

Исследование параметров лазерно-индуцированных ударных волн для задач лазерной ударной обработки кремния

Е. И. Мареев^{+*1)}, Б. В. Румянцев⁺, Ф. В. Потемкин⁺

⁺ Физический факультет и Международный учебно-научный лазерный центр МГУ им. М. В. Ломоносова, 119234 Москва, Россия

* Институт фотонных технологий, Федеральный научно-исследовательский центр РАН, 119333 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 октября 2020 г.

После переработки 2 ноября 2020 г.

Принята к публикации 3 ноября 2020 г.

В представленной работе на основе техники время-разрешенной теневой фотографии были определены диапазоны энергий фемтосекундных лазерных импульсов и расстояний от точки фокусировки высокоинтенсивного (до 10^{13} Вт/см²) фемтосекундного лазерного излучения до образца, при которых возможно инициирование фазовых переходов в кремнии. Было обнаружено, что при острой фокусировке ($NA = 0.5$) фемтосекундного лазерного излучения ближнего ИК диапазона достигается давление в 15 ГПа, что в случае лазерной ударной обработки (ЛУО) кремния соответствует давлению 40 ± 6 ГПа и превышает пороговое значение, необходимое для инициирования семейства фазовых переходов (11, 14, 33 ГПа). Давление на фронте ударной волны при ее распространении в среде быстро (за 2.5 нс) уменьшается ниже этого порогового значения, что значительно ограничивает возможные режимы работы в режиме ЛУО.

DOI: 10.31857/S1234567820230111

Введение. Ударное сжатие с помощью лазерных импульсов дает уникальную возможность исследовать диаграммы состояния различных материалов и представляет особый интерес для понимания распространения ударных волн, механических процессов и наличия метастабильных фаз, связанных со структурными превращениями и недостижимых при статических нагрузках [1–3]. Прорыв в генерации высоких давлений был достигнут, когда было обнаружено, что расширение плазмы в условиях ограничения ее разлета (*confined geometry*) может увеличить давление на фронте ударной волны по сравнению со свободным расширением [4]. Это привело к созданию новой методики обработки материалов, получившей название лазерной ударной обработки – ЛУО (*laser shock peening*) [5, 6]. ЛУО вносит микроструктурные изменения и увеличивает плотность дислокаций и твердость подвергаемого воздействию материала. В зависимости от материала и параметров ЛУО, модификация материалов происходит, начиная от поверхности образца и до глубины вплоть до нескольких сотен микрон [6]. Принцип ЛУО состоит в следующем: когда буферная среда облучается высокоэнергетическим ультракоротким лазерным импульсом, в объеме (или на поверхности, в зависи-

мости от геометрии эксперимента) создается источник ударных волн. В качестве такого источника может выступать лазерно-индуцированная микроплазма [7]. Быстрое расширение микроплазмы создает ударную волну высокого давления, которая воздействует на образец. В качестве буферной среды обычно используется вода или сильнопоглощающая пленка [6]. Стоит отметить, что буферная среда используется, в первую очередь, для ограничения разлета плазмы, что значительно повышает создаваемое давление, поэтому применяется как в случае наносекундных, так и фемтосекундных лазерных импульсов [8, 9]. Кроме несомненной технической значимости ЛУО, нельзя не обратить внимание и на фундаментальное значение таких исследований. Высокие давления, создаваемые при ЛУО материалов, могут быть использованы в том числе для инициирования фазовых переходов в их объеме. Например, кремний из кубической фазы может перейти в метастабильную β -Sn фазу, в случае, если амплитуда ударной волны превышает 11 ГПа [10–12]. Чтобы понять, при каких условиях лазерно-индуцированная ударная волна, генерируемая в буферной среде, будет иметь амплитуду, превышающую пороговую для фазовых переходов в кремнии, необходимо восстановить профиль ударной волны, генерируемой в буферной среде [13]. В данной работе мы с помощью время-

¹⁾ e-mail: mareev.evgeniy@physics.msu.ru

разрешенной теневой фотографии исследовали динамику лазерно-индуцированной ударной волны в воде, определили профиль давления, энергию ударной волны, а также установили диапазон энергий лазерного импульса и расстояний от точки фокусировки до образца, при котором возможно инициирование фазового перехода в кремнии.

2. Методы и подходы.

Экспериментальная установка. В экспериментах использовалось излучение хром-форестеритовой лазерной системы $\lambda = 1240$ нм, $\tau = 140$ фс, энергия в импульсе до 3 мДж, частота повторения 10 Гц. Для определения скорости ударной волны использовалась методика теневой фотографии. В рамках методики возбуждающий импульс с энергией до 325 мкДж фокусируется асферической линзой ($NA = 0.5$, $f = 8$ мм) в воду и генерирует микроплазму. Частота пробного импульса (до 2.5 мДж) либо удваивалась в кристалле ВВО (для экспериментов без кремния), либо оставалась неизменной (для экспериментов с кремнием, так как он прозрачен для излучения на длине волны 1240 нм), после чего пробный импульс расширялся для создания равномерной засветки на ПЗС камере. В случае, если в качестве пробного импульса использовался импульс с длиной волны 1240 нм, то камера работала в двухфотонном режиме, как это описано в [14]. Изображение переносится на матрицу ПЗС камеры с помощью объектива с 180-кратным оптическим увеличением (разрешение порядка 2 мкм на пиксель), см. рис. 1. Ударная волна,

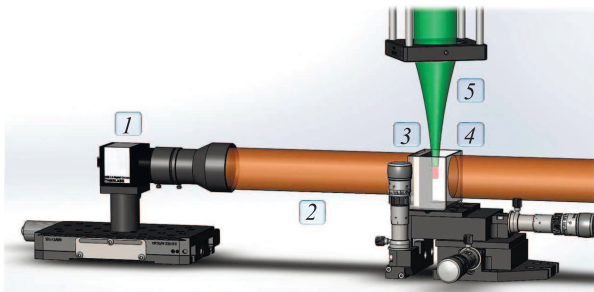


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки: 1 – 12-битная ПЗС-камера; 2 – зондирующий импульс; 3 – образец кремния; 4 – кювета с водой и помещенным в нее образцом кремния; 5 – возмущающее лазерное излучение

созданная в воде, приводит к изменению локального показателя преломления, что, в свою очередь, отображается как появление темных областей на теневой фотографии в результате рефракции. Скорость лазерно-индуцированной ударной волны может быть получена, рассчитывая расстояние между центром

микроплазмы (источником ударной волны) и темным кольцом (фронтом ударной волны). Временное разрешение определяется длительностью лазерного импульса подсветки и в нашем случае составляет ~ 100 фс, а пространственное разрешение – разрешением оптической системы регистрации (2 мкм).

Методология расчета давления и энергии ударной волны. В воде скорость и давление на профиле ударной волны однозначно связаны. Поэтому, зная изменение скорости ударной волны, при распространении ее в среде можно восстановить профиль давления. Распространение лазерно-индуцированной ударной волны в воде описывается следующими параметрами: $u_s(r, t)$ – скорость ударной волны, $r(t)$ – расстояние фронта ударной волны от центра, $p_s(r, t)$ – давление ударной волны, $\alpha(t)$ – показатель затухания ударной волны. Для связи давления и скорости на фронте ударной волны используется уравнение ударной адиабаты:

$$p_s = c_1 \rho_0 u_s \cdot (10^{(u_s - c_0)/c_2} - 1), \quad (1)$$

где ρ_0 – плотность жидкости, c_1 и c_2 – эмпирические константы (для воды $c_1 = 5190$ м/с и $c_2 = 25306$ м/с), c_0 – скорость звука. Данная формула справедлива в диапазоне давлений от 30 МПа до 100 ГПа [15, 16]. Зная уравнения ударной адиабаты, можно получить точную зависимость $p(\rho)$. Для ударных волн в жидкостях чаще всего используют эмпирическое уравнение состояния [15, 17]:

$$u_s - c_0 = 25306 \cdot \log \left(1 + \frac{u}{5190} \right). \quad (2)$$

Из законов сохранения энергии и импульса следуют уравнения (3), (4), (5):

$$\rho \cdot (u_s - u) = \rho_0 \cdot u_s, \quad (3)$$

$$p - p_\infty = \rho_0 u_s u, \quad (4)$$

$$E - E_0 = \frac{1}{2} (p + p_\infty) \cdot \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right). \quad (5)$$

В уравнении (5) E и E_0 – начальная и конечная кинетическая энергия, соответственно, ρ и ρ_0 – плотность на фронте ударной волны и невозмущенной жидкости соответственно p_∞ – гидростатическое давление и p – давление на фронте ударной волны. Следуя [18], энергию ударной волны можно оценить как:

$$E = \int_{r_2}^{r_1} 4\pi r^2 \rho(r) \Delta \varepsilon(r) dr, \quad (6)$$

где $\Delta \varepsilon$ определяется как:

$$\Delta \varepsilon(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho(r)} \right) \cdot p(r). \quad (7)$$

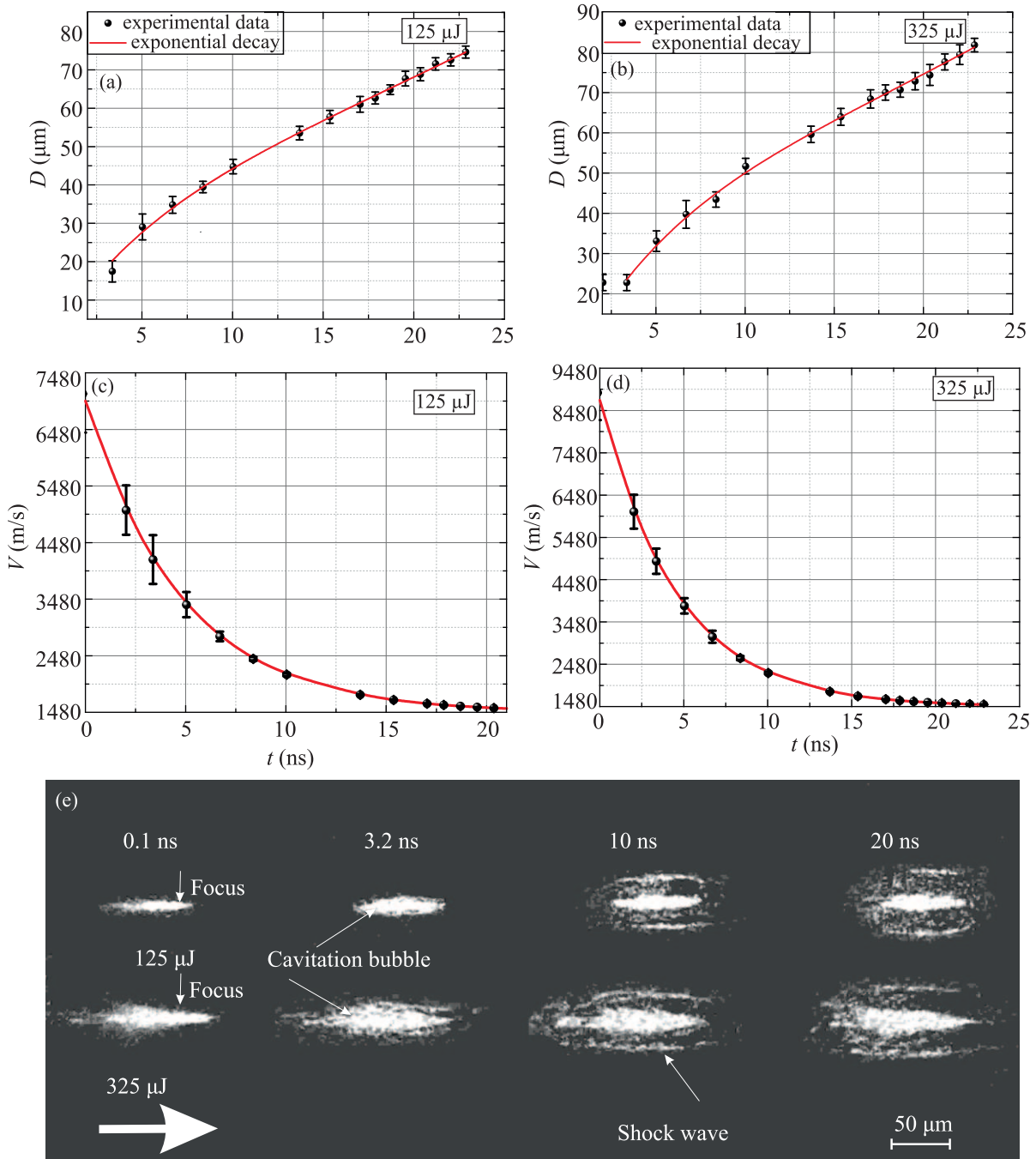


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость диаметра (а), (b) и скорости (с), (d) ударной волны от задержки между пробным и возбуждающим импульсом при энергиях лазерного импульса 325 и 125 мкДж. (e) – Теневые фотографии ударных волн для разных энергий лазерного излучения (125 и 325 мкДж) и временных задержек. Масштаб, положение фокуса и направление распространения лазерного импульса указаны на рисунке

Таким образом, зная $u_s(r)$, т.е. зависимость скорости фронта ударной волны, можно восстановить профиль плотности, а из него оценить энергию, запасенную в ударной волне. Следует отметить, что в диапазоне давлений меньше 30 МПа (при

котором становятся некорректными уравнения (1) и (2)), энергия ударной волны составляет меньше 1% от изначальной энергии лазерного излучения. Эта ошибка значительно (в 5–7 раз) меньше суммарной ошибки, возникающей при восстановле-

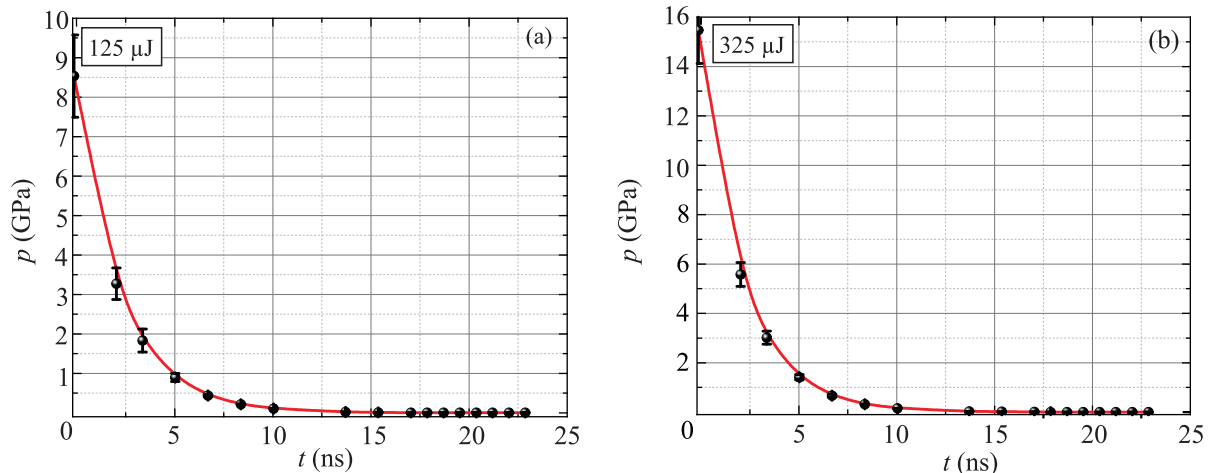


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость давления на фронте лазерно-индуцированной ударной волны от времени при энергии возбуждающего импульса 125 и 325 мкДж

нии энергии ударной волны из экспериментальных данных.

Численное моделирование. Для того, чтобы рассчитать изменение амплитуды давления на фронте ударной волны при переходе из воды в кремний, мы провели численное моделирование с использованием подходов молекулярной динамики. Для моделирования использовался пакет программ LAMMPS [19]. Моделирование производилось для ячейки $100 \times 100 \times 900$ атомов кремния, шаг по времени 0.1 фс, периодические граничные условия. В качестве межатомного потенциала кремния использовался потенциал Tersoff [20, 21], хорошо зарекомендовавший себя для моделирования фазовых переходов, вызванных ударной волной в конденсированных средах [21]. Ударная волна представлялась как мгновенное изменение скорости граничных атомов. Данное приближение корректно при условии равенства скорости частиц на границе раздела вода-кремний. Давление рассчитывалось как среднее для атомного слоя, содержащего 10 атомов вдоль направления распространения ударной волны.

3. Основные результаты и обсуждение. Для определения давления были проведены измерения скорости ударной волны. Изменяя задержку между возбуждающим и пробным импульсами, были получены теневые фотографии ударной волны и кавитационных пузырей. После вычитания фона (при отсутствии воздействия возбуждающим импульсом) ударные волны отображаются в виде светлых областей, в центре теневых фотографий находятся кавитационные пузыри. Из теневых фотографий был восстановлен диаметр ударной волны (см. рис. 2а, б). Профиль ударной волны представляет суперпози-

цию сферических ударных волн, чья общая огибающая образует цилиндрическую ударную волну [22, 23]. Работая в приближении, что давление (и скорость) ударной волны затухает экспоненциально (с коэффициентом затухания α , т.е. $p = p_0 \cdot \exp(-\alpha \cdot t)$ [22, 24]), можно, аппроксимировав зависимость диаметра ударной волны от времени, получить зависимость скорости от времени. Как видно из рис. 2, скорость ударной волны быстро затухает до звуковой (примерно за 15–20 нс). При этом ударная волна с большей скоростью и амплитудой (около 7.5 км/с) имеет больший (примерно на 5%) коэффициент затухания α . Зная скорость ударной волны и используя формулу (1), можно восстановить давление на фронте ударной волны (см. рис. 3). Несмотря на то, что в начальный момент времени давление на фронте ударной волны имеет большие амплитуды (более 10 ГПа), оно быстро уменьшается: давление при задержках больше 10 нс составляет менее 3% от исходного. В случае падения ударной волны на плоскую границу раздела двух сред отношение давлений будет рассчитываться по формуле [25]:

$$\frac{P_{\text{Si}}}{P_w} = \frac{2 \cdot Z_{\text{Si}} / \cos \theta_t}{(Z_{\text{Si}} / \cos \theta_t) + (Z_w / \cos \theta_i)}, \quad (8)$$

где Z_{Si} и Z_w – акустические импедансы кремния ($20.9 \text{ г/см}^2/\text{с}$ [26]) и воды ($1.48 \text{ г/см}^2/\text{с}$ [27]), θ_i , θ_t – углы падения и преломления соответственно. Учитывая, что фронт ударной волны квазиплоский в плоскости, параллельной направлению распространения лазерного излучения (нормальное падение на образец), то давление в кремнии будет почти в два раза выше (1.87), чем в воде, так как граничные условия в случае плоского фронта ударной волны долж-

ны обеспечивать равенство скорости движений частиц – u в уравнениях (3) и (4), что и соответствует уравнению (7). Также стоит учесть, что изначально ударная волна имеет не нулевой радиус, а начальный радиус ударной волны сравним с поперечным размером области лазерно-индуцированной плазмы. Однако стоит отметить, что уравнение (8) корректно в случае акустического приближения, т.е. малых давлений. Поэтому для более корректного учета изменения давления на фронте ударной волны при прохождении ее границы раздела двух сред мы провели численное моделирование на основе молекулярной динамики. Зависимость отношения давления на фронте ударной волны на границе раздела вода-кремний от исходного давления представлена на рис. 4. При низ-

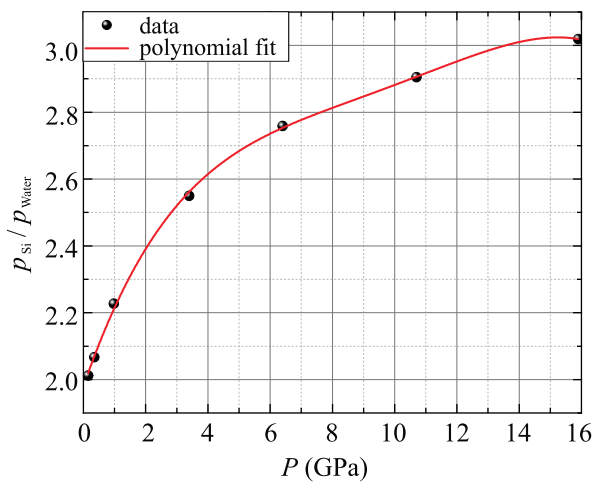


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость отношения давлений на фронте ударной волны в кремнии и воде в зависимости от давления в воде

ких давлениях это отношение стремится к 1.9, что близко к значению, предсказанному уравнением (8). При высоких давлениях (больше 10 ГПа) это отношение близко к 3.

Как было показано с помощью численного моделирования, инициирование фазовых переходов в объеме кремния возможно, если внешнее давление будет превышать 11 ГПа, таким образом необходимо точно подобрать параметры экспериментальной установки, а именно – энергию лазерного импульса, а также расстояние от точки фокусировки до образца. Поэтому мы произвели расчет максимально достижимых давлений. При энергии 325 мкДж амплитуда лазерно-индуцированной ударной волны в воде чуть меньше 15 ГПа (рис. 5), что соответствует почти 40 ГПа в кремнии, что значительно (в 3.6 раза) превышает порог фазового перехода в кремнии. Пороговая энергия, при которой достигается

необходимая амплитуда ударной волны, составляет порядка 25 мкДж. Также в экспериментах была рассчитана энергия ударной волны, для этого было проведено численное интегрирование в соответствии с уравнениями (6) и (7). При этом стоит отметить, что максимальная конверсия энергии лазерного импульса в энергию ударной волны осуществляется при относительно низких (меньше 10 мкДж) энергиях лазерного импульса. Уменьшение эффективности преобразования энергии лазерного импульса в энергию ударной волны (от почти 30 до 3%) связано с увеличением области плазмообразования и, как следствие, “размазыванию” энергии лазерного импульса по пространству. Данный процесс характеризуется уменьшением энерговклада [28]. Стоит отметить, что при увеличении энергии поперечный размер области плазмообразования и ударной волны растет, при последующем увеличении энергии возбуждающего импульса в среде будет наблюдаться суперфиламентация, характеризуемая эффектом слияния нескольких филаментов и нелинейным увеличением объемного энерговклада в среду [23]. Исследуя зависимость амплитуды ударной волны от пройденного расстояния, а также энергии лазерного импульса, мы определили параметры экспериментальной схемы для проведения лазерной ударной обработки кремния. В случае, если точка в двухмерном пространстве энергии лазерного импульса – расстояние между точкой фокусировки и образцом находится ниже кривой, изображенной на рис. 6, то необходимые условия для фазового перехода в объеме кремния не будут достигнуты. В случае же, если точка будет лежать выше данной кривой, то на фронте ударной волны в кремнии будет достигнут переход в нестационарную β -Sn фазу. Такой небольшой рабочий диапазон вызван быстрым (примерно за 17 мкм) затуханием амплитуды ударной волны.

Закключение. Таким образом, было продемонстрировано, что при острой ($NA = 0.5$) фокусировке фемтосекундного лазерного излучения ближнего ИК диапазона в объем кюветы с водой в среде генерируются ударные волны с давлением вплоть до 15 ГПа (40 ГПа в кремнии). При таких амплитудах возможно осуществлять лазерную ударную обработку кремния (порог фазового перехода 11 ГПа). Ударные волны быстро (~ 2.5 нс) затухают и уже на расстояниях больше 17 ± 2 мкм произвести лазерную ударную обработку кремния становится невозможным. С ростом энергии лазерного импульса уменьшается конверсия энергии фемтосекундного лазерного излучения в энергию ударной волны (от почти 30 до 3%), что связано с увеличением области воздействия ла-

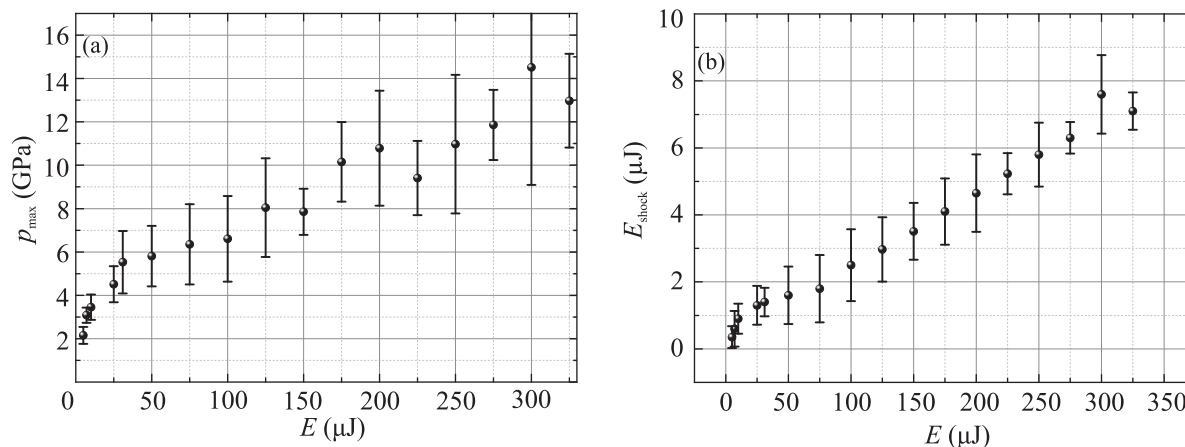


Рис. 5. Зависимость максимального давления (а) и энергии (б) ударной волны от энергии возбуждающего фемтосекундного лазерного импульса

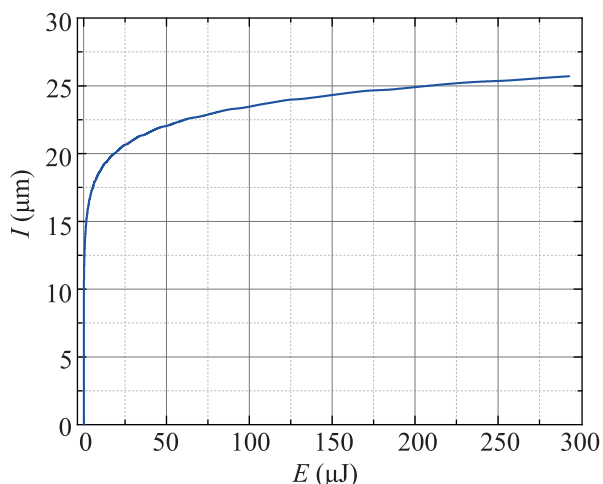


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимость максимального (при котором еще возможно инициирование фазовых переходов в кремнии ударной волной) расстояния от точки фокусировки лазерного импульса до образца от энергии лазерного импульса

зерного излучения и уменьшением объемного энергоклада в среду. Выполненные исследования, являясь важными с практической точки зрения, станут основой для проведения время-разрешенных рентгенооптических экспериментов в НИЦ “Курчатовский институт”.

Проект поддержан грантами Российского фонда фундаментальных исследований #18-02-40018, 19-29-12037 (определение условий для инициирования фазовых переходов в кремнии) и Российского научного фонда #17-72-20130 (определение энергии ударной волны). Б.В. Румянцев является стипендиатом фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

Авторы благодарят А. С. Бычкова и А. А. Карабутова за консультацию по вопросам распространения ударных волн через границу раздела двух сред.

1. R. Jeanloz, P. M. Celliers, G. W. Collins, G. W. Collins, J. H. Eggert, K. Lee, R. S. McWilliams, S. Brygoo, and P. Loubeyre, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **104**, 9172 (2007).
2. A. W. Warren, Y. B. Guo, and S. C. Chen, *Int. Journal of Fatigue* **30**, 188 (2008).
3. P. Shukla, R. Crookes, and H. Wu, *Mater. Des.* **167**, 107626 (2019).
4. B. P. Fairand, A. H. Clauer, R. G. Jung, and B. A. Wilcox, *Appl. Phys. Lett.* **25**, 431 (1974).
5. U. Trdan, M. Scarba, and G. Grum, *Mater. Charact.* **97**, 57 (2014).
6. R. Sundar, P. Ganesh, R. K. Gupta, G. Ragvendra, B. K. Pant, Vivekanand Kain, K. Ranganathan, Rakesh Kaul, and K. S. Bindra, *Lasers in Manufacturing and Materials Processing* **6**, 424 (2019).
7. Е. И. Мареев, Е. А. Мигаль, Ф. В. Потемкин, *Письма в ЖЭТФ* **10**, 422 (2018).
8. S. Petronic, T. Sibalija, M. Burzic, S. Polic, K. Colic, and M. Dubravka, *Metals* **6**, 1 (2016).
9. H. Wang, F. Pohl, K. Yan P. Decker, E. L. Gurevich, and A. Ostendorf, *Appl. Surf. Sci.* **471**, 869 (2019).
10. S. M. Jeong and T. Kitamura, *J. Appl. Phys. Part 1 Regul. Pap. Short Notes Rev. Pap.* **46**, 5924 (2007).
11. M. Budnitski and M. Kuna, *J. Mech. Phys. Solids* **95**, 64 (2016).
12. H. Katzke, U. Bismayer, and P. Toledano, *Phys. Rev. B – Condens. Matter Mater. Phys.* **73**, 1 (2006).
13. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, В. В. Шепелев, *Письма в ЖЭТФ* **93**, 245 (2011).
14. E. I. Mareev, B. V. Rumiantsev, and E. A. Migal, *Meas. Sci. Technol.* **31**, 085204 (2020).

15. P. K. Kennedy, D. X. Hammer, and B. A. Rockwell, *Prog. Quant. Electr.* **21**, 155 (1997).
16. Ф. В. Потемкин, Е. И. Мареев, *Ученые записки физического факультета МГУ* **4**, 1 (2013).
17. W. Lauterborn and A. Vogel, *Bubble dynamics and shock waves*, Springer, Berlin, Heidelberg (2013), p. 67.
18. A. Vogel, J. Noack, K. Nahen, D. Theisen, S. Busch, U. Parlitz, D. X. Hammer, G. D. Noojin, and B. A. Rockwell, *Appl. Phys. B* **68**, 271 (1999).
19. S. Plimpton, *J. Comput. Phys.* **117**, 1 (1995).
20. J. Tersoff, *Phys. Rev. B* **37**, 6991 (1988).
21. P. Erhart and K. Albe, *Phys. Rev. B* **71** 1 (2005).
22. F. V. Potemkin, E. I. Mareev, A. A. Podshivalov, and V. M. Gordienko, *Laser Phys. Lett.* **11**, 106001 (2014).
23. F. V. Potemkin, E. I. Mareev, A. A. Podshivalov, and V. M. Gordienko, *New J. Phys.* **17**, 053010 (2015).
24. L. D. Sadwin, M. M. Swisdak, Y. Gitterman, and O. Lotan, *30th Int. Symp. Shock Waves* **2**, 1307 (2017).
25. H. Hosseini, S. Moosavi-Nejad, H. Akiyama, and V. Menezes, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 103701 (2014).
26. M. Prasad, *Lead. Edge* **20**, 172 (2001).
27. F. Sabri, M. E. Sebelic, R. Meacham, J. D. Boughter, M. J. Challis, and N. Leventis, *PLoS One* **8**, e66348 (2013).
28. E. I. Mareev, K. V. Lvov, B. V. Rumiantsev, E. A. Migal, I. D. Novikov, S. Yu. Stremoukhov, and F. V. Potemkin, *Laser Phys. Lett.* **17**, 015402 (2019).