

УДК 538.913 538.971

АБЛЯЦИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА ПОД ДЕЙСТВИЕМ СВЕРХКОРОТКИХ  
ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ  
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Д.С. Иванов<sup>а,с</sup>, В.П. Вейко<sup>б</sup>, Е.Б. Яковлев<sup>б</sup>, Б. Ретфельд<sup>а</sup>, М.Э. Гарсия<sup>с</sup>

<sup>а</sup> Технический университет Кайзерслаутерн и исследовательский центр ОПТИМАС, 67653, Кайзерслаутерн, Германия

<sup>б</sup> Университет ИТМО, 197101, Санкт-Петербург, Россия, ebyakovlev@yandex.ru

<sup>с</sup> Университет Кассель, 34109, Кассель, Германия

**Аннотация.** Методами молекулярной динамики исследован процесс лазерной абляции при воздействии на металлы сверхкоротких лазерных импульсов. Выясняется действенность и применимость гибридной атомистически-непрерывной модели для оценки оптимальных режимов обработки сверхкороткими лазерными импульсами. Предложено сочетание атомистической модели лазерно-индуцированного процесса неравновесного фазового перехода на атомном уровне с непрерывной двухтемпературной моделью для описания динамики фотовозбуждения свободных носителей. Показана применимость модели лазерной абляции на примере пленок алюминия и золота при воздействии импульсов с различной плотностью энергии и длительностью. Показано, что в зависимости от соотношения длительности лазерного импульса и характерного времени электрон-фононного взаимодействия материала реализуются фототермический и фотомеханический режимы разрушения, которые определяют качество и производительность лазерной обработки. Установлено, что при длительности лазерного импульса меньше времени электрон-фононного взаимодействия реализуется высокопроизводительный фотомеханический характер разрушения за счет возникших в области воздействия внутренних напряжений. Это подтверждается линейной зависимостью скорости абляции от поглощенной энергии. При длительности лазерного импульса больше времени электрон-фононного взаимодействия реализуется малопродуктивный фототермический режим разрушения. Результаты работы могут быть полезны специалистам, занимающимся разработкой лазерных технологий.

**Ключевые слова:** лазерная абляция, сверхкороткие лазерные импульсы, молекулярная динамика, фототермическое разрушение, фотомеханическое разрушение.

**Благодарности.** Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации НШ-1364.2014.2, грантов РФФИ 12-02-01194, 13-02-00033, 13-02-00971 и при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01) и грантов DFG IV 122/1-1 и IV 122/1-2.

SOLID BODY ABLATION UNDER EXPOSURE TO ULTRA SHORT LASER  
PULSES: STUDY BY MOLECULAR DYNAMICS METHODS

D.S. Ivanov<sup>а,с</sup>, V.P. Veiko<sup>б</sup>, E. B. Yakovlev<sup>б</sup>, B. Rethfeld<sup>а</sup>, M.E. Garcia<sup>с</sup>

<sup>а</sup> Technical University of Kaiserslautern and OPTIMAS research center, 67653, Kaiserslautern, Germany

<sup>б</sup> ITMO University, 197101, Saint Petersburg, Russia, ebyakovlev@yandex.ru

<sup>с</sup> University of Kassel, 34109, Kassel, Germany

**Abstract.** The process of laser ablation under the influence of ultra short laser pulses on metals is investigated by methods of molecular dynamics. The validity and applicability of the hybrid atomistic-continuous model for the estimation of optimum modes of ultra short laser pulses processing are explored. Combination of atomistic model of laser-induced non-equilibrium process of a phase transition at the atomic level with continuous two-temperature model for describing the dynamics of photo-excitation of free media is proposed. Applicability of laser ablation model on the example of aluminum films and gold under exposure to pulses with different energy density and duration is shown. It is indicated that, depending on the ratio of the laser pulse duration and the characteristic time of electron-phonon material interaction, photothermal and photomechanical modes of destruction are implemented that determine the quality and performance of the laser processing. It is established that at the duration of laser pulse less than the time of electron-phonon interaction high-performance photomechanical type of destruction is implemented by internal stresses arising in the area of exposure. This is confirmed by a linear dependence of the ablation rate from the absorbed energy. At the duration of laser pulse greater than the time of electron-phonon interaction inefficient photothermal mode of destruction is implemented. The results may be useful for specialists engaged in the development of laser technologies.

**Keywords:** laser ablation, ultra short laser pulses, molecular dynamics, photothermal destruction, photomechanical destruction.

**Acknowledgements.** The work is done under the grant support of the President of the Russian Federation NSH-1364.2014.2, RFBR grants 12-02-01194, 13-02-00033, 13-02-00971, and is partially financially supported by the Government of the Russian Federation (grant 074-U01), grants DFG IV 122/1-1 and IV 122/1-2.

Введение

Абляция при воздействии сверхкоротких лазерных импульсов широко используется в промышленности. Возможность локализации большого количества энергии в малом объеме хорошо зарекомендовала себя в качестве эффективного инструмента при лазерном сверлении, резке, сварке [1–3]. Оказалось, что

качество обработки сильно зависит от параметров лазерного воздействия. Например, было показано как экспериментально, так и теоретически, что время электрон-фононного взаимодействия, энергия и длительность импульсов могут играть важную роль в механизме лазерного разрушения металлов [4, 5]. В соответствии с этими работами, индуцированное изменение вещества, в том числе процессы плавления, откалывания, испарения и абляции, в целом определяются соотношением длительности импульса с характерным временем электрон-фононного взаимодействия. В других работах предполагается, что при оценке результата воздействия не менее важны свойства материала и другие параметры. Так, в ряде экспериментов [6, 7] четко определены два режима скорости абляции при низких и высоких плотностях энергии для таких металлов, как золото и серебро. Было сделано предположение, что низкая и высокая скорость абляции, в зависимости от поглощенной энергии, определяется фототермическим или фотомеханическим механизмом разрушения [8, 9].

Теоретические расчеты подтвердили, что качество и производительность обработки определяют преобладание фотомеханического или фототермического режима разрушения. Так, в частности, было определено, что условия возникновения локализации напряжений, реализующиеся при воздействии сверхкоротких лазерных импульсов лазерного излучения на вещество, являются основным фактором реализации разрушения отколом, которое носит скорее механический, нежели тепловой характер [10, 11]. При этом глубина удаления материала была больше, что является показателем эффективности обработки, с минимизацией теплового воздействия, а это является показателем качества. Условие для наступления соответствующего лазерного воздействия определяется соотношением [12, 13]

$$\max \{t_p, t_{e-ph}\} \approx t_{heating} \leq t_{mech} \approx \frac{L_{e-diff}}{C_s}, \quad (1)$$

где  $t_{mech}$  – характерное время механической разгрузки внутренних напряжений – оказывается больше, чем время нагрева  $t_{heating}$ , которое определяется максимальной из двух величин: либо длительностью импульса  $t_p$ , либо характерным временем электрон-фононной релаксации  $t_{e-ph}$ . Время механической разгрузки, с другой стороны, зависит от эффективной глубины поглощения лазерной энергии  $L_{e-diff}$  и скорости звука в материале  $C_s$ .

Хотя уравнение (1) и определяет условия для реализации механизма откола, к сожалению, его трудно применить для прогнозирования обработки материала напрямую, если говорить об эффективности и качестве. Известно, что существуют два основных механизма передачи поглощенной лазерной энергии в материал: быстрая теплопроводность горячих электронов, определяющая глубину распределения поглощенной энергии, и электрон-фононный теплообмен, определяющий скорость нагревания решетки [14]. Их зависимость от параметров облучения и свойств материала была недавно рассмотрена на основе упрощенного теоретического подхода с помощью двухтемпературной модели (ДТМ) в [12]. Важно, что свойства материала, такие как электронная теплопроводность  $K_e$ , электронная теплоемкость  $C_e$ , и параметр электрон-фононного взаимодействия  $G_{e-ph}$ , являются функциями температуры электронов [15–17] (см. рис. 1). Видно, что параметр электрон-фононного взаимодействия увеличивается с ростом температуры для обоих металлов. Для золота это увеличение сильнее выражено из-за наличия широкой  $d$ -зоны в его зонной структуре. С другой стороны, зависимости электронной теплопроводности от температуры для этих материалов значительно отличаются. Благодаря гораздо большей температуре Ферми (135 000 К) алюминия его теплопроводность линейно растет с электронной температурой, по крайней мере, до 30 000 К, в то время как для золота, обладающего сравнительно низкой температурой Ферми (56 000 К), на механизмы теплопроводности оказывает сильное влияние электрон-электронное взаимодействие уже при 20 000 К, что приводит к уменьшению ее значения. Динамика электронной температуры, в свою очередь, сильно зависит от длительности импульсов и поглощенной энергии. Исходя из этого, при таких сложных связях между свойствами материала и электронной температурой реализация одного или другого механизмов абляции в зависимости от параметров облучения неочевидна.

В работе с помощью гибридной атомистически-непрерывной модели, основанной на молекулярно-динамическом методе (МД), мы пытаемся выяснить действенность и применимость сделанных оценок, в частности, с помощью формулы (1), при определении параметров лазерного излучения для оптимизации режимов обработки сверхкороткими лазерными импульсами.

### Модель

Идея построения гибридной модели основывается на способности МД метода, с одной стороны, отслеживать кинетику сверхбыстрых неравновесных фазовых переходов на атомном уровне и, с другой стороны, с помощью ДТМ в сплошной среде описывать динамику фотовозбужденных свободных носителей в твердом теле. В комбинированной МД-ДТМ-модели уравнение для температуры решетки ДТМ полностью заменяется уравнением движения атомов МД, а энергетический обмен между решеткой и горячими электронами учитывается в МД-части с помощью дополнительного коэффициента трения. Подробное описание МД-ДТМ-модели приведено в [5, 18]. Параметризация потенциала межатомного взаимодействия проведена согласно [19], что дает более точное воспроизведение свойств материала. Таким

образом, построенная модель, кроме присущих МД модели возможностей описания кинетики неравновесных процессов с атомным разрешением, способна описывать поглощение лазерного излучения, быструю электронную теплопроводность и электрон-фононную неравновесность. В связи с этим она может быть использована для исследования процессов, индуцированных сверхкоротким лазерным импульсом, включая плавление, испарение, отщепление (спалацию, откол) и абляцию тонких и толстых металлических мишеней [20].

Для выполнения задач нашего исследования мы выбрали два очень разных металла: алюминий и золото. Они относятся к так называемым переходной и благородной группам металлов соответственно. Алюминий имеет относительно малое (1 пс) характерное время электрон-фононной релаксации, а золото – большое (20 пс). В общем случае данные времена являются функцией плотности поглощенной энергии, однако в любом случае они различаются как минимум на порядок по величине. МД-ДТМ-вычислительные ячейки для обоих материалов состоят из  $20 \times 20 \times 400$  узлов кристаллической решетки в направлениях  $X$ ,  $Y$  и  $Z$ -осей, что соответствует расчету в общей сложности для 640 000 атомов. Следовательно, для параметров решетки 0,405643 нм для алюминия и 0,408472 нм для золота в МД-части построенная вычислительная сетка представляет пленку около 160 нм толщины. Однако, если мы применим динамические граничные условия для передачи давления на границе МД-части [21], то получим возможность, как было показано в недавней работе [22], моделирования взаимодействия лазерного излучения с толстыми металлическими мишенями. Так, непрерывная часть модели обеспечивает расчет теплового потока на расстоянии более 20 мкм в глубину. Для надежного определения параметров (температура, давление, плотность и т.д.) в МД-части модели принята сетка с размером ячейки 1 нм, что дает достаточно высокое пространственное разрешение для ДТМ-части модели и по-прежнему удовлетворяет размеру приемлемого статистического ансамбля: усреднение определяемых теплофизических величин ведется также по всем соседним ячейкам МД-части, насчитывающим в целом около 4000 частиц. Наконец, мы применяем свободные граничные условия на верхней границе образца для действия лазерного импульса и периодические граничные условия в направлениях  $X$  и  $Y$ , перпендикулярных направлению распространения лазерного импульса.

## Результаты

Чтобы показать различие в развитии разрушения, вызванного воздействием лазерного излучения у двух выбранных материалов, мы воздействуем на алюминий импульсами длительностью  $t_p$ , равной 0,2 пс и 6,0 пс, а на золото – 6,0 пс и 60 пс. Таким образом, в обоих случаях мы имеем длительность лазерного воздействия значительно ниже и выше характерного времени электрон-фононного взаимодействия, даже с учетом его зависимости от плотности поглощенной лазерной энергии. Более того, судя по поведению функции электронной температуропроводности золота, существуют два крайних случая с точки зрения распределения поглощенной лазерной энергии по глубине (рис. 1): локализация энергии в непосредственной близости от поверхности материала, вследствие ограничения влияния теплопроводности, и увеличение глубины поглощения при высокой степени возбуждения носителей поглощенной энергией. Последовательные материалы будут подвергнуты воздействию лазерного излучения с различной плотностью поглощенной энергии  $Q$ , что и послужит выявлению режимов, определяющих механизм разрушения.

Мы начнем с простого случая лазерной абляции алюминия. Так как этот материал обладает характерным временем электрон-фононной релаксации 1 пс, то импульс длительностью 0,2 пс можно рассматривать как сверхкороткий, а импульс 6,0 пс – как длинный. Результаты взаимодействия этих импульсов с алюминиевым образцом представлены в виде полей температуры и давления в веществе на рис. 2, 3 для сверхкороткого (рис. 2, а, и рис. 3, а) и длинного (рис. 2, б, и рис. 3, б) импульса соответственно. Видно, что результаты воздействия этих двух импульсов сильно отличаются для одного и того же материала и одной и той же поглощенной энергии. Объяснить это можно на основе рис. 1, б, где приведены зависимости электронной теплопроводности и коэффициента электрон-фононного взаимодействия для алюминия от электронной температуры. В частности, при воздействии короткого импульса электронный газ нагревается до более высоких температур (около 30 000 К) (рис. 1, б, зеленый прямоугольник), что, в свою очередь, приводит к большей теплопроводности электронов. В связи с этим в случае коротких импульсов поглощенная энергия оказывается распределенной на большей глубине, на которой устанавливаются градиенты температур и давления. Кроме того, поскольку импульс короче, чем время электрон-фононного взаимодействия, то материал не имеет достаточно времени для теплового расширения в ответ на быстрый нагрев. Таким образом, в твердом теле происходит формирование области больших внутренних напряжений, что приводит к высокому давлению при относительно низкой температуре. Релаксация внутренних напряжений будет создавать при разгрузке волну давления, проходящую сквозь материал. Это может вызвать его расслоение на определенной глубине (даже в нескольких местах) там, где растягивающие напряжения при заданной температуре решетки достаточно велики. Такого рода фотомеханические повреждения приводят к большей абляции, т.е. более эффективны с точки зрения производительности и каче-

ства (чистоты удаления материала) вследствие меньшего термического повреждения окружающего материала (рис. 2, а, и рис. 3, а).

Противоположная ситуация возникает при воздействии лазерного импульса длительностью 6,0 пс с тем же материалом при той же поглощенной энергии. Поскольку импульс длинный, то в этом случае максимальная электронная температура из-за меньшей плотности мощности будет меньше (около 20 000 К), что, в свою очередь, снижает теплопроводность (рис. 1, а, красный прямоугольник). Как следствие, градиенты температуры и давления формируются на меньшей глубине по сравнению с предыдущим случаем, к тому же условия локализации формирования внутренних напряжений согласно формуле (1) в этом случае не выполняются. Высокая температура существует на меньшей глубине, что приводит к снижению давления и создает условия для преобладания термического разрушения. В этом режиме релаксация внутренних напряжений, сформировавшихся в приповерхностной области, вызывает активное разбрызгивание расплавленного материала, вклад механизма испарения в разрушение увеличивается, что приводит к уменьшению глубины абляции. Такой режим обработки с точки зрения эффективности и качества (рис. 2, б, и рис. 3, б) невыгоден.

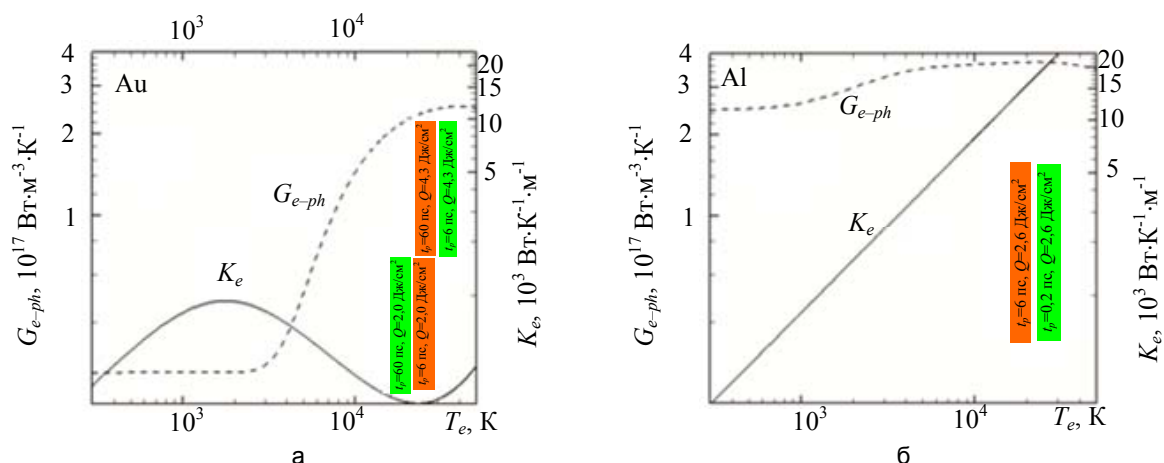


Рис. 1. Электронная теплопроводность  $K_e$  (сплошная линия) и коэффициент электрон-фононного взаимодействия  $G_{e-ph}$  (штриховая линия) для золота (а) и алюминия (б), как функция электронной температуры  $T_e$  [15–17] (температура атомной решетки  $T = 300 \text{ К}$ ). Красные или зеленые прямоугольники указывают соответственно тепловой или механический режим разрушения, полученные в результате моделирования, для различных плотностей поглощенной энергии и времени воздействия лазерного импульса, используемых в работе. Положения прямоугольников по горизонтали указывают на характерные значения изменения электронной температуры в процессе моделирования

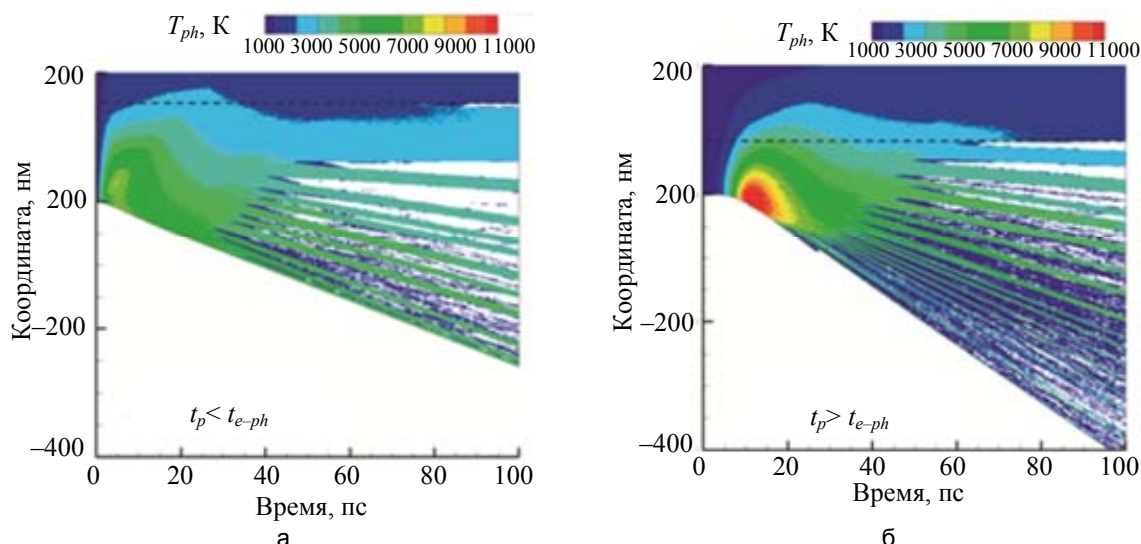


Рис. 2. Температурные поля  $T_{ph}$  внутри материала при воздействии импульсов длительностью 0,2 пс (а) и 6 пс (б) с толстой алюминиевой пленкой, при поглощенной плотности энергии 2,6 Дж/см<sup>2</sup>. Пунктирная линия – глубина максимального разрушения

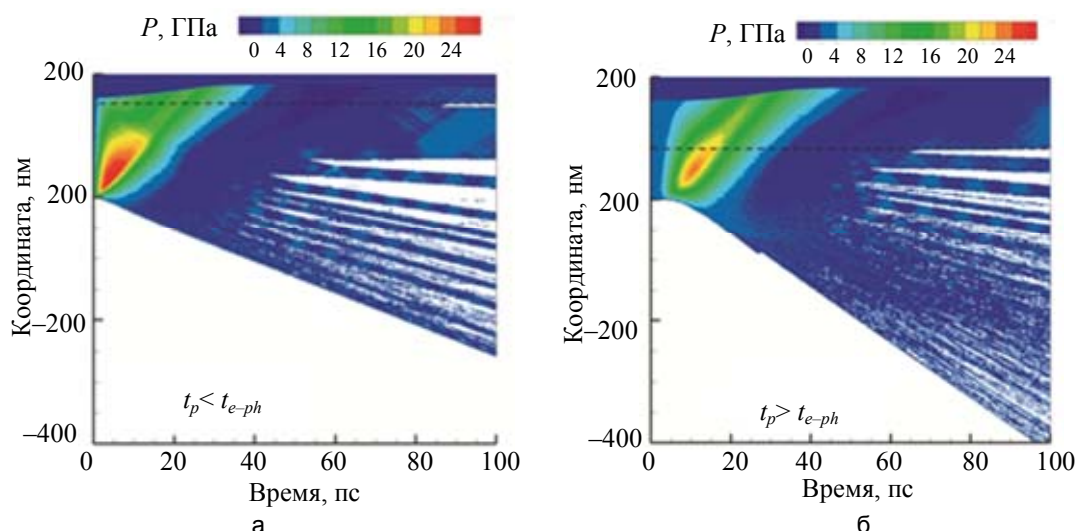


Рис. 3. Поле давлений  $P$  внутри материала при воздействии импульсов длительностью 0,2 пс (а) и 6 пс (б) с толстой алюминиевой пленкой, при поглощенной плотности энергии  $2,6 \text{ Дж/см}^2$ .  
Пунктирная линия – глубина максимального разрушения

Далее мы рассмотрим воздействие лазерных импульсов длительностью 6,0 и 60 пс на золото при поглощенной плотности энергии  $2,0 \text{ Дж/см}^2$ . Поскольку характерное время электрон-фононной релаксации золота 20 пс, то первый импульс можно считать коротким, а второй – длинным. Рассчитанные поля температур и давлений внутри материала для этого случая приведены на рис. 4, 5. На первый взгляд получен результат, противоположный предыдущему. Однако, если учесть изменения электронной теплопроводности и электрон-фононного взаимодействия для золота от электронной температуры (рис. 1, а), становится ясно, что чем короче импульс, тем выше электронная температура при одинаковой поглощенной энергии (рис. 4, а, и рис. 5, а). Достигнутая электронная температура (до 30 000 К) приводит к малой электронной теплопроводности при большом коэффициенте электрон-фононного взаимодействия из-за возбуждения электронов из  $d$ -зоны, что, в конечном счете, определяет малую глубину поглощения энергии (рис. 1, а, красный нижний прямоугольник). Это приводит к значительному тепловому разрушению образца при небольшой глубине удаления материала. При длительности же импульса 60 пс, хотя достигаемая электронная температура (20 000 К) ниже, электронная теплопроводность больше при меньшем коэффициенте электрон-фононного взаимодействия (рис. 1, а, зеленый прямоугольник). Таким образом, несмотря на то, что условия локализации формирования внутренних напряжений в данном случае не выполняются, характер разрушений больше обуславливается существующими напряжениями, приводящими к большему фотомеханическому повреждению при меньшем участии фототеплового (рис. 4, б, и рис. 5, б).

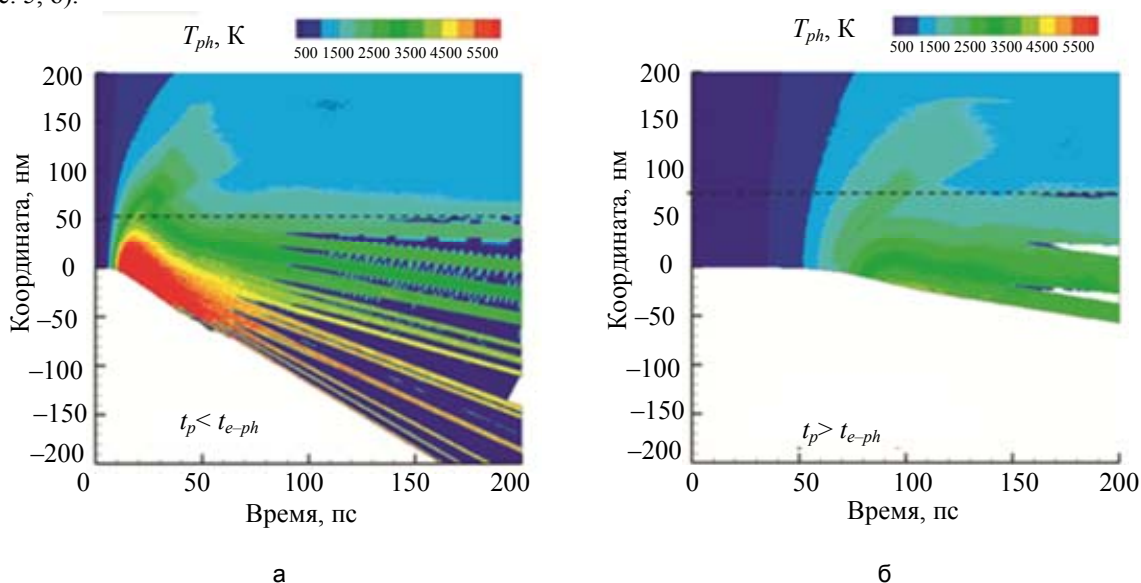


Рис. 4. Температурные поля внутри материала при воздействии импульсов длительностью 6,0 пс (а) и 60 пс (б) с толстой золотой пленкой, при поглощенной плотности энергии  $2,0 \text{ Дж/см}^2$ .  
Пунктирная линия – глубина максимального разрушения



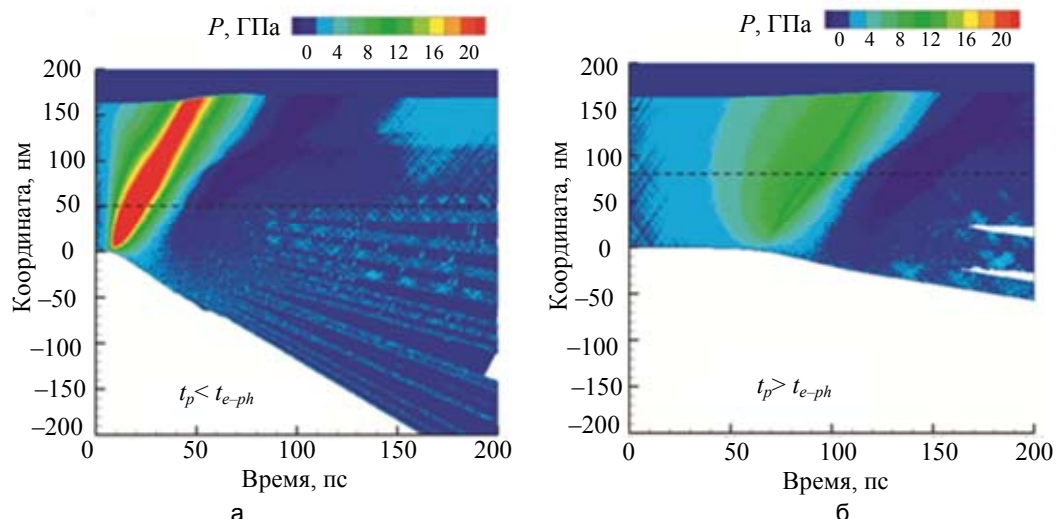


Рис. 5. Поле давлений внутри материала при воздействии импульсов длительностью 6,0 пс (а) и 60 пс (б) с толстой золотой пленкой, при поглощенной плотности энергии 2,0 Дж/см<sup>2</sup>.  
Пунктирная линия – глубина максимального разрушения

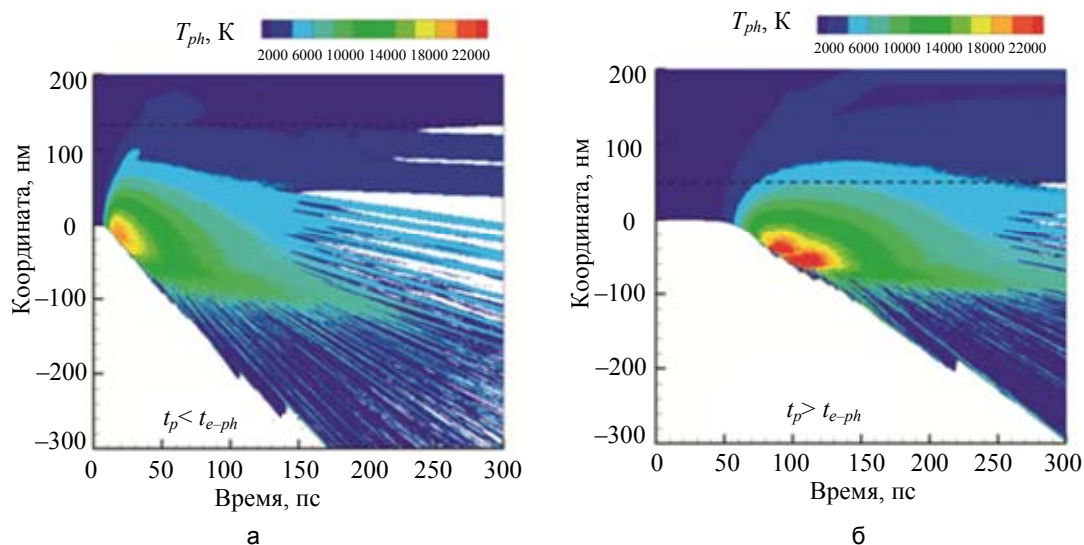


Рис. 6. Температурные поля внутри материала при воздействии импульсов длительностью 6,0 пс (а) и 60 пс (б) с толстой золотой пленкой, при поглощенной плотности энергии 4,3 Дж/см<sup>2</sup>.  
Пунктирная линия – глубина максимального разрушения

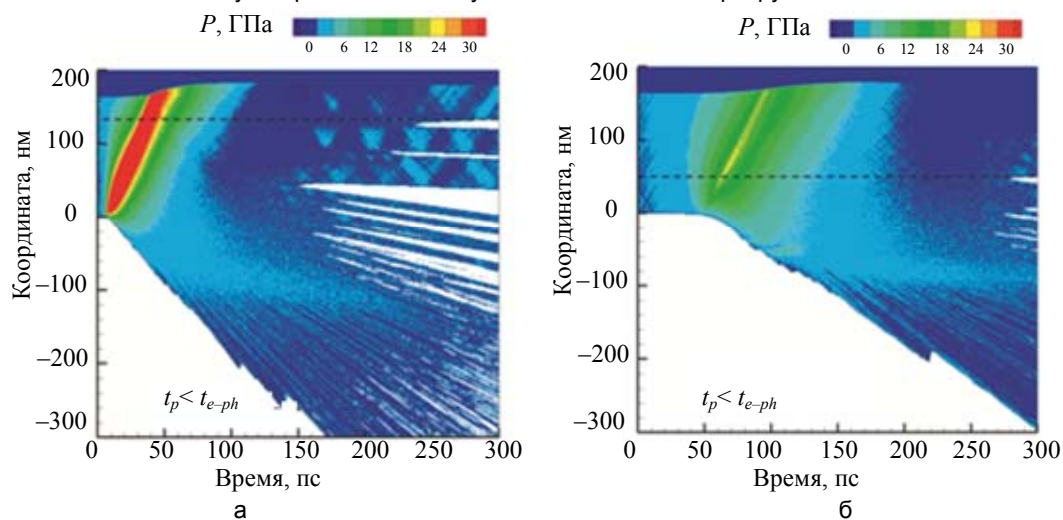


Рис. 7. Поле давлений внутри материала при воздействии импульсов длительностью 6,0 пс (а) и 60 пс (б) с толстой золотой пленкой, при поглощенной плотности энергии 4,3 Дж/см<sup>2</sup>.  
Пунктирная линия – глубина максимального разрушения

Ситуация меняется при увеличении поглощенной плотности энергии до  $4,3 \text{ Дж/см}^2$  (рис. 6, 7). При длительности импульса 6 пс электронная температура увеличивается, что вызывает резкий рост электронной теплопроводности золота (рис. 1, а, верхний зеленый прямоугольник), а коэффициент электрон-фононного взаимодействия при этом остается приблизительно таким же. Создаются условия для формирования локализации внутренних напряжений, в результате реализуется фотомеханическое разрушение с высокой производительностью и хорошим качеством (рис. 6, а, и рис. 7, а). Напротив, длинный импульс приводит к тепловому режиму, что определяет фототермическое разрушение облученных образцов с малой производительностью и неудовлетворительным качеством (рис. 6, б, и рис. 7, б).

### Заключение

Обобщая полученные результаты, можно сформулировать обобщенный критерий преобладания фотомеханического режима разрушения, используя связь  $G_{e-ph} \sim C_e t_{e-ph}$  [23] для оценки времени электрон-фононной релаксации, в выражении (1):

$$\max \{t_p, t_{e-ph}\} \approx t_{heating} \leq t_{mech} \approx \frac{L_{e-diff}}{C_s} \approx \frac{\sqrt{D_e t_{e-ph}}}{C_s} = \frac{\sqrt{t_{e-ph} K_e(Q)/C_e(Q)}}{C_s} \approx \frac{\sqrt{K_e(Q)/G_{e-ph}(Q)}}{C_s}, \quad (2)$$

где  $K_e$ ,  $G_{e-ph}$ , и  $C_e$  – электронная теплопроводность, постоянная электрон-фононного взаимодействия и электронная теплопроводность соответственно. Для каждой длительности импульса  $t_p$  все эти параметры зависят от электронной температуры и плотности поглощенной энергии  $Q$ . Для гарантии высокой производительности и качества обработки с участием абляции необходимо минимизировать левую часть неравенства путем простого сокращения длительности импульса и максимизировать правую часть неравенства путем увеличения глубины поглощенной энергии в зависимости от свойств материала, например, путем увеличения плотности поглощенной энергии для увеличения ее эффективной глубины проникновения в материал.

Предложенная теория хорошо объясняет экспериментальные данные, полученные в работах [6–8] (рис. 8). В рассмотренных экспериментах по абляции длительность импульса может быть меньше, больше и порядка характерного времени электрон-фононного взаимодействия в зависимости от свойств материала. Оба импульса длительностью 0,2 пс и 10 пс – короткие для золота, а скорость абляции  $V_{abl}$  более или менее линейна в зависимости от поглощенной энергии, что подтверждает фотомеханический характер разрушения за счет локализации возникших в области воздействия внутренних напряжений. Для алюминия импульс длительностью 10 пс – длинный. В этом случае не будут реализованы условия возникновения локализации внутренних напряжений даже при высоких плотностях энергии. Исходя из этого, механизм разрушения является фототермическим, тогда как при длительности импульса 0,2 пс он будет фотомеханическим. Наконец, никель с характерным временем электрон-фононного взаимодействия 10 пс – граничный случай, поэтому задействованы оба механизма разрушения. В зависимости от поглощенной плотности мощности будет реализован либо фотомеханический, либо фототермический механизм, либо их совокупность.

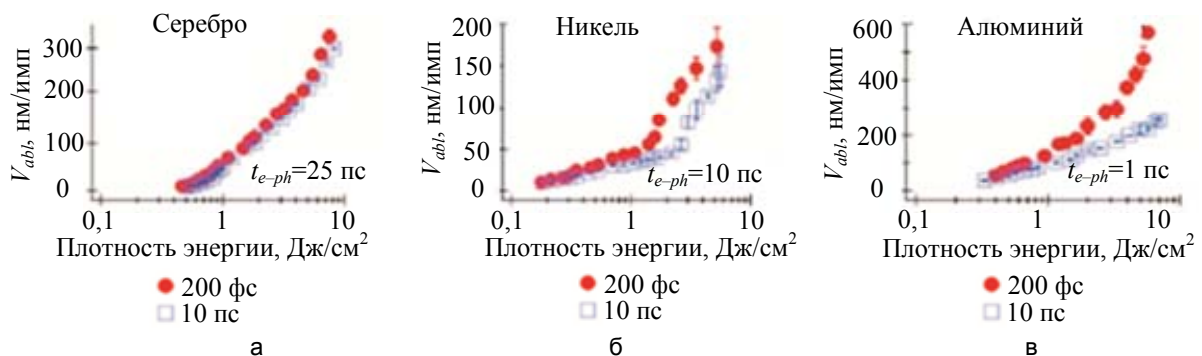


Рис. 8. Экспериментально измеренные скорости абляции серебра (а), никеля (б) и алюминия (в) в зависимости от поглощенной плотности энергии для длительности импульса 0,2 пс (круги) и 10 пс (квадраты) [7]

Полученная формула (2) также согласуется с теоретическими результатами [12], где моделирование диссипации поглощенной энергии лазерного импульса электрон-фононными столкновениями и теплопроводностью позволило рассмотреть оптимизацию длительности импульса для получения максимальной температуры на поверхности материала при лазерном облучении. Показано, что при малом коэффициенте электрон-фононного взаимодействия  $G_{e-ph}$  и большой электронной теплопроводности  $K_e$  глубина эффективного лазерного поглощения энергии больше, что, в свою очередь, может вызвать фотомеханическое разрушение.

Наконец, необходимо также отметить, что в зависимости от конкретных свойств материалов, полученные результаты при определении режимов абляции с помощью предложенной модели могут немного отличаться. Например, влияние шероховатости поверхности и степени кристалличности облучаемой мишени, рассмотренное в работе [13], может увеличить область режимов фотомеханического разрушения, в то время как оценки по более сложным моделям электронной теплопроводности [17] и электрон-фононного взаимодействия [16] могут дать ее уменьшение. В любом случае, основная идея настоящей работы заключается в том, что для длительности импульса, меньшей, чем характерное время установления электрон-фононного равновесия, как это описано с помощью уравнения (2), существует диапазон поглощенной плотности энергии, в котором при резком росте теплопроводности с температурой электронов можно запастись энергией лазерного излучения на глубине, достаточно большой для реализации условий возникновения локализации внутренних напряжений во время процесса абляции. Это способствует обработке с высокими скоростями удаления материала и одновременно с ее хорошим качеством в технологических применениях короткого лазерного импульса.

#### References

1. Mezzapesa F.P., Sibillano T., Columbo L.L., Di Niso F., Ancona A., Dabbicco M., De Lucia F., Lugarà P.M., Scamarcio G. Direct investigation of the ablation rate evolution during laser drilling of high aspect ratio micro-holes. *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, 2012, vol. 8243, art. 82430S. doi: 10.1117/12.905758
2. Lo Turco S., Nava G., Osellame R., Vishnubhatla K.C., Ramponi R. Femtosecond laser micromachining for optofluidic and energy applications. *Optical Materials*, 2013, vol. 36, no. 1, pp. 102–105. doi: 10.1016/j.optmat.2013.04.038
3. Rizvi N.H. Femtosecond laser micromachining: current status and applications. *Riken Review*, 2003, vol. 50, pp. 107–112.
4. Wellershoff S.-S., Hohlfeld J., Gudde J., Matthias E. The role of electron-phonon coupling in femtosecond laser damage of metals. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 1999, vol. 69, no. 7, pp. S99–S107. doi: 10.1007/s003399900305
5. Ivanov D.S., Zhigilei L.V. Combined atomistic-continuum modelling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 2003, vol. 68, no. 6, art. 064114, pp. 064114-1–064114-22.
6. Nolte S., Momma C., Jacobs H., Tunnemann A., Chichkov B.N., Wellegehausen B., Welling H. Ablation of metals by ultrashort laser pulses. *Journal of Optical Society of America B: Optical Physics*, 1997, vol. 14, no. 10, pp. 2716–2722.
7. Mannion P.T., Favre S., Ivanov D.S., O'Connor G.M., Glynn T.J. Experimental investigation of Micromachining on metals with pulse durations in the range of the electron-phonon relaxation time (pico to subpicosecond). *Proc. 3<sup>rd</sup> International WLT-Conference on Lasers Manufacturing*. Munich, 2005, pp. 521–526.
8. Momma C., Nolte S., Chichkov B.N., Alvensleben F.V., Tunnerbaum A. Precise laser ablation with ultrashort pulses. *Applied Surface Science*, 1997, vol. 109–110, pp. 15–19.
9. Toenshoff H.K., Ostendorf A., Nolte S., Korte F., Bauer T. Micromachining using femtosecond lasers. *Proceedings of SPIE – Laser Precision Manufacturing 2000 Conference*. Omiya, Japan, 2000, pp. 136–139.
10. Leveugle E., Ivanov D.S., Zhigilei L.V. Photomechanical spallation of molecular and metal targets: molecular dynamics study. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 2004, vol. 79, no. 7, pp. 1643–1655. doi: 10.1007/s00339-004-2682-2
11. Zhigilei L.V., Lin Z., Ivanov D.S. Atomistic modeling of short pulse laser ablation of metals: connections between melting, spallation, and phase explosion. *Journal of Physical Chemistry C*, 2009, vol. 113, no. 27, pp. 11892–11906. doi: 10.1021/jp902294m
12. Ivanov D.S., Rethfeld B.C. The effect of pulse duration on the interplay of electron heat conduction and electron-photon interaction: photo-mechanical versus photo-thermal damage of metal targets. *Applied Surface Science*, 2009, vol. 255, no. 24, pp. 9724–9728. doi: 10.1016/j.apsusc.2009.04.131
13. Ivanov D.S., Lipp V.P., Rethfeld B., Garcia M.E. Molecular-dynamics study of the mechanism of short-pulse laser ablation of singlecrystal and polycrystalline metallic targets. *Journal of Optical Technology*, 2014, vol. 81, no. 5, pp. 250–253. doi: 10.1364/JOT.81.000250
14. Zhigilei L.V., Ivanov D.S. Channels of energy redistribution in short-pulse laser interactions with metal targets. *Applied Surface Science*, 2005, vol. 248, no. 1–4, pp. 433–439. doi: 10.1016/j.apsusc.2005.03.062
15. Anisimov S.I., Rethfeld B. On the theory of ultrashort laser pulse interaction with a metal. *Proc. SPIE*, 1997, vol. 3093, pp. 192–203.
16. Lin Z., Zhigilei L.V., Celli V. Electron-phonon coupling and electron heat capacity of metals under conditions of strong electron-phonon nonequilibrium. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 2008, vol. 77, no. 7, art. 075133. doi: 10.1103/PhysRevB.77.075133



17. Povarnitsyn M.E., Andreev N.E., Apfelbaum E.M., Itina T.E., Khishchenko K.V., Kostenko O.F., Levashov P.R., Veysman M.E. A wide-range model for simulation of pump-probe experiments with metals. *Applied Surface Science*, 2012, vol. 258, no. 23, pp. 9480–9483. doi: 10.1016/j.apsusc.2011.07.017
18. Ivanov D.S., Kuznetsov A.I., Lipp V.P., Rethfeld B., Chichkov B.N., Garcia M.E., Schulz W. Short laser pulse nanostructuring of metals: direct comparison of molecular dynamics modeling and experiment. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 2013, vol. 111, pp. 675–687. doi: 10.1007/s00339-013-7656-9
19. Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials. *Applied Surface Science*, 2009, vol. 255, no. 24, pp. 9592–9596. doi: 10.1016/j.apsusc.2009.04.082
20. Wu C., Zhigilei L.V. Microscopic mechanism of laser spallation and ablation of metal targets from large-scale molecular dynamics simulations. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 2014, vol. 114, no. 1, pp. 11–32.
21. Schäfer C., Urbassek H.M., Zhigilei L.V., Garrison B.J. Pressure-transmitting boundary conditions for molecular dynamics simulations. *Computational Materials Science*, 2002, vol. 24, no. 4, pp. 421–429. doi: 10.1016/S0927-0256(01)00263-4
22. Zhigilei L.V., Ivanov D.S., Leveugle E., Sadigh B., Bringa E.M. Computer modeling of laser melting and spallation of metal targets. *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, 2004, vol. 5448, pp. 505–519. doi: 10.1117/12.548821
23. Anisimov S.I., Kapeliovich B.L., Perel'man T.L. Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses. *JETP*, 1974, vol. 39, no. 2, pp. 375–377.

- Иванов Дмитрий Сергеевич** – PhD, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, 197101, Санкт-Петербург, Россия; старший научный сотрудник, Технический Университет Кайзерслаутерн и исследовательский центр ОПТИМАС, 67653, Кайзерслаутерн, Германия; старший научный сотрудник, Университет Касселя, 34109, Кассель, Германия, Ivanov@uni-kassel.de
- Вейко Вадим Павлович** – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой, 197101, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, veiko@lastech.ifmo.ru
- Яковлев Евгений Борисович** – доктор технических наук, доцент, профессор, 197101, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, yak@lastech.ifmo.ru (ebyakovlev@yandex.ru)
- Ретфельд Барбель** – PhD, профессор, профессор, Технический Университет Кайзерслаутерн и исследовательский центр ОПТИМАС, 67653, Кайзерслаутерн, Германия, rethfeld@physik.uni-kassel.de
- Гарсия Мартин Эзекель** – PhD, профессор, Университет Кассель, 34109, Кассель, Германия, Garcia@physik.uni-kassel.de
- Dmitry S. Ivanov** – PhD, senior scientific researcher, ITMO University, 197101, Saint Petersburg, Russia; Technical University of Kaiserslautern and OPTIMAS Research Center, Germany, 67653, Kaiserslautern, Germany; Kassel University, 34109, Kassel, Germany, Ivanov@uni-kassel.de
- Vadim P. Veiko** – D.Sc., Professor, ITMO University, 197101, Saint Petersburg, Russia, veiko@lastech.ifmo.ru
- Evgeny B. Yakovlev** – D.Sc., Associate professor, Professor, ITMO University, 197101, Saint Petersburg, Russia, yak@lastech.ifmo.ru, ebyakovlev@yandex.ru
- Baerbel Rethfeld** – PhD, full professor, Technical University of Kaiserslautern and OPTIMAS Research Center, 67653, Kaiserslautern, Germany, rethfeld@physik.uni-kassel.de
- Martin E. Garcia** – PhD, Professor, University Kassel Germany, 34109, Kassel, Germany, Garcia@physik.uni-kassel.de

Принято к печати 19.06.14  
Accepted 19.06.14