

УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИЕ И ПОЛИМОРФНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ПЛЕНКАХ ЖЕЛЕЗА ПРИ НАГРУЗКЕ УЛЬТРАКОРОТКИМИ ЛАЗЕРНЫМИ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ

С. А. Мурзов^{a,b}, С. И. Ашитков^b, Е. В. Струлева^b, П. С. Комаров^b,*

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

*^a Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова
127055, Москва, Россия*

*^b Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

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

Поступила в редакцию 19 октября 2021 г.,
после переработки 19 октября 2021 г.
Принята к публикации 21 октября 2021 г.

Представлены результаты экспериментальных исследований лазерных ударных волн, инициируемых пикосекундным импульсом в железе. Обработка и анализ экспериментальных измерений проведены с использованием теоретических подходов и численного моделирования. Интерес к пикосекундным воздействиям обусловлен уникально высокими темпами деформации, в частности, зависимостью от темпа деформации порогов упруго-пластических и полиморфных трансформаций. Исследование необходимо для развития области лазерного упрочнения металлов. Первые шаги в этом направлении сделаны, хотя такого рода подход к упрочнению лазернойковки уже широко применяется на практике. Используются современные наработки в области генерации ударных волн и их экспериментальной диагностики, а также развиваются сопутствующие методы теоретической интерпретации данных. Сложность заключается в пикосекундном масштабе времен, так как диагностика опытов ограничена кинематикой, а именно, измерением координаты свободной поверхности. Для выяснения кинетики полиморфного превращения на пикосекундных масштабах времен впервые применен метод обратного анализа скорости свободной поверхности. Валидация метода проводилась с использованием результатов гидродинамического и молекулярно-динамического моделирования при прямом извлечении механических напряжений и деформации. Теоретическое исследование традиционными методами восстановленных профилей скорости свободной поверхности подтверждает результаты в области их применимости — на упругом и пластическом фронтах ударной волны. Переход железа в ϵ -фазу имеет место на начальном участке распространения ударной волны, пока эта волна имеет достаточную амплитуду. Причина состоит в ограничении по давлениям до 40 ГПа из-за оптического пробоя в стекле и затухания ударной волны по мере распространения.

DOI: 10.31857/S0044451022030026

1. ВВЕДЕНИЕ

Первые сведения о применении мощных наносекундных лазеров для исследований уравнений состояния конденсированных веществ приведены в работах [1, 2]. Механические явления возникают при любом лазерном воздействии. В частности, лазеры

являются генераторами ударных волн (УВ), которые конкурируют с механическими способами создания УВ в конденсированной фазе, т. е. посредством столкновения мишени с ударником или с использованием взрывчатых веществ.

Относительно новым является научно-технологическое направление, связанное с применением ультракоротких фемто- и пикосекундных лазерных импульсов для изучения поведения конденсированных сред при высоких скоростях деформации. Со-

* E-mail: murzovs@gmail.com

здание такого рода импульсных источников света происходит при усилении чирпированных импульсов.

С ультракороткими воздействиями связаны две важные особенности — термомеханическая и механическая. Область, в которой происходят поглощение энергии и нагрев вещества, достаточно тонкая, поэтому необходимо учитывать превышение электронной температуры над температурой решетки [3]. Авторы имеют опыт формулировки таких моделей [4–8], но генерация УВ в железе имеет следующие особенности.

Первая особенность заключается в термомеханическом эффекте. Движение основной массы прогретого слоя начинается после окончания лазерного нагрева. Тепловое расширение вещества из нагретого слоя пленки создает волны сжатия в стеклянной подложке и внутри пленки железа, хотя нагретый слой приводит к генерации волн сжатия и в случае продолжительного по времени импульса [5, 9–11]. Волны сжатия уходят далеко от нагретого слоя, а тепло остается аккумулированным в веществе слоя нагрева; говорят, что энтропийная и акустическая моды разделяются.

Вторая особенность состоит в продолжительности нахождения в сжатом состоянии конденсированной среды в волне сжатия. Волна сжатия формируется при акустическом распаде слоя высокого давления. Поведение материалов под действием механических нагрузок предельно малой длительности со сменой на разгрузку находится за пределами микросекундных и даже наносекундных воздействий.

Применение таких воздействий интересно при изучении пикосекундной кинетики разложения молекул, например, во взрывчатых веществах [12, 13]. Еще больший интерес проявляется к исследованию кинетики упруго-пластических и полиморфных превращений в твердой фазе [6, 14–28]. Экспериментальные [14–18] и расчетные [6, 23–27] исследования показывают резкое повышение порогов, разделяющих упругое и пластическое ударно-волновые течения. В результате дано теоретическое объяснение серии блестящих фемтосекундных опытов американских ученых [29–32] — УВ распространяются существенно быстрее, чем им положено при данной амплитуде давления.

В прикладном отношении задача возникает в связи с многообещающими современными технологиями пикосекундной лазернойковки [33–35]. Другое важное новое направление связано с пикосекундной диагностикой объектов со сложной внутренней структурой [36, 37]. Ультракоротким воздей-

ствием возбуждают акустические вибрации, измеряют их с помощью серии пикосекундных зондирующих импульсов с малой скважностью по времени и восстанавливают внутреннюю структуру по спектру упругих вибраций. При этом, в отличие от лазернойковки, для возбуждения и зондирования применяют энергетически слабые воздействия (неповреждающий контроль). В работах [36, 37] используют упругие поверхностные волны [38–40]. Контроль за трещинами традиционно осуществляется с помощью поверхностных волн Рэлея и Лэмба. В работах [36, 37, 40] новизна заключается в чрезвычайной миниатюризации измерений.

В железе начато изучение влияния темпа нагрузки на кинетику и степень завершенности сложного полиморфного перехода $\alpha \rightarrow \varepsilon$ [20, 41, 42]. Настоящая работа представляет собой продолжение таких исследований. Известно, что напряжение, при котором происходит переход в пластический режим движения, возрастает с увеличением скорости нагружения. Для многих кристаллических тел эта зависимость резко усиливается при превышении значений темпа деформирования порядка 10^3 – 10^4 с⁻¹, что интерпретируется как следствие изменения механизма движения дислокаций от термофлуктуационного к надбарьерному, контролируемому фононным трением [43].

Пикосекундная длительность действия механической нагрузки дает возможность реализации метастабильных состояний вещества, далеких от равновесия, и изучения поведения различных материалов при предельно больших скоростях деформации [44]. В частности, в пикосекундном временном диапазоне уже удалось вплотную приблизиться к предельно возможным («идеальным») значениям объемной и сдвиговой прочности для ряда металлов [14–22, 44, 45].

В настоящее время полиморфные переходы в микросекундном диапазоне УВ-нагружения зарегистрированы для многих металлов, полупроводников и ионных соединений [46]. Поведение железа и сталей, являющихся основными конструкционными материалами энергетики и машиностроения, в экстремальных условиях активно изучается в течение нескольких последних десятилетий. В настоящее время известны четыре твердые фазы железа [47]: α (ОЦК), γ (ГЦК), δ (ОЦК) и ε (ГПУ).

Фазовый полиморфный переход $\alpha \rightarrow \varepsilon$ в железе был обнаружен по излому ударной адиабаты [48]. Переход детально исследовался в УВ-экспериментах в субмикросекундном диапазоне нагружения [49–52]. Переход сопровождается изменением

магнитных свойств. При давлении 13 ГПа железо претерпевает полиморфное $\alpha \rightarrow \epsilon$ -превращение в ϵ -фазу высокого давления. В работах [21, 49–53] профиль УВ имеет трехволновую конфигурацию. Первая волна — упругий предвестник, соответствует пределу текучести (примерно 0.5 ГПа при субмикросекундном нагружении), затем следует фронт пластической УВ в α -фазе. В третьем скачке уплотнение происходит из-за превращения $\alpha \rightarrow \epsilon$. Обратный фазовый переход в α -фазу при разгрузке возникает при давлении ниже 13 ГПа, что приводит к гистерезису кривой нагрузки–разгрузки.

Для генерации ударной нагрузки предельно малой длительности (порядка 0.1 нс) применяются лазерные методы с использованием оптических импульсов пико- и фемтосекундного диапазонов [14–22]. Диагностика осуществляется интерферометрическим методом накачки–зондирования с зондирующим чирпированным импульсом [15, 16, 20, 54], что позволяет измерять смещение поверхности в субнаносекундном диапазоне с временным разрешением до 1 пс.

В работе [20] были проведены первые опыты по определению метастабильной сжимаемости железа при пикосекундном ударном воздействии. По результатам измерений на пленочных образцах железа чистотой 0.999 и толщиной 250 и 540 нм была оценена метастабильная адиабата упругого сжатия. Зарегистрированное максимальное напряжение за фронтом упругого предвестника достигало 27 ГПа на длине распространения 250 нм. Величина максимального сдвигового напряжения составляет 7.9 ГПа, что выше значения прочности из *ab initio* расчетов [55, 56] и может быть объяснено увеличением модуля сдвига.

В работе [21] приведены результаты измерений профилей скорости свободной поверхности более толстых пленочных образцов железа толщиной 1.2 и 1.4 мкм. Интерпретация профилей свободной поверхности основывается на восстановлении кривых состояния в переменных напряжение–деформация (σ – V/V_0). Трансформация в ϵ -фазу происходит при давлениях выше 25 ГПа, что примерно в 2 раза больше, чем при микросекундном нагружении. При этом трехволновая конфигурация фронта волны не регистрировалась из-за относительно низкой скорости пластической релаксации.

В работах [57–60] рассматривались микросекундные воздействия, а в работе [21] — нагружение с длительностью импульса 200 пс.

В нашей работе длительность импульса составляет 1.2 пс, что на 2 порядка меньше, чем в [21]. При этом мы рассматриваем аналогичную постановку эксперимента — пленка железа на стеклянной подложке, которую облучает через подложку лазерный импульс. Для восстановления эволюции напряжения и деформации материала в плоскости σ – V/V_0 при прохождении волны используется метод обратного анализа скорости свободной поверхности. Этот метод развивается давно [57, 58]. Мы использовали этот метод с учетом разгрузочной части кривой, что позволило наблюдать полиморфный частичный фазовый переход. Для восстановления напряжения и деформации в пленке наименьшей толщины использовалось кусочно-квазистационарное приближение, т. е. скорость распространения УВ в образце полагалась постоянной на длине пробега, равной наименьшей толщине из имеющегося экспериментального набора. Валидация метода обратного анализа проводилась на основе результатов молекулярно-динамического моделирования. При этом механическое действие лазерного импульса в молекулярной динамике основано на двухтемпературном гидродинамическом расчете с учетом поглощения лазерного излучения пленкой железа на подложке.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СХЕМА И МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ

Измерения движения тыльной поверхности пленочных образцов железа при выходе УВ осуществлялись методом спектральной интерферометрии [54] с применением чирпированных импульсов при однократном лазерном воздействии.

Лазерный импульс накачки (pump) фокусировался на пленочный металлический образец через стеклянную подложку, а диагностика УВ-явлений осуществлялась на тыльной свободной поверхности частотно-модулированным зондирующим (probe) импульсом (рис. 1).

Источником импульсов накачки и зондирования служила фемтосекундная титан-сапфировая лазерная система, собранная по схеме усиления чирпированных импульсов. Импульсы длительностью 40 фс на центральной длине волны 795 нм с шириной спектра ± 30 нм, генерируемые задающим генератором 1, направлялись во временной расширитель, или стретчер 2, где далее преобразовывались в частотно-модулированные импульсы длительностью 300 пс. Далее эти импульсы усиливались в усилителе 3, состоящем из регенеративного усилителя

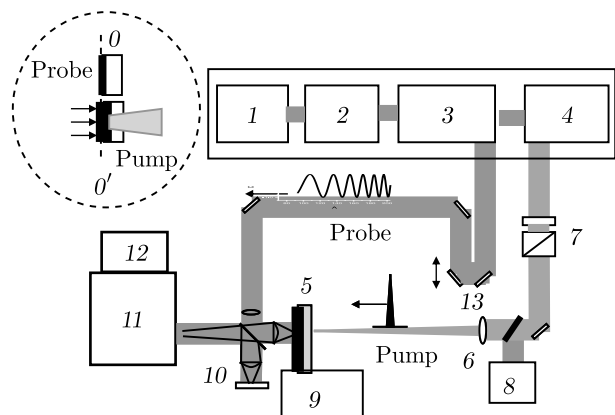


Рис. 1. Оптическая схема измерений: 1 — задающий генератор; 2 — стретчер; 3 — усилитель; 4 — компрессор; 5 — испытуемый пленочный образец; 6 — линза; 7 — поляризационный ослабитель; 8 — фотодиод; 9 — микроманипулятор; 10 — интерферометр Майкельсона; 11 — дифракционный спектрометр, 12 — ПЗС-камера; 13 — оптическая линия задержки

и двухпроходного усилителя мощности. После регенеративного усилителя часть chirпированного импульса отводилась из оптического тракта и использовалась для диагностики. Остальное излучение после усилителя мощности направлялось во временной компрессор 4, где сжималось до нужной длительности, и в дальнейшем использовалось в качестве импульсов накачки.

Излучение накачки фокусировалось на поверхность пленочного образца 5 (см. вставку на рис. 1) через прозрачную подложку линзой 6 с фокусным расстоянием 20 см в пятно с пространственным гауссовым распределением с $r_0 = 30$ мкм.

Данный размер пятна обеспечивал практически одноосное сжатие материала мишени микронной толщины (размер пятна намного превышает толщину мишени). Энергия импульсов плавно варьировалась с помощью поляризационного ослабителя 7 и контролировалась калиброванным фотодиодом 8. После каждого лазерного воздействия мишень перемещалась примерно на 200 мкм на новое место с помощью микроманипулятора 9.

При данной конфигурации эксперимента (нагрев через стеклянную пластинку) существует ограничение на интенсивность падающего лазерного излучения в связи с возможным возникновением нелинейных эффектов и оптического пробоя в стекле. С целью уменьшения пиковой интенсивности длительность нагревающего импульса была увеличена с 40 фс до 1.2 пс путем соответствующей настройки компрессора лазерной системы. В описываемых

экспериментах энергия лазерных импульсов составляла $E = 100 \pm 5$ мкДж, что соответствует плотности падающей энергии в центре фокального пятна $F_0 = 3.4$ Дж/см². Энергия импульсов в экспериментах специально подбиралась для генерации импульсов сжатия максимальной амплитуды в исследуемых образцах. Превышение данного значения энергии E приводило к искажению регистрируемого пространственного профиля смещения и к уменьшению скорости свободной поверхности, связанному с развитием оптического пробоя и поглощением излучения в стекле подложки.

Для диагностики динамики смещения $z(t)$ тыльной свободной поверхности металлического образца при выходе УВ сжатия применялся интерферометр Майкельсона 10, собранный по схеме переноса изображения (конфигурация Линника) и совмещенный с дифракционным спектрометром Acton-2300i (схема Черни–Тернера) 11 с дифракционной решеткой 600 штрихов/мм. Перенос изображения осуществлялся с помощью микрообъектива Olympus с числовой апертурой $NA = 0.3$, что обеспечивает пространственное разрешение в плоскости мишени 2 мкм. Регистрация оптических сигналов на выходе спектрометра проводилась с помощью ПЗС-камеры SensiCam QE 12 с охлаждаемой матрицей размером 1375×1375 пкс и разрядностью 12 бит. Оптическая линия задержки 13 служила для коррекции времени задержки между нагревающим и зондирующим импульсами при настройке схемы или смене образцов. Применяемая оптическая схема обеспечивала непрерывную регистрацию динамики процесса с временным разрешением $\delta t \approx 1$ пс во временном интервале $\Delta t = 0$ –200 пс.

Экспериментальными образцами служили пленки Армко-железа толщиной 480, 580, 740, 970 и 1160 нм, нанесенные магнетронным методом на стеклянные подложки толщиной 150 мкм. В качестве магнетронной мишени использовалась пластина Армко-железа чистотой 0.95. Толщина образцов измерялась в области лазерного воздействия с помощью атомно-силового микроскопа Veeco, Multi-mode 5 с точностью ± 5 нм.

В проводимых экспериментах свободная поверхность исследуемых образцов разной толщины позиционировалась с помощью микроманипулятора 9 (см. рис. 1) в предметную плоскость OO' объектива интерферометра (см. вставку на рис. 1) с точностью не хуже 2 мкм. Настройка осуществлялась по максимальному контрасту интерференционных полос. При этом точность установки единой (относительной) временной шкалы измерений при смене об-

разцов с разной толщиной пленки составляет менее 100 фс, что существенно меньше временного разрешения измерений. Данная погрешность складывается из различия в толщине подложек и точности позиционирования поверхности образца и в сумме не превышает 10–20 мкм. Поделив погрешность по толщине на скорость света, определяем указанную неточность менее 100 фс. Для приведенного набора толщин пленок разница времен выхода на тыльную поверхность составляет десятки пикосекунд. Поэтому погрешностью измерений разницы времен выхода УВ, связанной с точностью позиционирования и различием толщин образцов, можно пренебречь.

Для определения начала отсчета времени, аналогично работе [29], в эксперименте использовалась дополнительный пленочный образец толщиной 20 нм. Толщина этого образца сравнима с глубиной поглощения лазерного излучения в железе. Энергия импульса поглощается электронами проводимости и далее передается в решетку за характерное время электрон-фононного теплообмена порядка 1 пс [61], после чего начинается движение тыльной поверхности пленки. Отметим, что аналогичные процессы поглощения излучения и нагрева решетки имеют место и при воздействии лазера на другие образцы. Таким образом, момент времени начала смещения пленки толщиной 20 нм может быть принят за начальный отсчет времени $t_0 = 0$. Такая шкала времени ассоциирована с абсолютным временем движения импульса сжатия из области нагрева до свободной поверхности в каждой из пленок. Точность определения момента t_0 нами оценивается на уровне ± 1 пс.

При обработке данных применялся метод фурье-анализа интерферограмм, включающий процедуру их сравнения и позволяющий восстановить пространственно-временное распределение изменения амплитуды $\Delta A(y, t)$ и фазы $\Delta \varphi(y, t)$ отраженной диагностической волны (здесь y — пространственная координата вдоль щели спектрометра). Величина смещения Δz поверхности связана с изменением фазы посредством соотношения

$$\Delta z = \lambda \Delta \varphi / 4\pi. \quad (1)$$

В каждом опыте записывались три интерферограммы: интерферограмма поверхности образца до воздействия (начальная), в момент выхода УВ (временная) и после окончания процесса — спустя несколько секунд после воздействия (финальная). Сопоставление начальной и временной интерферограмм дает информацию о пространственно-временной динамике УВ-процесса.

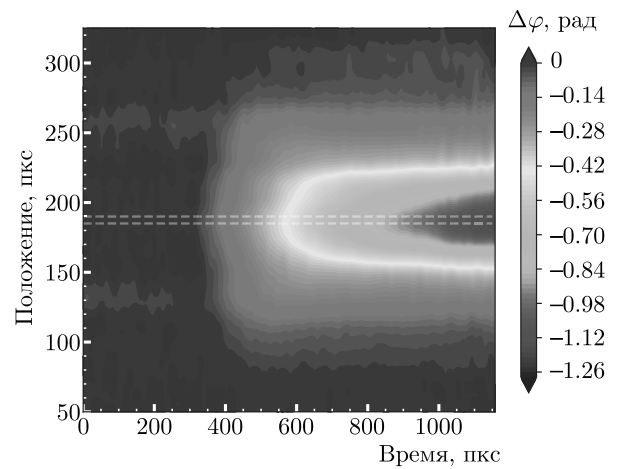


Рис. 2. (В цвете онлайн) Пространственно-временное распределение фазы диагностического импульса при выходе УВ на тыльную поверхность образца железа толщиной 970 нм. Профиль смещения $z(t)$ строится для области между штриховыми прямыми. Масштабы по осям ординат и абсцисс были рассчитаны переводом пикселей матрицы в меры длины 0.4 мкм/пкс и времени 0.167 пс/пкс. Цветовая шкала дана в радианах

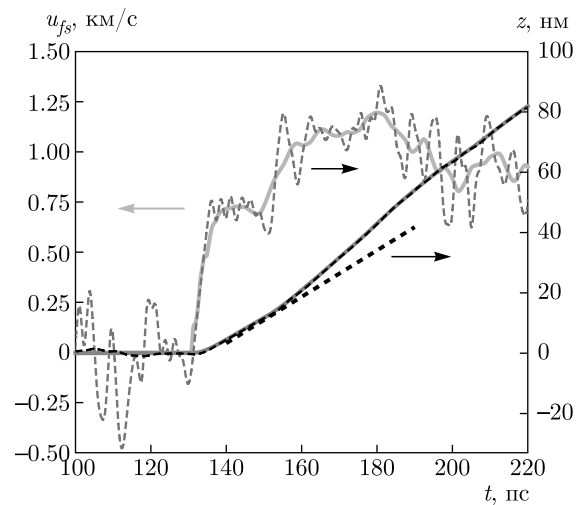


Рис. 3. (В цвете онлайн) Результат численного дифференцирования смещения $z(t)$ свободной поверхности, измеренного в эксперименте, показан серой штриховой линией. Итоговый профиль скорости поверхности пленочного образца железа толщиной 970 нм, $u_{fs}(t)$ (желтая кривая) получен численным дифференцированием с последующим сглаживанием экспериментально полученного смещения $z(t)$ (штриховая черная кривая). Итерационная обработка обеспечивает наилучшее соответствие интеграла сглаженного профиля скорости (красная кривая) измеренному профилю $z(t)$

На рис. 2 в качестве примера приведено пространственно-временное распределение фазы $\Delta\varphi(y, t)$ диагностической волны, описывающее динамику пространственно-неоднородного движения тыльной свободной поверхности пленочного образца железа толщиной $h = 970$ нм в момент выхода УВ, генерируемой излучением лазера с энергией $E = 100$ мкДж. Пример обработки экспериментальных данных приведен на рис. 3.

Профили построены для центральной части области воздействия с интегрированием по пространственному интервалу ± 2 мкм, что соответствует диапазону вариации плотности энергии падающего излучения $\Delta F/F_0 = 0.01$. На рис. 3 показаны профили смещения и скорости свободной тыльной поверхности образца толщиной 970 нм после прихода УВ. Смещение поверхности (черная кривая) вычислялось непосредственно по фазовому сдвигу из измеренного в эксперименте фазового распределения $\Delta\varphi(y, t)$ на рис. 2. Результирующий профиль скорости поверхности (желтая кривая на рис. 3) был получен путем дифференцирования профиля смещения (серая кривая) с последующим сглаживанием и итерационной обработкой, обеспечивающей наилучшее соответствие интеграла скорости (красная кривая) измеренному профилю $z(t)$.

Таким образом, применяемая схема измерений обеспечивала непрерывную регистрацию смещения $\Delta z = \Delta z(t)$ поверхности образца как функции времени с пространственным разрешением $\delta y \approx 2$ мкм по радиальной координате в плоскости мишени и с временным разрешением $\delta t = 1$ пс во временном диапазоне 0–200 пс, определяемыми дисперсией спектрометра. Применяемый алгоритм фурье-анализа двумерных интерферограмм [62] с процедурой нормировки фазовых распределений обеспечивает погрешность измерения сдвига фазы диагностического импульса на уровне $\delta\psi \approx 0.01$ рад, что соответствует погрешности определения величины смещения поверхности на уровне $\delta z \leq 1$ –2 нм.

3. ОБРАТНЫЙ АНАЛИЗ КИНЕМАТИЧЕСКИХ ДАННЫХ

3.1. От кинематики к динамике и внутренним состояниям среды

После первичной обработки мы получили кинематическую информацию — историю скорости свободной границы $u_{fs}(t)$ в экспериментах с разной толщиной пленки. Возможны несколько подходов построения теоретического описания. описа-

ние УВ-профилей может проводиться аналитически. Исследователь извлекает информацию о времени прихода УВ, характерных изломах и, полагая, что в веществе мог наблюдаться тот или иной физический эффект, интерпретирует результаты в рамках модельных представлений об упруго-пластических и полиморфных превращениях.

Другой подход является прямым численным моделированием. Такой подход применяется, когда аналитически учесть влияние параметров физической модели затруднительно. В результате серии расчетов подбираются параметры такой модели и делается вывод о ее применимости на основе сопоставления с экспериментом расчетных профилей $u_{fs}(t)$. При этом физическая модель может быть основана на свойствах исследуемого вещества, известных априори и не зависящих от описываемого эксперимента явно. Построение модели может быть сложным, поэтому на пути достижения согласия между опытом и расчетом переходят к более упрощенным феноменологическим моделям.

Такие феноменологические модели ставят своей целью приближенное описание сложного физического явления, например, кинетики фазового перехода, разрушения или химических реакций в сложной микрокристаллической структуре материала. Варьирование параметров таких моделей опирается лишь на описание интересующего эксперимента, что и позволяет достичь конечной цели — согласия расчетных и экспериментальных данных. Для моделирования полиморфного фазового перехода $\alpha \rightarrow \varepsilon$ в железе при микросекундных воздействиях данный подход успешно используется в работе [53].

Рассматриваемые в нашей работе ультракороткие воздействия на металл с полиморфным фазовым переходом усложняют формулировку упомянутых выше физических моделей. Во-первых, модель должна охватывать поглощение излучения и двухтемпературную (2Т) физику — электрон-ионную релаксацию и распространение тепла по электронной подсистеме из слоя поглощения. Во-вторых, модель согласованной тепловой и динамической частей задачи описывает трансформацию фемтосекундного нагрева в давление. Для этого строится система 2Т-уравнений, которая приведена в работе [63]. В результате уравнения и термодинамическое состояния среды, где давление инициирует движение УВ, применяются в гидростатическом приближении. В-третьих, УВ выходит из зоны плавления лазером, и ее дальнейшее распространение происходит в твердой фазе. Поэтому распространение УВ в пленке железа необходимо рассчитывать для де-

формируемого твердого тела с учетом наличия полиморфного фазового перехода.

Предлагается подход получения данных о плотности $\rho(h, t)$ и продольном напряжении $\sigma(h, t)$. Для этого аппроксимируется функция $u_{fs}(h, t)$ на основе экспериментальных результатов для разной толщины пленки h . Подход требует проведения экспериментов для минимум двух [21] или трех [59] разных толщин пленок в зависимости от порядка аппроксимирующих полиномов. Мы используем кусочно-линейную аппроксимацию скорости, поэтому в модель закладывается аппроксимация только первой производной скорости свободной поверхности. Поскольку исходными данными являются временные профили координат свободных поверхностей, использование аппроксимации более высокого порядка означало бы аппроксимацию третьей производной от измеряемой величины. По значениям ρ и σ , зная ударные адиабаты упругого сжатия и пластического сжатия в α - и ε -фазах, мы можем определить фазовое состояние твердого тела.

3.2. Метод интерпретации экспериментальных данных

В работе [57] предложен и затем в работах [21, 59, 60] развит метод восстановления профилей напряжения и деформации на основе экспериментальных профилей скорости свободной границы, $u_{fs}(t)$, в образцах разной толщины. Методика при этом основывается на восстановлении функции скорости свободной поверхности от двух переменных, $u_{fs}(t, h)$, — времени t и лагранжевой координаты h . Каждый профиль скорости свободной поверхности суть зависимость $u_{fs}(t)$ при данной толщине h пленки железа. Для перехода от скорости свободной поверхности к массовой скорости u (т. е. скорости лагранжевых частиц) используется соотношение $u_{fs} = 2u$. Соотношение справедливо в приближении линейной акустики, пока давление намного меньше объемного модуля сжатия материала (170 ГПа в железе). В результате получается набор профилей, измеренных с высоким разрешением по времени, но для нескольких толщин образцов (например, для двух толщин [21]). Мы обладаем информацией о временной зависимости скорости свободной поверхности для пяти различных толщин пленок, которые будут использоваться для построения модели.

Для расчета продольного напряжения σ и деформации $\mu \equiv 1 - V/V_0$ требуется интегрировать уравне-

ния движения вещества в некоторой ограниченной области экспериментальных данных:

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} = -\frac{\partial u}{\partial h}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial h} = -\rho_0 \frac{\partial u}{\partial t}. \quad (3)$$

Для определения напряжения в момент (t_1, h_1) необходимо проинтегрировать по h производную $\partial u / \partial t$ от граничной точки h_b :

$$\sigma(t_1, h_1) - \sigma(t_1, h_b) = -\rho_0 \int_{h_b}^{h_1} \frac{\partial u}{\partial t}(h, t_1) dh. \quad (4)$$

Для вычисления деформации в момент (t_1, h_1) интегрируется по времени частная производная $\partial u / \partial h$ по переменной t от граничной точки t_b :

$$\mu(t_1, h_1) - \mu(t_b, h_1) = -\int_{t_b}^{t_1} \frac{\partial u}{\partial h}(h_1, t) dt. \quad (5)$$

Интегрирование проводится от границы $t_b(h)$ или $h_b(t)$, где $\sigma = 0$ и $\mu = 0$ — это состояния до прихода УВ. А вторая точка выбирается на профиле — t_1 или h_1 . Задание граничных условий дает представление об области определения, где функция $u(h, t)$ принимает ненулевые значения. При этом мы обладаем лишь конечным набором экспериментальных профилей для весьма ограниченного набора пленок (пять различных толщин), но с относительно высоким разрешением по времени $\Delta t \approx 1$ пс.

3.3. Методика интегрирования кинематических соотношений

Мы используем упрощенную форму аппроксимации скорости, отбрасывая квадратичный член в отличие от работы [59]:

$$u(h, t) = \frac{u_i(h)[t_{i+1}(h) - t] - u_{i+1}(h)[t - t_i(h)]}{t_{i+1}(h) - t_i(h)}, \quad (6)$$

где $t_i(h) < t < t_{i+1}(h)$. В уравнении (6) $t_i(h)$ и $u_i(h)$ — функции от h , которые определяются соответственно кусочно-линейной интерполяцией и кубическим сплайном на экспериментальных профилях. Нижние индексы « i » соответствуют разным опорным точкам, выбранным на каждом профиле $u_{fs}(t)$ вручную. Точки соединяются между собой кусочно-линейной функцией. Моменты времени выбираются возрастающими, $t_i(h) > t_{i-1}(h)$, с индексом « i ». Функция $h_i(t)$ обозначает обратную функцию $t_i(h)$.

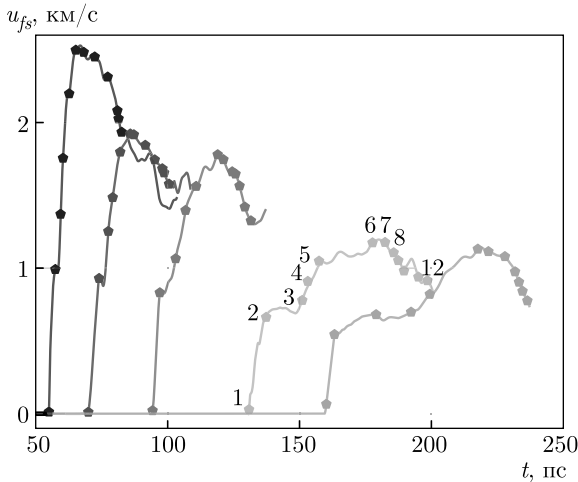


Рис. 4. (В цвете онлайн) Профили скорости свободной поверхности для пленок толщиной 480, 580, 740, 970 и 1160 нм (слева-направо). На каждом профиле выбрано по 12 характерных точек для аппроксимации экспериментальных зависимостей при обратном анализе серии профилей

Ошибки метода являются его важной характеристикой из-за малого количества профилей для разных h и свободы выбора опорных точек на профиле, поэтому изучаются, например, в работе [59], где указывается, что ошибка метода достигает своего максимума для наименьшей и наибольшей толщин пленок. В данной работе частные производные в уравнениях (4) и (5) аппроксимируются конечными разностями, а интегрирование проводится численно в отличие от, например, работ [57, 59], где расчет ведется с аналитически заданной кусочной функцией $u(h, t)$, первообразные которой вычисляются заранее для каждого отдельного участка интегрирования. Для внутренних точек применяется центральная разность

$$\frac{u(h + \Delta h, t) - u(h - \Delta h, t)}{2\Delta h}.$$

Для точек возле границы области определения производная

$$\frac{\partial u}{\partial h} \approx \frac{\Delta u}{\Delta h} \quad (7)$$

аппроксимируется направленной конечной разностью, кроме случая с наименьшей толщиной пленки,

$$\frac{u(h_s, t) - u(h_s - \Delta h, t)}{\Delta h},$$

$$\frac{u(h_l + \Delta h, t) - u(h_l, t)}{\Delta h},$$

где h_s и h_l принадлежат границе расчетной области, $\Delta h = (h_l - h_s)/N$, $N = 300$ — число, подобран-

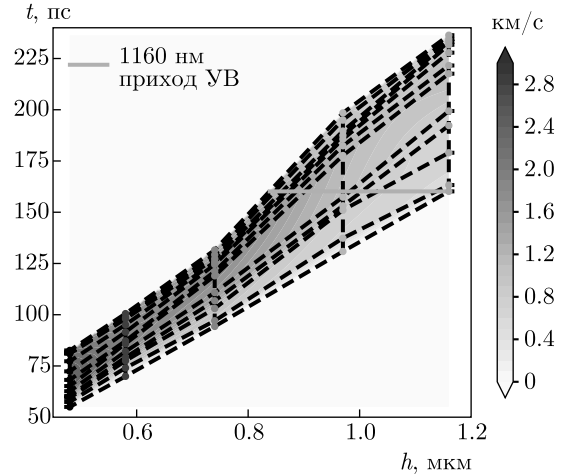


Рис. 5. (В цвете онлайн) Функции $t_i(h)$ заданы в виде кусочно-линейной интерполяции и построены по опорным точкам с рис. 4. Раскраска соответствует значениям скорости свободной границы $u_{fs}(h, t)$. Кружки показывают положение опорных точек, а их цвет соответствует кривым на рис. 4

ное для достижения сходимости при интегрировании. Одна из особенностей методов интегрирования системы уравнений (2) и (3) кинематических соотношений, в отличие от классических подходов (регистрируются время прихода волны, скачок массовой скорости при известной толщине образца), состоит в том, что диаграммы напряжений и деформации зависят лишь от относительного расположения на временной оси профилей скорости свободной поверхности в образцах разной толщины. Другими словами, диаграмма напряжения деформации инвариантна по отношению к смещениям времени прихода волны во всех экспериментах или к увеличению всех толщин пленок на одинаковую величину. В случае пленки с наименьшей толщиной предлагается использовать абсолютное время прихода волны и величину скорости свободной поверхности на упругом предвестнике (точка 2 на рис. 4 для профиля пленки $h = 480$ нм). При этом используется предположение, что волна движется со средней постоянной скоростью $U_{s1} = h_1/t_2(h_1)$, где $t_2(h_1)$ — время, соответствующее точке 2 на профиле для самой тонкой пленки $h_1 = 480$ нм. В результате можно оценить производную из выражения (7):

$$\frac{\partial u}{\partial h} \approx \frac{\partial u}{\partial t} U_{s1}^{-1}. \quad (8)$$

Аналогичным образом рассчитываются выражения для частной производной по времени:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{\Delta u}{\Delta t}. \tag{9}$$

Шаг по времени $\Delta t(h) = [t_l(h) - t_s(h)]/N$, где задана разность между первой $t_s(h)$ и последней $t_l(h)$ опорными точками на профиле $u_{fs}(t)$ для данной толщины, т.е. шаг зависит от h . Вследствие интегрирования по толщине h в выражении (4), необходимо определить и зависимость от нее, как показано на рис. 5.

3.4. Достоверность методики из сравнения с численным моделированием

Проводится сравнение σ - V/V_0 -диаграмм с целью обоснования достоверности предложенной методики. В одном случае напряжения и плотности извлекаются напрямую из моделирования методом молекулярной динамики (МД), который используется в качестве источника полной информации о механическом и термодинамическом состояниях группы лагранжевых координат (в качестве которых взято начальное положение частиц) при $h = 150, 160, 200, 250, 300, 350, 400, 450, 500, 550, 600$ нм. В другом случае напряжения и деформации рассчитываются лишь на основании информации о временных зависимостях скорости всех лагранжевых частиц, которые изображены на рис. 6. При этом интегрирование законов сохранения основано на двумерной интерполяции временных зависимостей скорости этих частиц (рис. 7).

Начальная стадия процесса моделируется с помощью 2Т-гидродинамики. При воздействии коротких лазерных импульсов температура электронов, поглощающих лазерное излучение, может значительно превосходить температуру ионной подсистемы. С помощью гидродинамического моделирования проводится полный расчет поглощения лазерного импульса, сопряженного с процессами электрон-ионной релаксации и теплопроводности. На временах, больших по сравнению с временами электрон-электронной и ион-ионной релаксации, электронная и ионная подсистемы обладают своими квазиравновесными температурами T_e и T_i [3]. При этом время 2Т-стадии, в течение которого $T_e \gg T_i$ и которое определяется темпом электрон-ионной релаксации, благодаря большому различию масс электронов и ионов может быть существенно больше. При достаточно большой энергии лазерного импульса движение вещества становится заметным уже на

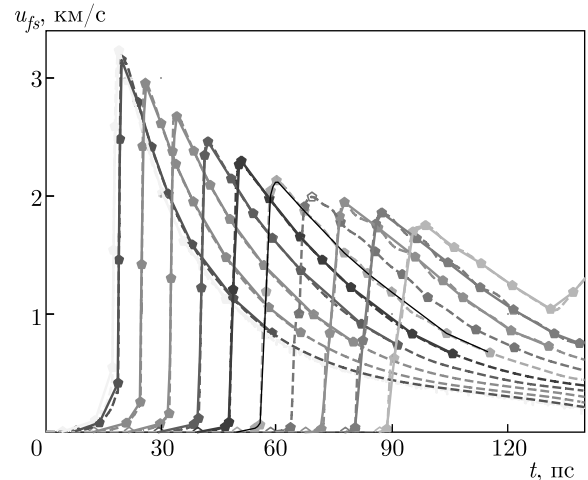


Рис. 6. (В цвете онлайн) История удвоенной скорости лагранжевых частиц из МД-моделирования с начальными положениями 150, 160, 200, ..., 600 нм (кривые слева направо). Точки соединяются кусочно-линейной функцией, которая используется при аппроксимации функции $u(h, t)$ и изображена сплошными линиями. Штриховые линии построены на основе исходных данных МД-моделирования

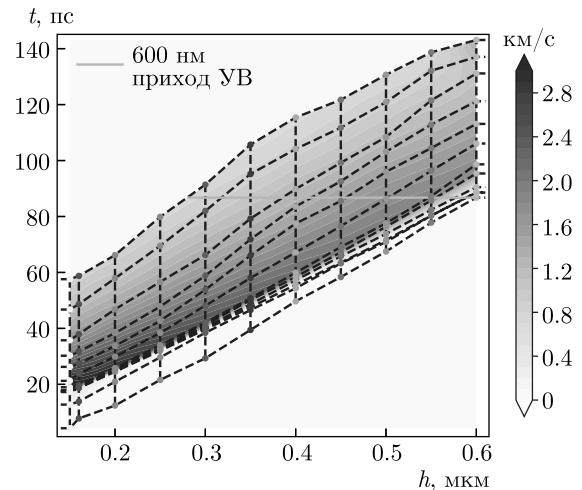


Рис. 7. (В цвете онлайн) Функции $t_i(h)$ заданы в виде кусочно-линейной интерполяции и построены по опорным точкам с рис. 6. Раскраска в соответствии со значением скорости свободной границы $u_{fs}(h, t)$. Кружки показывают положение опорных точек, а их цвет соответствует цвету кривых на рис. 6

2Т-стадии, что делает необходимым рассматривать тепловую задачу совместно с уравнениями движения в рамках единой 2Т-гидродинамики [64]. Система уравнений 2Т-гидродинамики имеет вид [65, 66]

$$\frac{\partial x(x^0, t)}{\partial t} = u(x^0, t), \quad \frac{\rho \partial x(x^0, t)}{\partial x^0} = \rho_0,$$

$$\frac{\partial u(x^0, t)}{\partial t} = -\frac{\partial P(x^0, t)}{\rho^0 \partial x^0}, \quad P = P_e + P_i,$$

$$\frac{\partial E_e(x^0, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\rho^0 \partial x^0} \left(\frac{\kappa_e \rho}{\rho^0} \frac{\partial T_e}{\partial x^0} \right) - Q_{ei} + \frac{Q(x^0, t)}{\rho} - P_e \frac{\partial u}{\rho^0 \partial x^0},$$

$$\frac{\partial E_i(x^0, t)}{\partial t} = Q_{ei} - P_i \frac{\partial u}{\rho^0 \partial x^0},$$

$$Q_{ei} = \alpha(T_e - T_i),$$

где E_e , E_i , α — удельные (на единицу массы) электронная и ионная энергии и коэффициент электрон-ионного теплообмена, κ_e — коэффициент электронной теплопроводности. При постоянной начальной плотности ρ^0 в качестве лагранжевой переменной можно использовать начальную координату x^0 . Система замыкается уравнениями состояния (УРС) вещества и материальными моделями коэффициентов теплопроводности и электрон-ионного теплообмена. Ионная (фононная) теплопроводность отсутствует, так как пренебрежимо мала по сравнению с электронной. Облучаемая мишень состоит из железа и стекла, на которое оно нанесено. Поскольку они имеют существенно разные плотности, в лагранжевом описании надо задать или начальную длину ячеек в стекле больше (обратно пропорционально отношению плотностей стекла и железа), или различную массу в ячейках (пропорционально начальной плотности). Был использован второй подход, дающий более точное описание движения в стекле.

Картина возникающей при этом волны сжатия характеризуется наличием слоя прогрева, связанного с теплопроводностью, с одной стороны, и опережающей УВ, с другой. УВ опережает волну теплопроводности на глубине 500 нм. Мы же извлекаем профиль скорости лагранжевой частицы как функцию времени, используя в МД-расчете этот профиль при воздействии на образец железа подвижным потенциальным барьером с такой же зависимостью скорости от времени. Таким образом имитируется воздействие лазерной УВ, проникающей внутрь пленки железа.

Для описания ионной подсистемы (без вклада электронной подсистемы) железа (P_i , E_i) использовалось табулированное широкодиапазонное УРС для α -железа в твердом состоянии, составленное Хищенко на основе работ [67–69].

Для электронной подсистемы железа (УРС, коэффициент теплопроводности, коэффициент элект-

рон-ионного теплообмена) использовались аналитические формулы, полученные из анализа результатов расчетов методами теории функционала плотности (DFT) с помощью пакета VASP. Использовались аналитические формулы построенные Петровым для переходных металлов [70].

В стекле свободные электроны отсутствуют, $P_e = 0$, $E_e = 0$, т.е. применяется однотемпературная гидродинамика. Используется калорическое УРС (типа Ми–Грюнайзена), предоставленное Хищенко. Начальная плотность в стекле при этом $\rho_0 = \rho_{0, glass} = 2.2 \text{ г/см}^3$.

За время действия лазерного импульса смещение вещества очень мало. Тепловой источник Q , описывающий поглощение лазерного излучения в железе с $x^0 > 0$, можно взять в простейшем виде с замороженным в вещество (зависящим только от x^0) пространственным профилем:

$$Q(x^0 > 0, t) = \frac{F_{abs}}{\sqrt{\pi} d_{skin} \tau} \times \exp \left[-\frac{x^0}{d_{skin}} - \left(\frac{t}{\tau} \right)^2 \right]. \quad (10)$$

Здесь для железа F_{abs} — поглощенный флюенс, d_{skin} — толщина скин-слоя (глубина поглощения), τ — длительность импульса. Время t отсчитывается от максимума импульса.

Величина поглощенного тепла рассчитывалась на основе экспериментальных данных и качественно-эмпирических соотношений. Количественная оценка плотности поглощенной энергии от падающей энергии F_0 определяется коэффициентом поглощения в железе [71] и равна 1.1 мДж/см^2 . Затем энергия делится между пластинкой железа и стеклом. В предположении, что на границе железа и стекла произошел пробой и горячие электроны из металла передали часть тепла в стекло, доли поглощенной энергии в металле и в стекле определяются на основе наилучшего совпадения расчетного и экспериментального профилей скорости свободной поверхности в пленке железа толщиной 160 нм. В расчете было взято $F_{abs} = 400 \text{ мДж/см}^2$, $d_{skin} = 15 \text{ нм}$, $\tau = 0.5 \text{ пс}$.

Нагрев стекла с $x^0 < 0$ моделировался тепловым источником Q в виде

$$Q(x^0 < 0, t) = \frac{F_{glass}}{\sqrt{\pi} d_{glass} \tau} \times \exp \left[\frac{x^0}{d_{glass}} - \left(\frac{t}{\tau} \right)^2 \right], \quad (11)$$

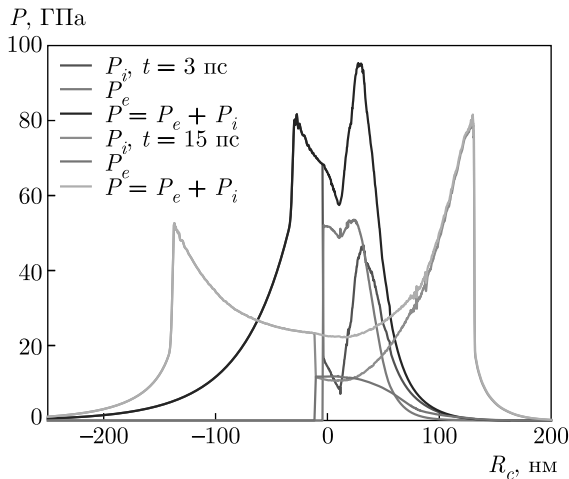


Рис. 8. (В цвете онлайн) Профили давления вблизи границы железо–стекло в моменты времени 3 и 15 пс в зависимости от расстояния R_c от этой границы. Для железа показаны ионное P_i , электронное P_e и полное $P = P_i + P_e$ давление. В стекле существует только полное давление $P = P_i$, электронный вклад отсутствует

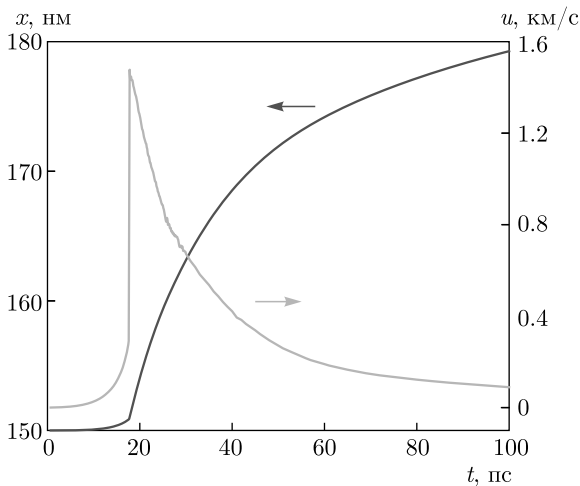


Рис. 9. (В цвете онлайн) Координата x и скорость u лагранжевого узла с начальной координатой $x = 150$ нм

где $F_{glass} = 700$ мДж/см² — поглощенный флюенс, $d_{glass} = 50$ нм — толщина скин-слоя.

На рис. 8 для примера приведен характерный вид профилей давления в конце 2Т-стадии (3 пс) и в момент времени, когда вклад электронной составляющей убывает (15 пс).

В МД-моделировании расчет использует информацию о скорости лагранжевого узла на глубине 150 нм, полученной в гидродинамическом 2Т-моделировании поглощения лазерного импульса тонкой пленкой на стеклянной подложке. На рис. 9 показан ход положения и скорости этого узла во времени.

МД-моделирование проводится в образце размерами $600 \times 60 \times 10$ нм³ и состоит из периодически повторяемой поликристаллической структуры размерами $60 \times 60 \times 10$ нм³, размноженной 10 раз вдоль оси распространения ультракороткого импульса. На левой границе на образец в начальный момент времени начинает действовать потенциальный барьер, движущийся по закону, повторяющему историю движения частицы в расчете 2Т-гидродинамики. Результаты МД-моделирования были обработаны для извлечения истории эволюции группы лагранжевых частиц. Лагранжевы частицы представляют собой срезы шириной 0.25 нм одномерных профилей вдоль оси распространения волны.

Аппроксимация функции $u(h, t)$ показана выше на рис. 7 с выделением узловых точек и градациями серого соответственно значениям скорости свободной поверхности. Метод воспроизводит напряжения и деформации, наблюдаемые в расчете методом МД. На рис. 10а изображены ударные адиабаты упругой и пластической α -фазы, адиабата ϵ -фазы и расчетная адиабата ϵ -фазы для использованного МД-потенциала. На рис. 10б показаны временные зависимости продольного напряжения для различных лагранжевых частиц. Последний момент времени, для которого историю напряжения можно восстановить, ограничен моментом прихода УВ в лагранжеву частицу с наибольшей начальной координатой.

На рис. 10в приведены карты распределений локальных параметров порядка атомов Q_4 и Q_6 , предложенные в работах [72, 73]. Для визуализации атомной структуры в МД можно было использовать лишь параметр центральной симметрии [74]. Однако существует проблема в определении различных кристаллических структур, что связано с увеличивающимися флуктуациями потенциальной энергии атомов с ростом температуры. Преимуществом этого метода определения кристаллической структуры [71, 72] является слабая зависимость от температуры и независимость от плотности в совокупности с малой вычислительной сложностью.

Для выделенного атома функции Q_{lm} в сферической системе координат зависят только от углов, характеризующих радиус-вектор $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ между парой атомов. Среднее по соседним атомам окружения выделенного атома рассчитывается следующим образом:

$$\bar{Q}_{lm}(i) = \langle Y_{lm}(\theta(\mathbf{r}_{ij}), \phi(\mathbf{r}_{ij})) \rangle, \quad (12)$$

$$Q_l^2 = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l |\bar{Q}_{lm}|^2, \quad (13)$$

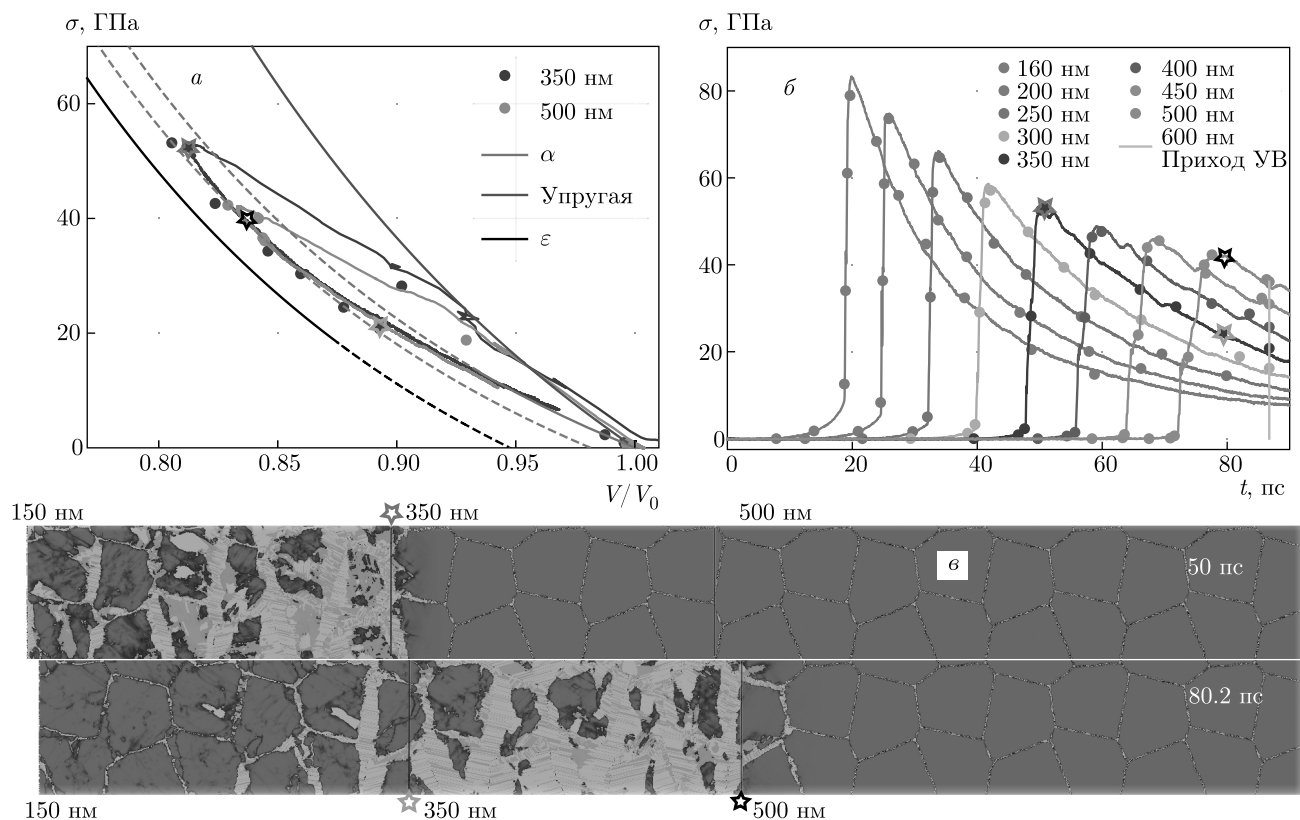


Рис. 10. (В цвете онлайн) *а*) Расчет фазовой кривой $\sigma - V/V_0$ на основе кинематических соотношений из МД-моделирования для пленок толщиной 350 и 500 нм. Восстановленные точки методом обратного анализа располагаются вблизи сплошных линий того же цвета, что соответствует расчетам методом МД. Ударные адиабаты различных фаз железа показаны сплошными (в стабильной фазе) и штриховыми (в метастабильной фазе) линиями. Адиабата ϵ -фазы железа в МД-моделировании показана штриховой серой линией. *б*) Восстановленные временные профили напряжения для лагранжевых частиц с различными начальными координатами. *в*) Карты распределения параметров симметрии [74]. Синий, красный и зеленый цвета соответствуют α -, γ - и ϵ -фазам железа. Звездочки показывают положение лагранжевых частиц с координатами 350 и 500 нм в моменты времени 50 и 80.2 пс. Левый край образца контролируется движением лагранжевой частицы с координатой 150 нм, взятой из гидродинамического моделирования (см. разд. 2.4)

где Y_{lm} — сферические гармоники, θ и ϕ — полярный и азимутальный углы сферической системы координат для вектора \mathbf{r}_{ij} . Усреднение проводится по соседним атомам, которые являются соседями в локальной диаграмме Вороного. Локальный параметр порядка инвариантен по отношению к ориентации системы координат и преобразований вращения системы атомов, которым и является квадрат Q_l в уравнении (13). Более того, параметры порядка, для которых $l = 4$ и $l = 6$, различают тип кристаллической решетки и при высоких температурах [75].

Координата в плоскости Q_4 – Q_6 определяет раскраску кристаллических фаз железа на рис. 10в, в том числе при температурах, таких что области возможных значений параметров Q_4 и Q_6 для разных типов кристаллических решеток могут пере-

крываться. ОЦК-фаза характеризуется значениями

$$Q_4^{bcc} = 0.03636965, \quad Q_6^{bcc} = 0.5106882$$

для идеального кристалла, ГПУ-фаза —

$$Q_4^{hcp} = 0.09722222, \quad Q_6^{hcp} = 0.4847617,$$

а ГЦК-фаза —

$$Q_4^{fcc} = 0.1909407, \quad Q_6^{fcc} = 0.5745243.$$

Близость ГЦК- и ГПУ-структур затрудняет их различие, однако сосуществование как ϵ -, так и γ -фаз железа экспериментально наблюдалось при коротких лазерных воздействиях [76]. Для различия фаз на плоскости в координатах Q_4 и Q_6 выделены границы значений для каждой фазы, а также условие

для значения параметра центральной симметрии C_S [74]. Проверка по условию $C_S < 2.5$ позволяет определить, что данное вещество является либо кристаллом, либо жидкой фазой. Кубические и гексагональные решетки разграничены пороговым значением параметра центральной симметрии $C_S > 4.9$. Если решетка кубическая, то при $Q_4 > Q_4^{hcp}$ пиксель на карте раскрашивается согласно ГЦК, а в противном случае — ОЦК.

3.5. Расчеты из кинематических соотношений

Применим описанную методику к расчетам диаграмм $\sigma-V/V_0$ с использованием экспериментальных данных для скорости свободной поверхности $u_{fs}(t)$. Первым шагом является аппроксимация функции $u_{fs}(h, t)$. Опорные точки целесообразно выбирать соответствующими физически одинаковым изломам на графиках профилей скорости для разных значений h , что вносит предположение о наличии одинакового числа таких особенностей на графиках. Хотя при отсутствии, например, явно выраженного упругого предвестника можно внести большее число точек в аппроксимацию фронта пластической волны.

Выше на рис. 4 показан выбор набора точек — по 12 штук с каждого профиля, всего 5 профилей. В результате получены упрощенные профили, где соседние точки соединены прямыми линиями. На каждом профиле первая точка 1 относится к приходу волны, 2–3–4–5–6–7 — участок подъема до максимальной амплитуды, причем точки выбирались на изломах профилей, а точки 8–9–10–11–12 соответствуют убывающей части. Двенадцать функций $u_i(h)$ и $t_i(h)$ для каждого набора из пяти точек задают функцию двух переменных, которая показана выше на рис. 5, где штриховыми линиями выделены кусочно-линейные функции $t_i(h)$. Выбор точек на схожих особенностях профилей позволяет получать более гладкие зависимости $u_i(h)$ и $t_i(h)$.

На рис. 11 представлены результаты расчета диаграмм напряжения и деформации для профилей пленок толщиной 480, 580, 740 и 970 нм. Для расчета проводится численное интегрирование выражений (4) и (5) с использованием граничного условия для функции $u(h, t_1(h)) = 0$ вдоль границы до прихода волны. Другими словами, нижние пределы интегрирования по переменным h или t для данных $t_1(h)$ или $h_1(t)$ соответствуют точкам на нижней штриховой кривой на рис. 5. В нашей работе в аппроксимации функции $u(h, t)$ отсутствует явный учет раз-

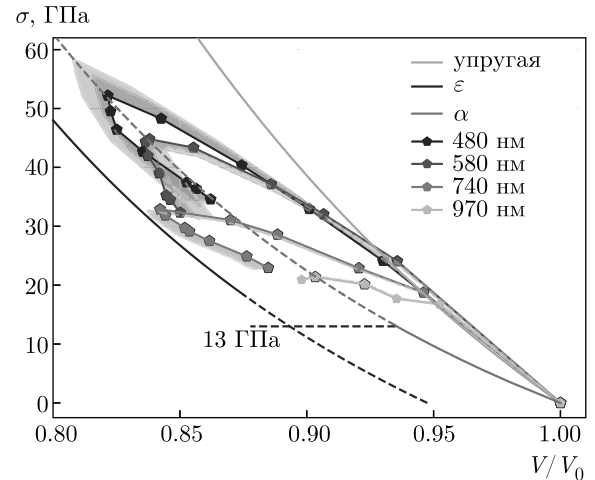


Рис. 11. (В цвете онлайн) Расчет фазовой кривой методом обратного анализа кинематических данных показан точками, соединенными сплошными линиями. Точки соответствуют набору опорных точек с рис. 4. Ударные адиабаты различных фаз железа показаны сплошными (в стабильной фазе) и штриховыми (в метастабильной фазе) линиями. Области отклонения траекторий состояний лагранжевых частиц от соответствующих траекторий по исходным экспериментальным данным показаны градиациями цветов между соответствующими траекториями. Отклонения основаны на варьировании толщин пленок 480 и 580 нм с корректировкой времени прихода УВ в пленки с проварьированной толщиной. Значение давления прямого фазового превращения $\alpha \rightarrow \epsilon$ на субмикросекундном масштабе отмечено черной штриховой прямой

рывов, в отличие от работы [59]. Все точки соединены кусочно-линейной интерполяцией. Численное интегрирование функций (4) и (5) проводится с использованием библиотеки Quadpack [77]. Процедура расчета реализована в виде интерактивных скриптов на языке Python в среде Jupyter [78]. Поиск напряжения и деформации проводится лишь в области интерполяции, поэтому мы ограничены моментом прихода упругой волны для профиля наибольшей толщины. Данный момент времени отмечен горизонтальной желтой сплошной прямой на рис. 5. При расчете диаграммы $\sigma-V/V_0$ последний момент времени равен приблизительно 160 пс. Поэтому, в частности, профиль скорости свободной поверхности в пленке толщиной 970 нм рассчитан лишь частично.

Таким образом, на рис. 11 представлена диаграмма $\sigma-V/V_0$ лагранжевых частиц для пленок толщиной 480, 580, 740 и 970 нм. Ударная адиабата упругой УВ построена по точкам с номером 2 на профилях с рис. 4. Для первого профиля скорость УВ

оценивается из ширины пленки и времени прихода, а для остальных пленок — по отношению разницы толщин пленок к разнице времен для точек с номером 2 текущего и предыдущего профилей с меньшей толщиной. Ударные адиабаты заданы линейной зависимостью скорости ударной волны от скорости вещества за фронтом ($c_a + s_a u$) и начальной плотностью ρ_0 . Для упругой ударной адиабаты величина $c_a = 6$ км/с полагалась равной скорости звука из работы [20]. Параметр $s_a = 1.148$ рассчитан методом наименьших квадратов. Пластические ударные адиабаты основаны на экспериментальных данных [41] со следующим набором параметров для α -фазы:

$$c_a^\alpha, s_a^\alpha, \rho_0^\alpha = 4.63 \text{ км/с}, 1.33, 7.874 \text{ кг/м}^3,$$

а для ε -фазы:

$$c_a^\varepsilon, s_a^\varepsilon, \rho_0^\varepsilon = 4.83 \text{ км/с}, 1.33, 8.31 \text{ кг/м}^3.$$

Давление 13 ГПа отмечает границу существования стабильной α -фазы железа. На рис. 11 сплошной линией показана стабильная часть ударной адиабаты ε -фазы при высоких давлениях, а штриховой — метастабильная фаза. Результаты расчетов исследуются на предмет влияния варьирования толщины пленки и соответствующего времени прихода УВ.

На рис. 11 представлены два варианта варьирования, которые изображаются градациями цветов соответствующих траекторий лагранжевых частиц в области возможных значений и ограничены серыми штриховыми линиями. В первом варианте толщина пленки увеличена от 580 до 600 нм и соответствующее время прихода УВ запаздывает на 2.3 пс (более насыщенный цвет); во втором — помимо варьирования толщины пленки 580 нм, была уменьшена до 460 нм толщина пленки 480 нм с учетом более раннего прихода волны на 2.3 пс (серые штрихи). Как варьирование, так и расчеты по исходным данным приводят к качественно одинаковым результатам.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Переход $\alpha \rightarrow \varepsilon$ может происходить в области за пиком давления в волне разгрузки, что наблюдается частично для пленок толщиной 480, 580 и 740 нм при использовании метода обратного анализа (см. рис. 11).

В пленке толщиной 480 нм пик давления наблюдается в пластической волне в α -фазе железа.

За пиком следует волна разгрузки, хотя давления остаются достаточно высокими (более 30 ГПа), заметен частичный переход в ε -фазу и возвращение на метастабильную ветку α -фазы. Явление необычно, так как давление обратного перехода снижается до 10 ГПа (в сравнении с 13 ГПа в прямом переходе) при разгрузке из состояния ударного сжатия при 23 ГПа [79] либо 13 ГПа [41] при гидростатическом изотермическом сжатии [49]. Разброс значений напряжений и деформации, связанный с варьированием времени прихода и толщины пленки по принципу увеличения или уменьшения толщины пленки на ± 20 нм с соответствующим изменением времени прихода волны (± 2.3 пс), слабо влияет на фазовый состав в пике давления и на разгрузке.

В пленке толщиной 580 нм наблюдается схожая начальная картина — давление достигает своего максимума на ударной адиабате α -фазы. Затем при разгрузке происходит частичное превращение в ε -фазу. Возможный разброс данных при изменении толщин пленок и времен прихода УВ показывает как возможность продолжения процесса превращения в ε -фазу, так и возврат к α -фазе.

В пленке толщиной 740 нм максимум давления достигается вблизи ε -фазы, а разгрузка приводит к постепенному переходу обратно в α -фазу железа. В пленке толщиной 970 нм записанная история ограничена приходом УВ в пленку толщиной 1160 нм, что связано с ограниченностью области интерполяции напряжений по экспериментальным данным первым измерением скорости свободной поверхности для пленки железа наибольшей толщины.

Аналогичный обратный анализ профилей в работе [21] позволяет изучать переход $\alpha \rightarrow \varepsilon$, который наблюдается за фронтом УВ в сжатом веществе при высокой скорости деформации. Отличие настоящей работы от [21] состоит в том, что за УВ следует волна разрежения, что способствует более медленному фазовому переходу вплоть до остановки и обратного превращения $\varepsilon \rightarrow \alpha$, что наблюдается для пленок толщиной 480 и 740 нм (см. рис. 11). Качественное поведение воспроизводится при гибридном математическом моделировании, что дает представление о неоднородности и сосуществовании различных фаз железа в волнах сжатия и разрежения.

Благодарности. Авторы благодарят К. В. Хищенко за предоставленные уравнения состояния железа и стекла и Ю. В. Петрова за аналитические формулы расчета электронных свойств в переходных металлах.

Финансирование. Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (авторы С. И. А., Е. В. С. и П. С. К. — Госзадание ОИВТ № 075-00892-20-00; авторы В. А. Х. и Н. А. И. — Госзадание ИТФ № 00029-2019-0003).

ЛИТЕРАТУРА

1. С. И. Анисимов, А. М. Прохоров, В. Е. Фортов, Изв. АН СССР, серия физ. **46**, 1081 (1982).
2. С. И. Анисимов, А. М. Прохоров, В. Е. Фортов, УФН **142**, 395 (1984).
3. С. И. Анисимов, Б. Л. Капелиович, Т. Л. Перельман, ЖЭТФ **66**, 776 (1974).
4. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, С. И. Ашитков и др., ЖЭТФ **134**, 5 (2008).
5. N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, and V. V. Zhakhovsky, Opt. Quant. Electron. **52**, 63 (2020).
6. В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, Письма в ЖЭТФ **92**, 574 (2010).
7. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, Ю. В. Петров и др., Письма в ЖЭТФ **69**, 284 (1999).
8. С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др., Письма в ЖЭТФ **77**, 606 (2003).
9. R. Fabbro, J. Fournier, P. Ballard et al., J. Appl. Phys. **68**, 775 (1990).
10. Н. А. Иногамов, В. А. Хохлов, В. В. Жаховский, Письма в ЖЭТФ **108**, 439 (2018).
11. Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, and V. A. Khokhlov, Contrib. Plasma Phys. **59**, e201800180 (2019).
12. C. A. Bolme, S. D. McGrane, D. S. Moore, and D. J. Funk, J. Appl. Phys. **102**, 033513 (2007).
13. Michael R. Armstrong, Jonathan C. Crowhurst, Sorin Bastea, and Joseph M. Zaug, J. Appl. Phys. **108**, 023511 (2010).
14. С. И. Ашитков, М.Б. Агранат, Г. И. Канель и др., Письма в ЖЭТФ **92**, 568 (2010).
15. V. H. Whitley, S. D. McGrane, D. E. Eakins et al., J. Appl. Phys. **109**, 013505 (2011).
16. Jonathan C. Crowhurst, Michael R. Armstrong, Kimberly B. Knight et al., Phys. Rev. Lett. **107**, 144302 (2011).
17. R. F. Smith, J. H. Eggert, R. E. Rudd et al., J. Appl. Phys. **110**, 123515 (2011).
18. Gennady I. Kanel, AIP Conf. Proc. **1426**, 939 (2012).
19. S. I. Ashitkov, M. B. Agranat, G. I. Kanel, and V. E. Fortov, AIP Conf. Proc. **1426**, 1081 (2012).
20. С. И. Ашитков, П. С. Комаров, М. Б. Агранат и др., Письма в ЖЭТФ **98**, 439 (2013).
21. Jonathan C. Crowhurst, Bryan W. Reed, Michael R. Armstrong et al., J. Appl. Phys. **115**, 113506 (2014).
22. С. И. Ашитков, П. С. Комаров, Е. В. Струлева и др., Письма в ЖЭТФ **101**, 294 (2015).
23. Vasily V. Zhakhovsky, Mikalai M. Budzevich, Nail A. Inogamov et al., Phys. Rev. Lett. **107**, 135502 (2011).
24. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, В. В. Шепелев, Письма в ЖЭТФ **93**, 226 (2011).
25. Brian J. Demaske, Vasily V. Zhakhovsky, Nail A. Inogamov, and Ivan I. Oleynik. Phys. Rev. B **87**, 054109 (2013).
26. Vasily V. Zhakhovsky, Nail A. Inogamov, Brian J. Demaske et al., J. Phys. Conf. Ser. **500**, 172007 (2014).
27. R. Perriot, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, and I. I. Oleynik, J. Phys. Conf. Ser. **500**, 172008 (2014).
28. K. Khishchenko and A. Mayer, Int. J. Mech. Sci. **189**, 105971 (2020).
29. R. Evans, A. D. Badger, F. Fallies et al., Phys. Rev. Lett. **77**, 3359 (1996).
30. K. T. Gahagan, D. S. Moore, D. J. Funk et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 3205 (2000).
31. David J. Funk, D. S. Moore, K. T. Gahagan et al., Phys. Rev. B **64**, 115114 (2001).
32. K. T. Gahagan, D. S. Moore, D. J. Funk et al., J. Appl. Phys. **92**, 3679 (2002).
33. Tomokazu Sano, Takayuki Eimura, Ryota Kashiwabara et al., J. Laser App. **29**, 012005 (2017).
34. Terumasa Kawashima, Tomokazu Sano, Akio Hirose et al., J. Mater. Proc. Technol. **262**, 111 (2018).
35. Uros Trdan, Tomokazu Sano, Damjan Klobcar et al., Corrosion Sci. **143**, 46 (2018).
36. Jake D. G. Greener, Elton de Lima Savi, Andrey V. Akimov et al., ACS Nano **13**, 11530 (2019).
37. Y. Wang, D. H. Hurley, Z. Hua et al., Nature Comm. **11**, 1597 (2020).

38. Е. И. Уразаков, Л. А. Фальковский, ЖЭТФ **63**, 2297 (1973).
39. В. В. Косачев, Ю. Н. Лохов, В. Н. Чуков, ЖЭТФ **94**, 162 (1988).
40. Y. Sugawara, O. B. Wright, O. Matsuda et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 185504 (2002).
41. S. I. Ashitkov, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov et al., AIP Conf. Proc. **1793**, 100035 (2017).
42. V. V. Zhakhovsky, K. P. Migdal, N. A. Inogamov, and S. I. Anisimov, AIP Conf. Proc. **1793**, 070003 (2017).
43. Г. И. Канель, В. Е. Фортов, С. В. Разоренов, УФН **177**, 809 (2007).
44. Г. И. Канель, Е. Б. Зарецкий, С. В. Разоренов и др., УФН **187**, 525 (2017).
45. Г. И. Канель, С. В. Разоренов, Г. В. Гаркушин и др., ФТТ, **56**, 1518 (2014).
46. Л. В. Альтшулер, УФН **165**, 199 (1965).
47. G. I. Kerley, Report SAND93-0027, Sandia National Laboratories, Albuquerque (1993).
48. D. Bancroft, E. L. Peterson, and S. Minshall, J. Appl. Phys. **27**, 291 (1956).
49. L. M. Barker and R. E. Hollenbach, J. Appl. Phys. **45**, 4872 (1974).
50. G. E. Duvall and R. A. Graham, Rev. Mod. Phys. **49**, 523 (1977).
51. А. В. Ананьин, А. Н. Дремин, Г. И. Канель, ФГВ **3**, 93 (1981).
52. В. Д. Глузман, Г. И. Канель, В. Ф. Лоскутов и др., Проблемы прочности **8**, 52 (1985).
53. S. A. Dyachkov, D. K. Ilnitsky, A. N. Parshikov, and V. V. Zhakhovsky, J. Phys. Conf. Ser. **1556**, 012032 (2020).
54. J. P. Geindre, P. Audebert, S. Rebibo, and J. C. Gauthier, Opt. Lett. **26** 1612 (2001).
55. S. Ogata, J. Li, N. Hiroaki, Y. Shibutani, and S. Yip, Phys. Rev. B **70**, 104104 (2004).
56. D. M. Clatterbuck, D. C. Chrzan, and J. W. Morris, Acta Materialia **51**, 2271 (2003).
57. John B. Aidun and Y. M. Gupta, J. Appl. Phys. **69**, 6998 (1991).
58. Jonathan C. Boettger and Duane C. Wallace, Phys. Rev. B **55**, 2840 (1997).
59. Bryan W. Reed, James S. Stolken, Roger W. Minich, and Mukul Kumar. J. Appl. Phys. **110**, 113505 (2011).
60. Bryan W. Reed, J. Reed Patterson, Damian C. Swift et al., J. Appl. Phys. **110**, 113506 (2011).
61. T. Q. Qiu and C. L. Tien, J. Heat Transfer. **115**, 835 (1993).
62. Vasily V. Temnov, Klaus Sokolowski-Tinten, Ping Zhou, and Dietrich von der Linde, J. Opt. Soc. Amer. B **23**, 1954 (2006).
63. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, ЖЭТФ **127**, 79 (2018).
64. С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др., ЖЭТФ **130**, 212 (2006).
65. N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, Yu. V. Petrov et al., Proc. SPIE **7005**, 70052F (2008).
66. S. I. Ashitkov, P. S. Komarov, V. V. Zhakhovsky et al., J. Phys. Conf. Ser. **774**, 012097 (2016).
67. K. V. Khishchenko, J. Phys. Conf. Ser. **98**, 032023 (2008).
68. K. V. Khishchenko, J. Phys. Conf. Ser. **653**, 012081 (2015).
69. K. V. Khichshenko, Mathematica Montisnigri **XL**, 140 (2017).
70. Yu. Petrov, K. Migdal, N. Inogamov et al., Data in Brief **28**, 104980 (2020).
71. E. D. Palik, *Handbook of Optical Constants of Solids*, Acad. Press, Boston (1985).
72. Paul J. Steinhardt, David R. Nelson, and Marco Ronchetti, Phys. Rev. B **28**, 784 (1983).
73. W. Lechner and C. Dellago, J. Chem. Phys. **129**, 114707 (2008).
74. Cynthia L. Kelchner, S. J. Plimpton, and J. C. Hamilton, Phys. Rev. B **58**, 11085 (1998).
75. B. A. Klumov, S. A. Khrapak, and G. E. Morfill, Phys. Rev. B **83**, 184105 (2011).
76. H. Hwang, E. Galtier, H. Cynn et al., Sci. Adv. **6**, eaaz5132 (2020).
77. R. Piessens, E. D. Doncker-Kapenga, C. Ueberhuber, and D. Kahaner, *Quadpack: a Subroutine Package for Automatic Integration*, Springer (2011).
78. Thomas Kluyver, Benjamin Ragan-Kelley, Fernando Pérez et al., *Positioning and Power in Academic Publishing: Players, Agents and Agendas*, IOS Press, (2016), pp. 87–99.
79. Thomas J. Ahrens, *Shock Wave Experiments*, Springer Netherlands, Dordrecht (2007), pp. 912–920.