на временах от 50 пс, представленных на рис. 8, пластически деформированный слой титана ограничен с двух сторон довольно широкими зонами перехода. Справа это структура УВ, а слева структура между жидкой и твердой фазами титана. Причем на стадии прямого плавления (плавление в УВ) переходная структура является тонкой, см. профиль 43.2 пс на рис. 8. Стоит отметить, что

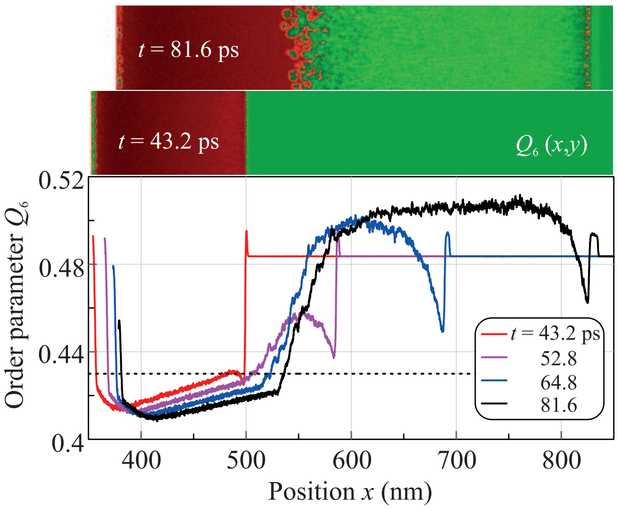


Рис. 8. (Цветной онлайн) Эволюция усредненных по сечению образца профилей параметра порядка $Q_6(x)$ от плавления во фронте УВ до плавления в хвосте разгрузки. Вверху приведены соответствующие карты распределения $Q_6(x, y)$. Жидкой фазе соответствуют параметры $Q_6 < 0.43$, т.е. ниже штриховой линии. Подъем $Q_6$ на левом краю обусловлен упорядочением атомов на поршне

образование метастабильной переохлажденной жидкости из-за механического плавления в пластическом ударном фронте [20] с последующей кристаллизацией продолжается некоторое время, на что указывает резкий провал и восстановление $Q_6$ сразу за пластическим ударным фронтом, см. профили 52.8–81.6 пс на рис. 8.

Далее по времени УВ уходит далеко в толщу твердого титана и происходит небольшое медленное расширение слоя расплава и углубление ямы параметра $Q_6$ уже внутри слоя, охваченного УВ, см. профили на рис. 8. Расширение слоя расплава и углубление этой ямы связано в основном со снижением давления в волне разрежения. Соответственно снижается температура плавления $T_m(p)$, которая монотонно зависит от давления. Как видим, толщина слоя плавления – т.е. максимальная глубина распространения фронта плавления в толщу титана, составляет примерно 550 нм.

**4. Эксперимент.** Параметры лазерного излучения (поглощенный флюенс, длина волны и длительность импульса) были приведены во введении. Лазерный пучок падал под небольшим углом к поверхности. Поэтому пятно освещения на поверхности мишени имело форму эллипса с полуосями 35 и 42 мкм по уровню $1/e$. Эти размеры намного превышают интересующую нас глубину распространения УВ в объем титана, см. рис. 8. Поэтому расчеты в плоском одномерном приближении оправданы.

На рисунке 9 представлены результаты электронно-микроскопических исследований микроструктуры тонкой фольги из поперечного среза приповерхностного слоя (ламели) технически чистого титана марки ВТ1-0. Исследование выполнено на просвечивающем электронном микроскопе Tecnai Osiris при ускоряющем напряжении 200 кВ. Ламель приготовлена по известной методике [29]. Методика включает в себя приготовление поперечного среза сфокусированным ионным пучком в колонне растрового электронного микроскопа с последующим его утончением до тонкой фольги (ламели). Предварительно наносится защитное покрытие из платиноорганики, см. рис. 9 "Покрытие из платины".

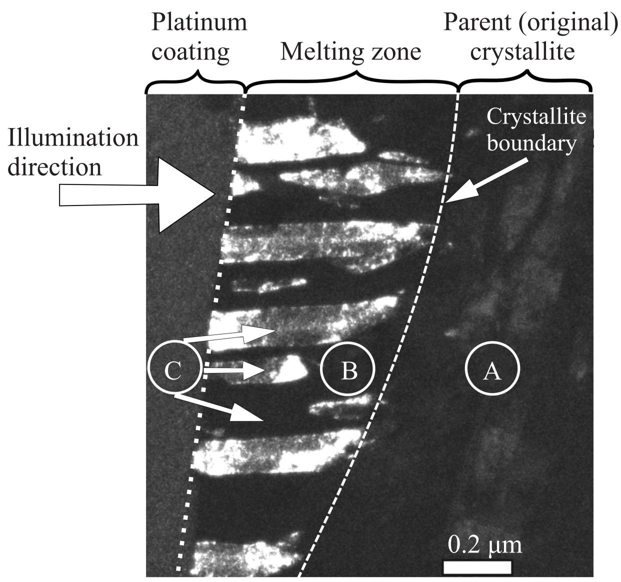


Рис. 9. Темнопольное изображение микроструктуры приповерхностного слоя: область A – исходный материал; B – приповерхностный слой, левее которого располагается напыленное защитное покрытие из платины; C – кристаллиты, ориентированные перпендикулярно поверхности. Из анализа изображения следует, что титан в слое B прошел через состояние жидкой фазы

На темнопольном изображении (рис. 9) отчетливо выделяется нанокристаллический слой B. Этот слой резко отличается по микроструктуре от исходного рекристаллизованного состояния; исходное состояние отмечено взятой в кружок буквой A. Толщина этого слоя составляет 300–600 нм. Исходная структура состояла из крупных кристаллитов с размерами 35 мкм. В этом смысле часть вещества, попавшая в рамку рис. 9, до лазерного воздействия представляла собой монокристалл. Слой B имеет неоднородную нанокристаллическую пластинчатую зеренно-субзеренную структуру с шириной кристаллитов от 5 до 200 нм и длиной пластин от 100 до 600 нм в перпендикулярном поверхности образца направлении, см. тонкие стрелки от кружка C на рис. 9. Кристаллиты (они обозначены стрелками и буквой C), ориентированные к направлению просвечивающего электронного пучка плоскостями, находящимися в отражающем положении, имеют светлый контраст, в противном случае – темный. Отсюда чередование светлых и темных полос в слое B на рис. 9.

Кристаллиты (элементы зеренно-субзеренной структуры) в слое B имеют вытянутую форму преимущественно в перпендикулярном поверхности образца направлении. Это направление соответствует направлению максимального теплоотвода вдоль градиента температуры. Обозначенная светлой штриховой линией граница, отделяющая основной материал (отмечен светлым кружком A) от приповерхностного слоя с модифицированной структурой (отмечен кружком B), представляет большеугловую границу разориентировки (граница зерна). Дело в том, что данные электронной микродифракции, снятые с областей A (кристаллическая структура исходного материала со средним размером зерен примерно 35 мкм) и B (имеющих нанокристаллическую структуру), принадлежат различным кристаллографическим зонам.

Анализ электронограмм микродифракции области B показал, что взаимные разориентировки на межзеренных границах нанозерен могут иметь как малоугловые, так и большеугловые разориентировки. То есть имеют место все необходимые условия для обоснованного предположения о том, что такая структура сформировалась при нанокристаллизации расплавленного лазерным воздействием приповерхностного слоя титана с формированием наноразмерных зерен, имеющих вытянутую вдоль направления максимального теплоотвода форму.

При этом толщина $d_m$ расплавленного и в последующем закристаллизовавшегося приповерхностного слоя, определенная по указанным выше признакам, находится в хорошем количественном соответствии с указанным выше расчетным значением данной величины.

**Заключение.** Плавление и затвердевание резко меняют исходную поликристаллическую структуру и поэтому являются важными. В работе, видимо, впервые рассмотрено плавление сильной УВ в связи с приложением, относящемся к технологии упрочнения ультракоротким лазерным импульсом (фс-пс LSP). Плавление прекращается при снижении амплитуды УВ до давлений порядка 1 Мбар.

При высоком начальном давлении слой плавления оказывается достаточно протяженным. Его толщина в рассмотренном выше примере на порядок превышает толщину слоя, прогретого теплопроводностью.

В работе выполнено численное моделирование и эксперимент. Расчетные и экспериментальные значения по толщине слоя плавления хорошо согласуются.

Теоретико-вычислительная часть работы поддержана в рамках Государственного задания ИТФ РАН # 0029-2019-0003 – нелинейная динамика сложных сред. Эксперименты по лазерному воздействию были выполнены с использованием УНУ “Лазерный тераваттный фемтосекундный комплекс”, входящей в состав ЦКП “Лазерный фемтосекундный комплекс” ОИВТ РАН при финансовой поддержке Государственного задания # 075-01056-22-00. В части, связанной с исследованием структуры, работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания ИПХФ РАН, # госрегистрации АААА-А19-119111390022-2. Работа В. В. Шепелева выполнена в рамках Государственного задания ИАП РАН.

1. R. Fabbro, J. Fournier, P. Ballard, D. Devaux, and J. Virmont, J. Appl. Phys. **68**(2), 775 (1990).
2. C. Correa, D. Peral, J. A. Porro, M. Díaz, L. Ruiz de Lara, A. García-Beltrán, and J. L. Ocaí, Optics and Laser Technology **73**, 179 (2015).
3. Y. R. Kolobov, Russian Physics Journal **61**(4), 611 (2018); doi:10.1007/s11182-018-1440-4.
4. A. Y. Tokmacheva-Kolobova, Tech. Phys. Lett. **47**, 143 (2021).
5. Y. R. Kolobov, E. V. Golosov, T. N. Vershinina, M. V. Zhidkov, A. A. Ionin, S. I. Kudryashov, S. V. Makarov, S. V. Seleznev, D. V. Sinitsyn, and E. A. Ligachev, Appl. Phys. A **119**, 241 (2015).
6. T. Kawashima, T. Sano, A. Hirose, S. Tsutsumi, K. Masaki, K. Arakawa, and H. Hori, Journal of Materials Processing Technology **262**, 111 (2018).
7. E. I. Ageev, Y. M. Andreeva, A. A. Ionin, N. S. Kashaev, S. I. Kudryashov, N. V. Nikonorov, R. K. Nuryev, A. A. Petrov, A. A. Rudenko, A. A. Samokhvalov, I. N. Saraeva, and V. P. Veiko, Optics and Laser Technology **126**, 106131 (2020).
8. Y. Lian, Y. Hua, J. Sun, Q. Wang, Zh. Chen, F. Wang, K. Zhang, G. Lin, Z. Yang, Q. Zhang, and L. Jiang, Applied Surface Science **567**, 150855 (2021).
9. A. Nakhoul, A. Rudenko, X. Sedao, N. Peillon, J. P. Colombier, C. Maurice, G. Blanc, A. Borbély,

N. Faure, and G. Kermouche, J. Appl. Phys. **130**(1), 015104 (2021); doi:10.1063/5.0052510.

10. Y. Li, Zh. Ren, X. Jia, W. Yang, N. Nassreddin, Y. Dong, Ch. Ye, A. Fortunato, and X. Zhao, Manufacturing Letters **27**, 26 (2021).
11. S. I. Anisimov, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, K. P. Migdal, Yu. V. Petrov, and V. A. Khokhlov, ZhETF **156**(4), 806 (2019) [JETP **129**(4), 757 (2019)].
12. N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, and V. V. Zhakhovsky, Opt. Quant. Electron. **52**, 63 (2020).
13. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, and V. A. Khokhlov, JETP Lett. **115**(1), 16 (2022).
14. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, 2nd ed., Butterworth–Heinemann, Oxford, United Kingdom (1987), v. 6.
15. 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, Contrib. Plasma Phys. **51**(4), 367 (2011).
16. M. E. Povarnitsyn, K. V. Khishchenko, and P. R. Levashov, International Journal of Impact Engineering **35**(12), 1723 (2008).
17. K. V. Khishchenko, J. Phys.: Conf. Ser. **774**, 012001 (2016).
18. M. B. Agranat, S. I. Ashitkov, A. A. Ivanov, A. V. Konyashchenko, A. V. Ovchinnikov, and V. E. Fortov, Quantum Electron. **34**(6), 506 (2004).
19. Z. Henis and Sh. Eliezer, Phys. Rev. E **48**(3), 2094 (1993).
20. M. M. Budzevich, V. V. Zhakhovsky, C. T. White, and I. I. Oleynik, Phys. Rev. Lett. **109**, 125505 (2012).
21. P. Qiu, T. Sun, and Y. Feng, Phys. Plasmas **28**(11), 113702 (2021).
22. V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, S. I. Ashitkov, and K. Nishihara, Appl. Surf. Sci. **255**(24), 9592 (2009).
23. V. V. Zhakhovsky, A. P. Kryukov, V. Yu. Levashov, I. N. Shishkova, and S. I. Anisimov, Proc. Natl. Acad. Sci. **116**(37), 18209 (2019).
24. D. I. Zhukhovitskii and V. V. Zhakhovsky, J. Chem. Phys. **152**, 224705 (2020).
25. P. Kryukov, V. Yu. Levashov, V. V. Zhakhovskii, and S. I. Anisimov, Phys.-Uspekhi **64**(2), 109 (2021).
26. B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, and I. I. Oleynik, Phys. Rev. B **82**, 064113 (2010).
27. X. W. Zhou, R. A. Johnson, and H. N. G. Wadley, Phys. Rev. B **69**, 144113 (2004).
28. S. Murzov, S. Ashitkov, E. Struleva, P. Komarov, V. Zhakhovsky, V. Khokhlov, and N. Inogamov, J. Appl. Phys. **130**(24), 245902 (2021).
29. E. Montoya, S. Bals, M. Rossell, D. Schryvers, and G. Van, Microsc. Res. Tech. **70**(12), 1060 (2007).