P11-2022-31

И.В.Амирханов, И.Сархадов*, З.К.Тухлиев

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ, ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ, В РАМКАХ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

Направлено в журнал «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования»

* E-mail: ibrohim@jinr.ru

Амирханов И. В., Сархадов И., Тухлиев З. К. Р11-2022-31 Моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах под действием лазерных импульсов, в рамках гиперболической модели термического пика

В работе предложена модификация модели термического пика (МТП), базирующаяся на системе двух связанных гиперболических уравнений теплопроводности. Действие лазера в электронном газе учтено через функцию источника, которую выбрали в виде двойного фемтосекундного лазерного импульса. В гиперболической МТП в отличие от параболической МТП присутствуют дополнительные параметры, которые характеризуют времена релаксации потока тепла в электронном газе и кристаллической решетке. Кроме этого, в функциях источников гиперболической МТП присутствуют дополнительные слагаемые — производные от источников параболических уравнений и от разности температур электронного газа и кристаллической решетки. Это означает, что на температуры электронного газа и кристаллической решетки оказывают влияние не только источники, но и скорости их изменения. При предположении независимости теплофизических параметров материала образца от температур уравнения гиперболической МТП являются линейными.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий им. М. Г. Мещерякова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2022

Amirkhanov I. V., Sarkhadov I., Tukhliev Z. K.P11-2022-31Simulation of Thermal Processes Appearing in Materials under the Action of
Laser Pulses within the Hyperbolic Thermal Peak Model

The paper proposes a modification of the thermal spike model (TSM) based on a system of two coupled hyperbolic heat conduction equations. The action of the laser in the electron gas is taken into account through the source function, which was chosen in the form of a double femtosecond laser pulse. In the hyperbolic TSM, in contrast to the parabolic TSM, there are additional parameters that characterize the relaxation times of the heat flux in the electron gas and the crystal lattice. In addition, there are additional terms in the sources of the hyperbolic TSM — derivatives from the sources of parabolic equations and from the temperatures difference between the electron gas and the crystal lattice. This means that the temperatures of the electron gas and the crystal lattice are influenced not only by the sources, but also by their rates of change. Assuming that the thermophysical parameters of the sample material are independent of temperatures, the hyperbolic TSM equations are linear.

The investigation has been performed at the Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies, JINR.

введение

Исследование взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом является важным в связи со многими фундаментальными проблемами (физика нерановесных процессов, генерация ударных волн, лазерное ускорение ионов, модификации свойств облучаемого материала и т. д.) [1–4].

В настоящее время возрастает необходимость в создании и совершенствовании достоверных физических моделей, способных описывать различные процессы в веществе. При этом компьютерное моделирование занимает сейчас одно из главных мест в исследовании таких задач. Существуют два подхода исследования и создания физических моделей — атомистический и континуальный.

Атомистические подходы (метод молекулярной динамики) позволяют естественным образом учитывать атомарную структуру кристаллической решетки, влияние примесей, наличие дислокаций, кинетику фазовых переходов и т. д. Континуальный подход (решение уравнений механики сплошных сред) — это параболическое и гиперболическое уравнения теплопроводности, двухтемпературная модель теплопроводности, двухтемпературная гидродинамическая модель и т. д. [5].

Для описания динамики быстропротекающих процессов, возникающих в веществе под воздействием лазерного импульса, можно использовать метод молекулярной динамики (МД) [6]. Метод МД довольно эффективен для микроскопического анализа механизмов плавления и испарения [7,8], а также анализа возникновения и распространения волн давления, сгенерированных лазерным излучением, и динамики лазерной абляции [9] материалов.

В каждом подходе имеются свои проблемы. При исследовании процессов переноса в рамках параболического уравнения возникает проблема — бесконечно большая скорость распространения теплового возмущения (следствие закона Фурье) [16–18]. Обобщая закон Фурье, учитывающий время релаксации теплового потока, получаем гиперболическое уравнение теплопроводности [10–15].

Время релаксации является характеристикой неравновесности процесса теплопроводности. При воздействии фемтосекундных импульсов происходит неравновесный нагрев материала. Поэтому исследование подобных процессов может оказаться более адекватным в рамках гиперболического уравнения теплопроводности. В работе проведено численное исследование физических процессов, возникающих при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов в рамках параболического и гиперболического уравнений теплопроводности и сделан сравнительный анализ полученных результатов.

постановка задачи

При моделировании тепловых процессов, возникающих в материалах под воздействием фемтосекундных лазерных импульсов, следуя работе [10–15], модифицируем МТП:

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = -\frac{\partial q_e}{\partial x} - \gamma \left(T_e - T_i\right) + A_e\left(x, t\right); \qquad q_e + \tau_e \frac{\partial q_e}{\partial t} = -\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial t}, \quad (1)$$

$$C_{i}\frac{\partial T_{i}}{\partial t} = -\frac{\partial q_{i}}{\partial x} + \gamma \left(T_{e} - T_{i}\right) + A_{i}\left(x, t\right); \qquad q_{i} + \tau_{i}\frac{\partial q_{i}}{\partial t} = -\lambda_{i}\frac{\partial T_{i}}{\partial t}.$$
 (2)

Здесь T_e , T_i — температурные поля электронного газа и кристаллической решетки облучаемого образца; C_e , C_i , λ_e , λ_i — соответственно удельные теплоемкости и коэффициенты теплопроводности электронного газа и кристаллической решетки; q — коэффициент электрон-фононного взаимодействия электронной подсистемы с решеткой; A(xt) — функция источника, которая определяет плотность мощности тепловыделения в точке с координатой x в момент времени t; τ_e , τ_i — характерные времена релаксации потоков энергии в электронном газе и кристаллической решетке.

При $\tau_e = \tau_i = 0$ данная модель переходит в модель термического пика (МТП). Полагая теплоемкости и теплопроводности электронного газа и кристаллической решетки не зависящими от температуры, т.е. константами, после исключения потоков искомую систему уравнений (1), (2) получаем в виде

$$C_{e}\left(\frac{\partial T_{e}}{\partial t} + \tau_{e}\frac{\partial^{2}T_{e}}{\partial t^{2}}\right) = \lambda_{e}\frac{\partial^{2}T_{e}}{\partial x^{2}} - \gamma\left(T_{e} - T_{i}\right) - \gamma\tau_{e}\frac{\partial}{\partial t}\left(T_{e} - T_{i}\right) + A_{e}\left(x, t\right) + \tau_{e}\frac{\partial A_{e}\left(x, t\right)}{\partial t},$$
 (3)

$$C_{i}\left(\frac{\partial T_{i}}{\partial t} + \tau_{i}\frac{\partial^{2}T_{i}}{\partial t^{2}}\right) = \lambda_{i}\frac{\partial^{2}T_{i}}{\partial x^{2}} + \gamma\left(T_{e} - T_{i}\right) + \gamma\tau_{i}\frac{\partial}{\partial t}\left(T_{e} - T_{i}\right) + A_{i}\left(x, t\right) + \tau_{i}\frac{\partial A_{i}\left(x, t\right)}{\partial t}.$$
 (4)

Слагаемые $\tau_{\alpha}\partial A_{\alpha}(xt)/\partial t$, $\gamma \tau_{\alpha}\partial (T_eT_i)/\partial t$, $\alpha = e, i$, означают, что на температурные поля оказывают влияние не только источники, но и скорость изменения источника и скорость обмена энергией электрон-фононного взаимодействия электронной подсистемы с решеткой. В дальнейшем полагаем, что источник действует только на электронный газ, т. е. полагаем $A_i(x,t) = 0$.

Уравнения (3), (4) решим со следующими начальными и граничными условиями:

$$T_{\alpha}(x,0) = T_{0}, \ \frac{\partial T_{\alpha}(x,t)}{\partial t}|_{t=0} = 0, \ \frac{\partial T_{\alpha}(x,t)}{\partial x}|_{x=0} = 0,$$

$$T_{\alpha}(x_{\max},t) = T_{0}, \ \alpha = e, i.$$
(5)

Функцию источника выбираем в факторизованном виде:

 $A_{e}(x,t) = I_{0}[1 - R(T_{s})] f_{1}(x) f_{2}(t) T_{s} = T_{i}(0,t).$

Здесь $f_1(x)$, $f_2(t)$ — пространственная и временная формы источника; I_0 — интенсивность источника; $R(T_s)$ — коэффициент отражения лазерного импульса от поверхности материала.

В данной работе функции $f_1(x)$ и $f_2(t)$ выбраны, как в работах [9–21]:

$$f_1(x) = \frac{\exp\left(-\frac{x}{L_p}\right)}{L_p},$$

$$f_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\exp\left[-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma_t^2}\right] + \exp\left[-\frac{(t-t_0-\tau_d)^2}{2\sigma_t^2}\right]\right).$$

Здесь L_p — глубина проникновения лазера в вещество; t_0 — момент времени, когда первый импульс источника принимает максимальное значение; τ_d — сдвиг по времени второго импульса источника по отношению к первому. Доза излучения: $\Phi = I_0 \int_{0}^{\infty} f_2(t) dt = 2I_0 \sigma_t$.

При численном моделировании уравнений (3), (4) с начальными и граничными условиями (5) удобно перейти от размерных переменных и величин к безразмерным переменным и величинам. Переход от размерных переменных и величин к безразмерным осуществляется следующим образом:

$$\overline{T}_{\alpha} = \frac{T_{\alpha}}{T_{0}}, \ \overline{x} = \frac{x}{\Delta x}, \ \overline{t} = \frac{t}{\Delta t}, \ \overline{\sigma}_{t} = \frac{\sigma_{t}}{\Delta t}, \ \overline{t}_{0} = \frac{t_{0}}{\Delta t}, \ \overline{\gamma}_{\alpha} = \frac{\gamma \Delta_{t}}{C_{\alpha}}, \\ k_{\alpha} = \frac{\lambda_{\alpha} \Delta t}{C_{\alpha} \Delta x^{2}}, \ \overline{\tau}_{\alpha} = \frac{\tau_{\alpha}}{\Delta t}, \ \overline{A}_{\alpha} \left(\overline{x}, \overline{t}\right) = \frac{A_{\alpha} \left(x, t\right) \Delta t}{C_{\alpha} T_{0}}, \ \alpha = e, i.$$

$$\frac{\partial \overline{T}_{e}}{\partial \overline{t}} + \overline{\tau}_{e} \frac{\partial^{2} \overline{T}_{e}}{\partial \overline{t}^{2}} = k_{e} \frac{\partial^{2} \overline{T}_{e}}{\partial \overline{x}^{2}} - \gamma_{e} \left(\overline{T}_{e} - \overline{T}_{i}\right) - \gamma_{e} \overline{\tau}_{e} \frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{T}_{e} - \overline{T}_{i}\right) + \overline{A}_{e} \left(\overline{x}, \overline{t}\right) + \overline{\tau}_{e} \frac{\partial \overline{A}_{e} \left(\overline{x}, \overline{t}\right)}{\partial \overline{t}}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \overline{T}_i}{\partial \overline{t}} + \overline{\tau}_i \frac{\partial^2 \overline{T}_i}{\partial \overline{t}^2} = k_i \frac{\partial^2 \overline{T}_i}{\partial \overline{x}^2} + \gamma_i \left(\overline{T}_e - \overline{T}_i\right) + \gamma_i \overline{\tau}_i \frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{T}_e - \overline{T}_i\right), \qquad (7)$$

$$\overline{T}_{\alpha}(\overline{x},0) = 1, \quad \frac{\partial \overline{T}_{\alpha}(\overline{x},\overline{t})}{\partial \overline{t}}|_{\overline{t}=0} = 0, \quad \frac{\partial \overline{T}_{\alpha}(\overline{x},\overline{t})}{\partial \overline{x}}|_{\overline{x}=0} = 0, \quad (8)$$
$$\overline{T}_{\alpha}(\overline{x}_{\max},\overline{t}) = 1, \quad \alpha = e, i.$$

Безразмерная функция источника и условия нормировок при этом принимают следующий вид:

$$\overline{A}_{e}\left(\overline{x},\overline{t}\right) = A_{0}\overline{f}_{1}\left(\overline{x}\right)\overline{f}_{2}\left(\overline{t}\right), \quad A_{0} = \frac{I_{0}\left[1 - R(T_{s})\right]\Delta t}{L_{p}C_{e}T_{0}},$$
$$\overline{f}_{1}\left(\overline{x}\right) = \exp\left(-\beta\overline{x}\right), \quad \beta = \frac{\Delta x}{L_{p}},$$
$$\left(\overline{t}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\exp\left[-\frac{\overline{t} - \overline{t}_{0}}{2\overline{\sigma}_{t}^{2}}\right] + \exp\left[-\frac{(\overline{t} - \overline{t}_{0} - \overline{\tau}_{d})^{2}}{2\overline{\sigma}_{t}^{2}}\right]\right), \quad \Phi = 2I_{0}\Delta t\overline{\sigma}_{t}.$$

В работах [19, 20] проведено численное моделирование задачи (6)–(8). Получены профили температур электронного газа и кристаллической решетки в разные моменты времени, а также динамики искомых температур на разных глубинах образца от его поверхности для параболической ($\tau_e = \tau_i = 0$) и гиперболической ($\tau_e \neq 0$; $\tau_i \neq 0$) МТП.

Однако при такой постановке остается неясным вклад разных членов от источников в температурах T_e , T_i . Поскольку в задаче (6)–(8) (при $R(T_s) = 0$) все уравнения являются линейными, ее можно расщепить на две для температур $T_{e1}(x,t)$, $T_{e2}(x,t)$, $T_{i1}(x,t)$, $T_{i2}(x,t)$, посредством которых выражаются $T_e(x,t)$, $T_i(x,t)$; $T_e(x,t) = T_{e1}(x,t) + T_{e2}(x,t)$, $T_i(x,t) = T_{i1}(x,t) + T_{i2}(x,t)$.

$$\frac{\partial \overline{T}_{e1}}{\partial \overline{t}} + \overline{\tau}_e \frac{\partial^2 \overline{T}_{e1}}{\partial \overline{t}^2} = k_e \frac{\partial^2 \overline{T}_{e1}}{\partial \overline{x}^2} - \gamma_e \left(\overline{T}_{e1} - \overline{T}_{i1}\right) + \overline{A}_e \left(\overline{x}, \overline{t}\right), \tag{9}$$

$$\frac{\partial \overline{T}_{i1}}{\partial \overline{t}} + \overline{\tau}_i \frac{\partial^2 \overline{T}_{i1}}{\partial \overline{t}^2} = k_i \frac{\partial^2 \overline{T}_{i1}}{\partial \overline{x}^2} + \gamma_i \left(\overline{T}_{e1} - \overline{T}_{i1} \right), \tag{10}$$

$$\overline{T}_{\alpha 1}(\overline{x},0) = 1; \quad \frac{\partial \overline{T}_{\alpha 1}(\overline{x},\overline{t})}{\partial \overline{t}}|_{\overline{t}=0} = 0; \quad \frac{\partial \overline{T}_{\alpha 1}(\overline{x},\overline{t})}{\partial \overline{x}}|_{\overline{x}=0} = 0, \quad (11)$$
$$\overline{T}_{\alpha 1}(\overline{x}_{\max},\overline{t}) = 1, \quad \alpha = e, i.$$

$$\frac{\partial \overline{T}_{e2}}{\partial \overline{t}} + \overline{\tau}_e \frac{\partial^2 \overline{T}_{e2}}{\partial \overline{t}^2} = k_e \frac{\partial^2 \overline{T}_{e2}}{\partial \overline{x}^2} - \gamma_e \left(\overline{T}_{e2} - \overline{T}_{i2}\right) + \overline{\tau}_e \frac{\partial \overline{A}_e\left(\overline{x}, \overline{t}\right)}{\partial \overline{t}},\tag{12}$$

$$\frac{\partial \overline{T}_{i2}}{\partial \overline{t}} + \overline{\tau}_i \frac{\partial^2 \overline{T}_{i2}}{\partial \overline{t}^2} = k_i \frac{\partial^2 \overline{T}_{i2}}{\partial \overline{x}^2} + \gamma_i \left(\overline{T}_{e2} - \overline{T}_{i2} \right), \tag{13}$$

$$\overline{T}_{\alpha 2}(\overline{x},0) = 0, \quad \frac{\partial \overline{T}_{\alpha 2}(\overline{x},\overline{t})}{\partial \overline{t}}|_{\overline{t}=0} = 0, \quad \frac{\partial \overline{T}_{\alpha 2}(\overline{x},\overline{t})}{\partial \overline{x}}|_{\overline{x}=0} = 0, \quad (14)$$
$$\overline{T}_{\alpha 2}(\overline{x}_{\max},\overline{t}) = 0, \quad \alpha = e, i.$$

 \overline{f}_{2}

ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ И ОБСУЖДЕНИЕ ЕГО РЕЗУЛЬТАТОВ

Численный эксперимент проведен с применением метода конечных разностей явной схемы [22] для материала никеля, облучаемого лазером двойного импульса со следующими параметрами [9]:



Рис. 1. Профили температур $T_{e1}(x,t_j)$ (a), $T_{i1}(x,t_j)$ (б), $T_{e2}(x,t_j)$ (в), $T_{i2}(x,t_j)$ (г), $T_e(x,t_j)$ (д), $T_i(x,t_j)$ (е) в разные моменты времени: $t_1 = 0,3, t_2 = 0,4, t_3 = 0,6, t_4 = 0,7, t_5 = 0,8, t_6 = 1$ при $\tau_e = 1, \tau_i = 100$

$$\begin{split} R\left(T_{s}\right) &= 0, \ C_{i} = \rho_{i}c_{i} = 2,28 \cdot 10^{6} \ \frac{\#}{\mathrm{KM}^{3}}, \ \lambda_{e} = 200 \ \frac{\mathrm{BT}}{\mathrm{KM}}, \ C_{e} = 27330 \ \frac{\#}{\mathrm{KM}^{3}}, \\ L_{p} &= 3 \cdot 10^{-8} \ \mathrm{M}, \\ \gamma &= 2,733 \cdot 10^{18} \ \frac{\#}{\mathrm{KM}^{3}}, \ \Phi = 400 \ \frac{\#}{\mathrm{M}^{2}}, \ \sigma_{t} = 5 \cdot 10^{-16} \ \mathrm{c}, \ t_{0} = 3 \cdot 10^{-15} \ \mathrm{c}, \\ \Delta_{x} &= 3 \cdot 10^{-8} \ \mathrm{M}, \ \Delta_{t} = 10^{-14} \ \mathrm{c}, \ \tau_{d} = 4 \cdot 10^{-15} \ \mathrm{c}, \ \tau_{e} = 10^{-14} \ \mathrm{c}, \ \tau_{i} = 10^{-12} \ \mathrm{c}, \end{split}$$

При этих параметрах безразмерные константы k_e , k_i , γ_e , γ_i , A_0 , β , $\overline{\tau}_e$, τ_i принимают значения $k_e \simeq 8,13107 \cdot 10^{-2}$; $k_i \simeq 4,4347 \cdot 10^{-4}$; $\gamma_e = 1$; $\gamma_i \simeq 1,199 \cdot 10^{-2}$; $A_0 \simeq 16,262.1458$; $\beta = 1$; $\overline{\tau}_e = 1$; $\overline{\tau}_i = 100$.



Рис. 2. Динамика температур $T_{e1}(x_j,t)$ (a), $T_{i1}(x_j,t)$ (б), $T_{e2}(x_j,t)$ (в), $T_{i2}(x_j,t)$ (г), $T_e(x_j,t)$ (д), $T_i(x_j,t)$ (е) в разных глубинах образца $x_j = 0,3$ (j-1), $j = 1, \ldots, 7$, при $\tau_e = 1$, $\tau_i = 100$

Результаты численных экспериментов будут получены и отображены на графиках в безразмерных переменных температур и времени.

Чтобы выявить вклад каждого члена источника в уравнение теплопроводности электронного газа, сначала решали задачу (9)–(11) для температур $T_{e1}(x,t)$, $T_{i1}(x,t)$, которые соответствуют источнику $A_e(x,t)$.

Аналогичная задача (12)–(14) решалась для источника $\tau_e \partial A_e(x,t)/\partial t$, которому соответствуют температуры $T_{e2}(x,t)$, $T_{i2}(x,t)$.

На рис. 1, a, b приведены профили температур электронного газа $T_{e1}(x, t)$ и кристаллической решетки $T_{i1}(x, t)$ в разные моменты времени:



Рис. 3. Профили температур $T_{e1}(x,t_j)$ (a), $T_{i1}(x,t_j)$ (б), $T_{e2}(x,t_j)$ (в), $T_{i2}(x,t_j)$ (г), $T_e(x,t_j)$ (д), $T_i(x,t_j)$ (е) в разные моменты времени: $t_1 = 0,3, t_2 = 0,4, t_3 = 0,6, t_4 = 0,7, t_5 = 0,8, t_6 = 1$, при $\tau_e = 0,1, \tau_i = 10$

 $t_1 = 0,3, t_2 = 0,4, t_3 = 0,6, t_4 = 0,7, t_5 = 0,8, t_6 = 1$, которые получаются под действием источника $A_e(x,t)$.

Как видно, максимумы профилей для обеих температур на поверхности образца возрастают со временем.

На рис. 2, *в*, *е* при тех же значениях времени приведены аналогичные профили температур для задачи (12)–(14) с источником $\tau_e \partial A_e(x,t)/\partial t$.

Как видно, максимум температуры электронного газа на поверхности образца сначала со временем растет (с t_1 до t_2), а потом убывает до t_3 . Это связано с действием первого импульса источника. С момента t_3 до t_4 , t_5 максимумы профилей температуры электронного газа возрастают. С момента t_5 до t_6 искомые максимумы уменьшаются. Это связано с



Рис. 4. Профили температур $T_{e1}(x,t_j)$ (a), $T_{i1}(x,t_j)$ (б), $T_{e2}(x,t_j)$ (в), $T_{i2}(x,t_j)$ (е), $T_e(x,t_j)$ (д), $T_i(x,t_j)$ (е) в разные моменты времени: $t_1 = 0,3, t_2 = 0,4, t_3 = 0,6, t_4 = 0,7, t_5 = 0,8, t_6 = 1$, при $\tau_e = 0,01, \tau_i = 1$

действием второго импульса источника. То есть поведение $T_{e2}(x,t)$ во времени напоминает поведение самого источника $A_e(x,t)$. Максимумы профилей температуры кристаллической решетки $T_{i2}(x,t)$, как и максимумы профилей $T_{i1}(x,t)$, возрастают во времени. Из сравнения графиков рис. 1, $a, \delta, s, \varepsilon$ можно сделать вывод, что при данных параметрах вклад источника $\tau_e \partial A_e(x,t)/\partial t$ в значения температур $T_e(x,t), T_i(x,t)$ больше, чем вклад самого источника $A_e(x,t)$.



Рис. 5. Профили температур $T_{e1}(x,t_j)$ (a), $T_{i1}(x,t_j)$ (б), $T_{e2}(x,t_j)$ (в), $T_{i2}(x,t_j)$ (г), $T_e(x,t_j)$ (д), $T_i(x,t_j)$ (е) в разные моменты времени: $t_1 = 0,3, t_2 = 0,4, t_3 = 0,6, t_4 = 0,7, t_5 = 0,8, t_6 = 1$, при $\tau_e = 10, \tau_i = 1000$

На рис. 1, ∂ , *е* изображена динамика профилей температур электронного газа и кристаллической решетки $T_e(x,t)$, $T_i(x,t)$ ($T_e(x,t) = T_{e1}(x,t) + T_{e2}(x,t)$) $T_i(x,t) = T_{i1}(x,t) + T_{i2}(x,t)$).

Численно решая общую задачу (3)–(5), мы убедились в справедливости равенств $T_e(x,t) = T_{e1}(x,t) + T_{e2}(x,t), T_i(x,t) = T_{i1}(x,t) + T_{i2}(x,t).$

На рис. 2 показана динамика температур $T_{e1}(x,t_j)$ (a), $T_{i1}(x,t_j)$ (б), $T_{e2}(x,t_j)$ (в), $T_{i2}(x,t_j)$ (г), $T_e(x,t_j)$ (д), $T_i(x,t_j)$ (е) в разных глубинах образца $x_j = 0,3$ (j-1), j = 1, ..., 7.



Рис. 6. Динамика температур $T_{e1}(x,t_j)$ (a), $T_{i1}(x,t_j)$ (б), $T_{e2}(x,t_j)$ (в), $T_{i2}(x,t_j)$ (г), $T_e(x,t_j)$ (д), $T_i(x,t_j)$ (е) в разных глубинах образца $x_j = 0,3$ (j-1), j = 1, ..., 7, при $\tau_e = 0,1$, $\tau_i = 10$

Анализ динамики температур электронного газа $(T_{e1}(x,t_j), T_{e2}(x,t_j), T_{e}(x,t_j))$ и поведения кристаллической решетки $(T_{i1}(x,t_j), T_{i2}(x,t_j), T_{i}(x,t_j))$ на разных глубинах образца также подтверждает наши предыдущие выводы.

Следует подчеркнуть, что, поскольку нас интересуют исследования, связанные с вкладами разных элементов источника в общую температуру электронного газа и кристаллической решетки, численный эксперимент проведен только в пределах времени действия источника до его выключения.



Рис. 7. Динамика температур $T_{e1}(x,t_j)$ (*a*), $T_{i1}(x,t_j)$ (*b*), $T_{e2}(x,t_j)$ (*b*), $T_{i2}(x,t_j)$ (*c*), $T_e(x,t_j)$ (*d*), $T_i(x,t_j)$ (*e*) в разных глубинах образца $x_j = 0,3$ (j-1), $j = 1, \ldots, 7$, при $\tau_e = 0,01$, $\tau_i = 1$

Поскольку в уравнениях гиперболической МТП наряду с первыми производными от температур присутствуют и их вторые производные, то решения при некоторых временах должны проявлять волновые свойства. Численное исследование при больших временах, связанное с обнаружением этих свойств искомых уравнений, может служить предметом другой научной работы.

Чтобы выявить влияние параметров τ_e , τ_i на результаты профилей температур электронного газа и кристаллической решетки в разные моменты времени, а также на их динамику в разных глубинах образца, аналогичные



Рис. 8. Динамика температур $T_{e1}(x,t_j)$ (a), $T_{i1}(x,t_j)$ (б), $T_{e2}(x,t_j)$ (в), $T_{i2}(x,t_j)$ (г), $T_e(x,t_j)$ (д), $T_i(x,t_j)$ (е) в разных глубинах образца $x_j = 0,3$ (j-1), $j = 1, \ldots, 7$, при $\tau_e = 10$, $\tau_i = 1000$

графики приведены для других значений этих параметров: $\tau_e = 0, 1, \tau_i = 10;$ $\tau_e = 0,01, \tau_i = 1; \tau_e = 10, \tau_i = 1000.$ Рис. 3–5 показывают динамику координатного распределения температур электронного газа и кристаллической решетки, а также в их разных частях, а рис. 6–8 динамику этих же температур на разных глубинах образца.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В гиперболическом уравнении, в отличие от параболического, присутствует дополнительный параметр, который характеризует время релаксации потока тепла. В источнике гиперболического уравнения присутствует дополнительное слагаемое — производная от плотности мощности источника параболического уравнения. Это означает, что на температуру образца оказывает влияние не только плотность мощности источника, но и скорость ее изменения.

В предположении независимости теплофизических параметров материала образца от температур уравнения гиперболической МТП являются линейными. С использованием этого свойства уравнений в настоящей работе установлен вклад каждого элемента общего источника в электронный газ, в температуры электронного газа и кристаллической решетки. При некоторых подборах параметров релаксации потоков тепла в электронном газе и кристаллической решетке вклады, связанные с производностью источника, умноженной на время релаксации в электронном газе, могут превышать вклады от того же источника. Поведение максимума профилей температур в разное время и динамика температур на разных глубинах образца в электронном газе, связанные со второй частью источника, напоминают свойства самого источника. В кристаллической решетке оба вклада от ее температуры все время растут с начала включения источника до его выключения. Численное моделирование проводилось только в пределах времени действия источника. Исследования, связанные с проявлением волновых свойств гиперболических уравнений МТП, которые возникают при больших временах после выключения источника, могут служить предметом другой научной работы.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и МОКНСМ в рамках научного проекта № 20-51-44001.

Конфликт интересов: Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции // УФН. 2002. Т. 172, № 3, С. 301–333.
- 2. Вейко В. П., Либенсон М. Н., Червяков Г. Г., Яковлев Е. Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика / Под ред. В. И. Конова. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 312 с.
- 3. *Allen M. P., Tildesley D. J.* Computer Simulation of Liquids. Walton Street, Oxford OX2 6DP: Clarendon Press, 1991.

- 4. AJin Z. H., Gumbsch P., Lu K., Ma E. Melting Mechanisms at the Limit of Superheating // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87, No. 5. P. 055703.
- 5. *Abraham F. F., Broughton J. Q.* Pulsed Melting of Silicon (111) and (100) Surfaces Simulated by Molecular Dynamics // Phys. Rev. Lett. 1986.
- Zhigilei V., Garrison B.J. Pressure Waves in Microscopic Simulations of Laser Ablation // Materials Research Society (MRS) Proc. V. 538. Cambridge University Press, 1998. P. 491–496.
- Etcheverry J. I., Mesaros M. Molecular Dynamics Simulation of the Production of Acoustic Waves by Pulsed Laser Irradiation // Phys. Rev. B. 1999. V. 60, No. 13. P. 9430–9434.
- Zhigilei L. V., Garrison B.J. Microscopic Mechanisms of Laser Ablation of Organic Solids in the Thermal and Stress Confinement Irradiation Regimes // J. Appl. Phys. 2000. V. 88, No. 3. P. 1281–1298.
- 9. Фокин В. Б. Континуально-атомистическая модель и ее применение для численного расчета воздействия одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импулься на металлы. Дис. канд. ... физ.-мат. наук. М., 2017.
- Sobolev S. L. Two-Temperature Discrete Model for Nonlocal Heat Conduction // J. Phys. III France 3. 1993. P. 2261–2269.
- Соболев С. Л. Локально-неравновесные модели процессов переноса // УФН. 1997. Т. 167, № 10. С. 1095–1106.
- Sobolev S. L. Nonlocal Two Temperature Model: Application to Heat Transport in Materials Irradiated by Ultrashort Laser Pulses // Intern. J. Heat Mass Transfer. 2016. V. 94. P. 138–144 (journal homepage: www.elsevier.com/locate/ijhmt)
- Sobolev S. L. On Hyperbolic Heat-Mass Transfer Equation // Intern. J. Heat Mass Transfer. 2018. V.122. P.629-630 (journal homepage: www.elsevier.com/ locate/ijhmt)
- 14. Kudinov I. V., Sobolev S. L., Mikheeva G. M. Study of the Two Temperature Heat Transfer Model in Metal Nanofilms Exposed to Ultrashort Laser Pulses // Central European Symp. on Thermophysics 2020 (CEST2020). AIP Conf. Proc. 2275, 020015-1-020015-6; https://doi.org/10.1063/5.0025795. AIP Publishing. 978-0-7354-4005-0/S30.00
- Sobolev S. L. The Local-Noneequilibrium Temperature Field around the Melting and Crystallization Front Induced by Picosecond Pulsed Laser Irradiation // Intern. J. Thermophysics. 1996. V. 17, No. 5.
- 16. Лыков В. Тепломассообмен: 2-е изд. М.: Энергия, 1978. 480 с.
- 17. Vernott P. // Comptes Rendus. 1958. V. 246, No. 22. P. 3154, 3155.
- 18. Карташов Э. М., Кудинов В. А. Аналитические методы теории теплопроводности и ее приложений. М.: ЛЕНАНД, 2018. 1072 с.
- 19. Амирханов И.В., Сархадов И., Тухлиев З.К., Гафуров Х. Моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах под действием лазерных импульсов в рамках гиперболической модели термического пика // 51-я Международная Тулиновская конф. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. Москва, МГУ, 24–26 мая 2022 г.
- 20. Амирханов И. В., Сархадов И., Тухлиев З. К. Результаты численного моделирования тепловых процессов, возникающих в материалах при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов // Информационно-телекоммуникационные

технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем. М., 18–22 апр. 2022 г.

- Amirkhanov I. V., Sarker N. R., Sarkhadov I. Numerical Simulation of Thermal Processes Occurring in Materials under the Action of Femtosecond Laser Pulses // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. M.: PFUR, 2021. V. 29, No. 1. P. 5–13.
- 22. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 258-276.

Получено 12 июля 2022 г.

Редактор М. И. Зарубина

Подписано в печать 19.09.2022. Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1,0. Уч.-изд. л. 1,52. Тираж 200 экз. Заказ № 60502.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований 141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6. E-mail: publish@jinr.ru www.jinr.ru/publish/