08

Термоциклирование поверхности меди в доабляционном режиме при нагреве ультрафиолетовыми лазерными наносекундными импульсами

© В.Е. Рогалин[1], В.В. Жаховский[2], Н.А. Иногамов[2,3,4], Ю.Р. Колобов[5], С.С. Манохин[5], Т.В. Малинский[1], И.В. Неласов[5], Е.А. Перов[6], Ю.В. Петров[4], В.А. Хохлов[4], Ю.В. Хомич[1], А.Н. Долуденко[3]

[1] Институт электрофизики и электроэнергетики РАН,
Санкт-Петербург, Россия
[2] Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова,
Москва, Россия
[3] Объединенный институт высоких температур РАН,
Москва, Россия
[4] Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН,
Черноголовка, Россия
[5] Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН,
Черноголовка, Россия
[6] Институт автоматизации проектирования РАН,
Москва, РОссия

E-mail: v-rogalin@mail.ru

Поступила в Редакцию 30 апреля 2025 г.
В окончательной редакции 8 сентября 2025 г.
Принята к публикации 11 ноября 2025 г.

Экспериментально изучено формирование рельефа поверхности на меди после воздействия наносекундных лазерных импульсов при допороговой интенсивности, в конденсированном состоянии. В облученных зонах около границ зерен сформирована система микровыступов/впадин, имеющая деформационный характер. Молекулярно-динамическое моделирование показало, что анизотропия теплового расширения разноориентированных зерен при циклическом нагреве до предплавильной температуры — основная причина развития рельефа, так как возникающие в приповерхностном слое, термонапряжения, превышают предел текучести материала. Зарегистрировано накопление дефектов с ростом плотности энергии и числа импульсов. Результаты важны для понимания механизмов деградации металлооптики при термоциклическом импульсном нагружении.

Ключевые слова: полированная медь, наносекундный УФ лазер, оптикопластический эффект, границы зерен, пластическая деформация, молекулярно-динамическое моделирование.

DOI: 10.61011/FTT.2025.12.62429.7936k-25

1. Введение

Явление оптического пробоя на поверхности металлов при воздействии лазерного излучения давно изучено [1–3]. Оптический пробой и сопровождающееся появление лазерного кратера на поверхности материала обычно рассматривается как классический пороговый процесс. Для практического применения лазеров в технологии материалов этот подход вполне достаточен. Поэтому процессы, предшествующие пробою, происходящие при предплавильных температурах в металле, исследованы заметно слабее. Можно лишь упомянуть теоретические исследования Ф. Мирзоева, например работа [4]. К сожалению, целенаправленные экспериментальные работы этого направления пока отсутствуют. Иногда встречались разрозненные работы, не нашедшие теоретического объяснения, например [5–8].

В работах [9,10] была проведена серия экспериментальных исследований оптической стойкости медных зеркал к воздействию излучения импульсного CO_2 лазера (длительность импульса 1.7 ns) в вакууме. На их поверхности, обнаружены следы повреждения, позднее названные laser-induced periodic surface structures (LIPSS). В работе [11] проведен теоретический анализ этих результатов. По мнению В.С. Макина произошло „возбуждение и диссипация энергии поверхностной электромагнитной волны падающим излучением в системе вакуум−плазменный слой−металл“. Интерес к усталостным процессам в металлооптике обострился в связи с проблемами эксплуатации в ИТЕР зеркал из нержавеющей стали [12].

Однако в последние годы появилась серия работ [13–16], где экспериментально исследовались результаты лазерного воздействия на металлы, происходящие при предплавильных температурах и предшествующие пробою, то есть при максимально допустимых лучевых нагрузках. Изучались механизмы деградации полированной поверхности образцов меди толщиной 10 mm

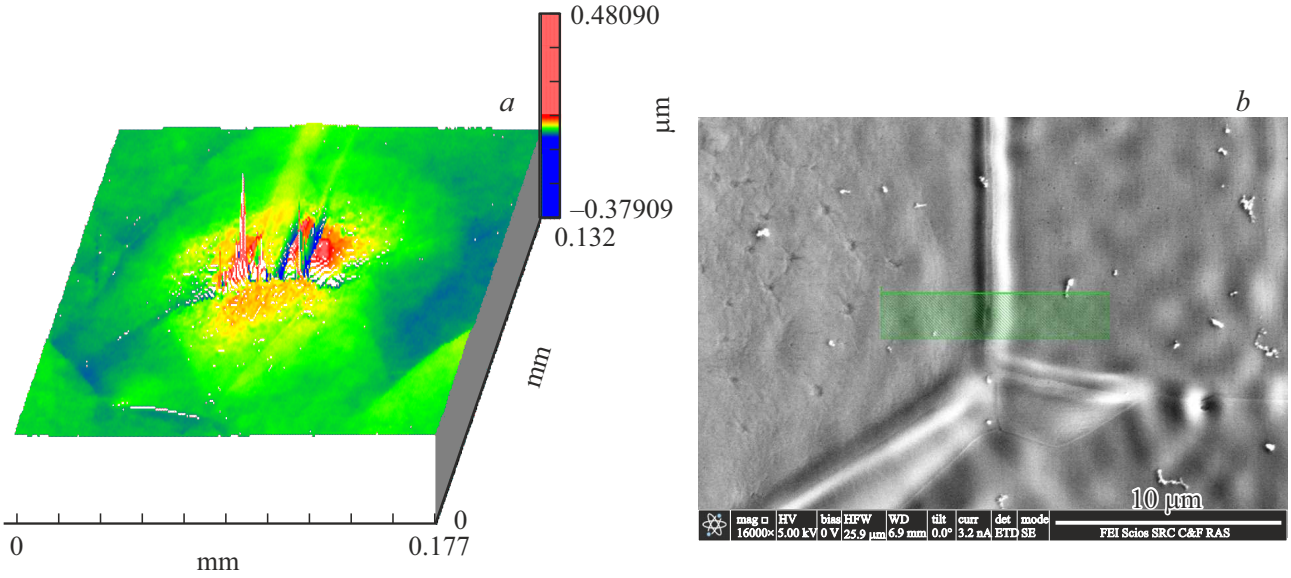

Рис. 1. *a* — 3D профилограмма лазерного пятна после воздействия 15 импульсов УФ лазера; на фото с РЭМ; *b* — отмеченное прямоугольником изображение области выреза ламелей.

при воздействии частотно-импульсного лазерного излучения (длина волны $\lambda = 355$ nm, длительность $\tau = 10$ ns, частота повторения 10 Hz) в доабляционном режиме. Установлено, что при воздействии излучения (плотность энергии порядка $W_p = 0.1-1.0\,\mathrm{J/cm^2}$) на полированной поверхности меди и ряда ее сплавов в области лазерного пятна возникает необратимый микровыступ на поверхности. Это происходит без изменения фазового состава материала, в конденсированном состоянии. Явление названо оптикопластическим эффектом. В данной работе проведено углубленное экспериментальное и теоретическое исследование этого процесса на полированных образцах бескислородной меди методами современного материаловедения.

2. Методика эксперимента

Благодаря использованию сочетания методов оптической профилометрии, конфокальной сканирующей лазерной и растровой электронной микроскопии (РЭМ), а также просвечивающей электронной микроскопии, выявлена природа создаваемой структуры. Первичное исследование поверхности материала производилось на оптическом профилометре Zygo NewView 7300. Дальнейшее изучение микроструктуры приповерхностного слоя производилось в тонких фольгах (ламелях) на просвечивающем электронном микроскопе (ТЕМ) Tecnai Osiris (ускоряющее напряжение 200 kV). Ламели, размером примерно $8\times7\,\mu$m, вырезались перпендикулярно к поверхности образца ионным утонением сфокусированным пучком. Процесс проводился в колонне растрового электронно-ионного микроскопа FEI Scios (ЦКП ФНИЦ „Кристаллография и фотоника“). Методика изготовления ламелей подробно описана в работе [17].

3. Результаты эксперимента и обсуждение

На рис. 1, *a* приведена 3D профилограмма лазерного пятна, возникшего на поверхности меди (размером $180\,\mu$m) после воздействия плоско поляризованного излучения 15 лазерных импульсов (длина волны 355 nm, длительность 10 ns, частота повторения 10 Hz, плотность энергии импульса $0.6\,\mathrm{J/cm^2}$; параметры лазера и методика воздействия соответствовали работам [13–16]).

На рис. 1, *b* показано место выреза ламелей из исследуемого образца. Детальный анализ микроструктуры ламелей, полученный с помощью просвечивающей электронной микроскопии (см. рис. 2), показал, что в локальных областях вблизи границ зерен формируется характерная система выступов и впадин. Разница высот достигает до 500 nm. При этом в тонком приповерхностном слое ($\sim 2\,\mu$m), прогреваемом за время импульса до предплавильной температуры, вблизи границ зерен обнаружены следы развития необратимой пластической деформации. Это наноразмерные двойниковые образования, дислокации и малоугловые дислокационные границы. За время между импульсами поверхность полностью остывает и происходит фиксация необратимых изменений. При росте числа импульсов, как и плотности их энергии, зафиксировано накопление дефектов.

Показанная на рис. 2 конфигурация возникших дефектных структур демонстрирует активную роль дислокационного механизма в процессе релаксации остаточных внутренних напряжений, возникающих на поверхности меди при импульсном лазерном термоциклировании в доплавильном режиме.

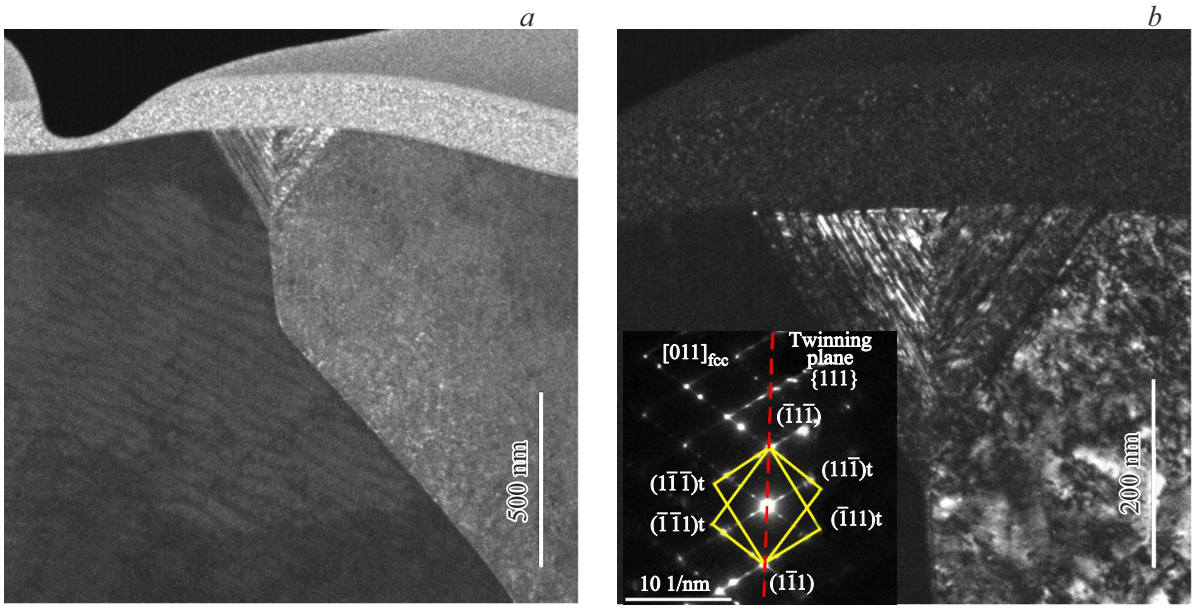

Рис. 2. Микроструктура образца в области с выступом: *a* — светлое поле; *b* — двойниковая структура вблизи выступа. Ориентация зерен в оси зоны [011] ГЦК и микродифракционная картина в данной области образца. Картина микродифракции включает как зерно матрицы, так и двойниковые пластины, толщиной несколько нанометров.

Был проведен расчет деформаций и напряжений в кубическом монокристалле, на примере меди, при его наносекундном нагреве на 1000 K с использованием линейной теории упругости. Показано, что для всех ориентаций кристалла возникающие напряжения превосходит статический предел текучести меди, не превышающий $Y \approx 0.5$ GPa, то есть пластические деформации должны неизбежно возникнуть при рассмотренных выше условиях эксперимента.

Более того, в рамках линейной теории упругости, проведенный анализ применим и при меньших перепадах температур. Так как диапазон рассчитанных напряжений примерно в 4 раза превышает предел текучести, то следует ожидать появления пластических деформаций уже при нагреве на 250 K. Однако при быстром нагреве меди лазерным импульсом длительностью 1–10 ns экспериментальный темп деформации оценивается как $\sim 10^6-10^7\,\mathrm{s}^{-1}$. В этом случае, динамический предел текучести, при темпах превышающих $10^5\,\mathrm{s}^{-1}$, становится существенно превышающим статическую величину [18,19].

4. Молекулярно-динамическое моделирование

Для наглядной иллюстрации пластической деформации поликристаллов при термоциклировании проведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование образцов меди, резко различающихся размерами: модельный бикристалл меди с ориентацией зерен, соответствующей экспериментальным данным, представленным на рис. 2, и поликристалл со случайной разориентацией зерен. Метод позволил оценить атомистические особенности деформации различных зерен меди при быстром нагреве/остывании и высоких скоростях деформации, что крайне затруднительно сделать аналитически.

Для первого МД моделирования использована элементарная ячейка кристалла меди, размером $64\times6.6\times26$ nm. Ось z ориентирована вдоль направления $\langle111\rangle$, ось y — вдоль направления $\langle211\rangle$ и ось x — вдоль направления $\langle011\rangle$. Центры формируемых зерен расположены в точках $0.5\times0.5\times0.25$ и $0.5\times0.5\times0.75$ (в единицах размера образца). Молекулярно-динамическое моделирование с использованием программы lammps [20] включало релаксацию атомов до минимума энергии, отжиг при 300 K и моделирование циклов нагрева-охлаждения, имитирующего воздействие лазерного импульса (1200 K, 1.4 ns), что привело к формированию деформационных двойников и перепада высот поверхности на 1 nm (рис. 3). Дополнительные циклы термоциклирования (300–1200 K) не усилили рельеф из-за малых размеров кристаллитов и ограниченного времени моделирования, несопоставимого с реальными экспериментами, где диффузия снимает напряжения за более длительные периоды.

Затем было проведено крупномасштабное МД моделирование (существенно большего масштаба). Увеличенный образец из 16 продольных вдоль оси z зерен с шестигранной ячеистой структурой и с размерами $L_z = 100.1$ nm по оси z, $L_y = 40.7$ nm по оси y и $L_x = 46$ nm по оси x, содержал до $2\cdot10^7$ атомов. Граничные условия по оси x и y были периодические,

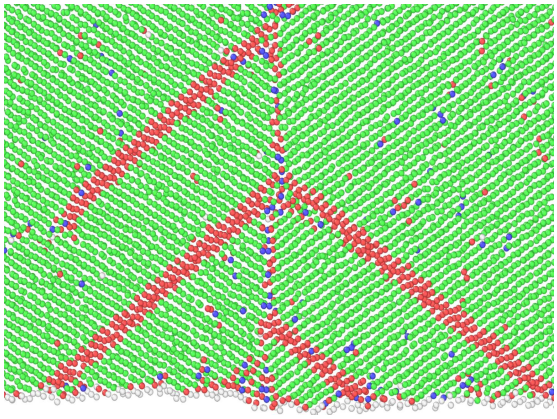

Рис. 3. Вырез приповерхностного слоя модельного образца меди, состоящего из двух зерен. Зеленым цветом обозначены атомы, имеющие локальное окружение как в ГЦК структуре, красным — ГПУ структуре (что соответствует атомам, принадлежащим деформационным двойникам), белым — атомы на поверхности образца. Анализ структуры проводился в программе OVITO [21]

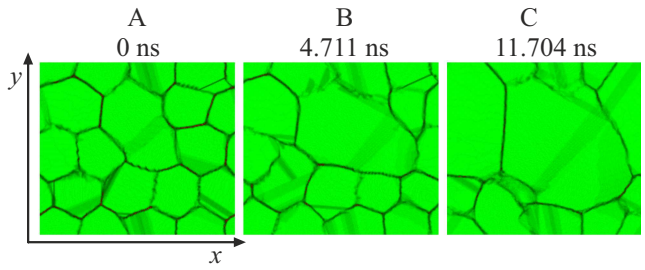

Рис. 4. Изменение первоначальной карандашной конфигурации зерен меди в результате воздействия 5-ти циклов нагрева лазерным импульсом до температуры $T \approx 1300$ K в течение примерно 1.2 ns и последующего естественного охлаждения до комнатной. A — в начале, B — после 3 цикла, C — после 5 цикла.

по оси z — свободные. Первоначально в одном зерне содержался примерно 1 миллион атомов. Ориентация кристаллических зерен была произвольной, как и взаимные ориентации соседних зерен. С целью лучшего согласия с экспериментальной температурой плавления и поверхностным натяжением (энергией) была разработана обновленная версия потенциала Жаховского [22].

Было смоделировано 5 импульсов, то есть образец 5 раз проходил цикл однородного нагрева до предплавильной температуры $T \approx 1300$ K за время примерно 1.2 ns с последующим остыванием до комнатной температуры (рис. 4).

Проведенное молекулярно-динамическое моделирование показало, что основным фактором появления и развития микровыступа на поверхности образца меди является анизотропия теплового расширения различно ориентированных зерен (кристаллитов) металла при циклическом нагреве до предплавильных температур и последующего охлаждения до исходного состояния. Теоретический анализ показал, что термомеханические напряжения, возникающие в нагретом слое, превышают предел текучести материала.

5. Заключение

Циклические импульсные термомеханические нагрузки часто встречаются в различных областях промышленности. Понимание особенностей этих процессов крайне важно, как для фундаментальной науки, так для практического использования. Полученные результаты прояснили процессы, происходящие в металле вблизи температуры плавления. Они позволят углубить фундаментальное понимание физических особенностей деградации структуры металлов при усталостных процессах, возникающих при экстремальных термоциклических нагрузках. В частности, эти результаты могут быть использованы, при разработке методов повышения эксплуатационной стойкости металлооптики.

Финансирование работы

В части осуществления экспериментальных работ по лазерному воздействию и профилометрии образцов работа выполнена в рамках гранта РНФ № 24-19-00727 (Т.В.М., Ю.В.Х., В.Е.Р.). В части исследования тонкой структуры приповерхностного слоя меди методами просвечивающей электронной микроскопии и компьютерного моделирования бикристалла меди работа выполнена по теме государственного задания FFSG-2024-0018, № государственной регистрации 124020700089-3 (Ю.Р.К., И.В.Н., С.С.М.). В части математического моделирования работа выполнена по теме государственного задания ИТФ (Н.А.И., Ю.А.Х., Ю.В.П.): FFWR-2024-0013 № государственной регистрации 124041900014-8. В части молекулярно-динамического моделирования терморегулирования поликристаллического образца меди работа выполнена по теме государственного задания ОИВТ № 075-00269-25-00 (Е.А.П.).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] С.И. Анисимов, Я.А. Имас, Г.С. Романов, Ю.В. Ходыко. Действие излучения большой мощности на металлы. Наука, Москва (1970).
[2] А.М. Прохоров, В.И. Конов, И. Урсу, И. Михэйлеску. Взаимодействие лазерного излучения с металлами. Наука, М. (1988).
[3] В.П. Вейко, М.Н. Либенсон, Г.Г. Червяков, Е.Б. Яковлев. Взаимодействие лазерного излучения с веществом (силовая оптика). Физматлит, М. (2008).
[4] Ф. Мирзоев. ЖТФ **72**, 53 (2002).

[5] С.В. Васильев, А.Ю. Иванов, В.А. Лиопо. ИФЖ **80**, 12 (2007).
[6] K. Vegel, P.J. Beckland. Appl. Phys. **36**, 3697 (1965).
[7] Л.Н. Лариков, В.Ф. Мазанко, В.М. Фальченко. ФХОМ **6**, 144 (1983).
[8] Р.Е. Ровинский, В.Е. Рогалин, В.М. Розенберг, М.Д. Теплицкий. ФХОМ **3**, 7 (1980).
[9] J.F. Figueira, S.J. Thomas. IEEE J. Quantum. Electron. **QE-18**, *9*, 1381–1386 (1982).
[10] J.F. Figueira, S.J. Thomas. In Springer Series in Chemical Physics. V. 33. Surface studies with lasers. Ed. by J.R. Aussenegg, A. Leithner, M.E. Lippitsch. Springer–Verlag, Berlin (1983). PP. 212–215.
[11] В.С. Макин. Оптический журнал **79**, *4*, 3–8 (2012). [V.S. Makin. J. Opt. Technol. **79**, *4*, 198–201 (2012).].
[12] M. Wisse, L. Marot, B. Eren, R. Steiner, D. Mathys, E. Meyer. Fusion Eng. Des. **88**, *5*, 388–399 (2013).
[13] Т.В. Малинский, С.И. Миколуцкий, В.Е. Рогалин, Ю.В. Хомич, В.А. Ямщиков, И.А. Каплунов, А.И. Иванова. ПЖТФ **46**, *16*, 51 (2020).
[14] Т.В. Малинский, В.Е. Рогалин. ЖТФ **92**, *2*, 268 (2022).
[15] Т.В. Малинский, В.Е. Рогалин, В.А. Ямщиков. ФММ **123**, *2*, 192 (2022).
[16] Y.V. Khomich, T. Malinskiy, V. Rogalin, V.A. Yamshchikov, I.A. Kaplunov. Acta Astronaut. **194**, 434 (2022).
[17] V. Zhakhovsky, Yu. Kolobov, S. Ashitkov, N. Inogamov, I. Nelasov, S. Manokhin, V. Khokhlov, D. Ilnitsky, Yu. Petrov, A. Ovchinnikov, O. Chefonov, D. Sitnikov. Phys. Fluids **35**, 096104 (2023).
[18] R.J. Clifton. Appl. Mech. Rev. **43**, *5S*, S9 (1990).
[19] M.A. Meyers, D.J. Benson, O. Vohringer, B.K. Kad, Q. Xue, H.H. Fu. Mater. Sci. Eng. A, **322**, *1–2*, 194=216 (2002).
[20] P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D.S. Bolintineanu, W.M. Brown, P.S. Crozier, P.J. in't Veld, A. Kohlmeyer, S.G. Moore, Dac Nguyen, R. Shan, M.J. Stevens, J. Tranchida, S.J. Plimpton. Comp. Phys. Comm. **271**, 108171 (2022).
[21] A. Stukowski. Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 015012 (2009).
[22] R. Perriot, V. Zhakhovsky, N. Inogamov, I. Oleynik. J. Phys.: Conf. Ser. **500**, 172008 (2014). EAM potential for Cu is available via https://doi.org/10.13140/RG.2.2.30152.02562

Редактор А.Н. Смирнов