

*На правах рукописи*

**ГАВАШЕЛИ ДАВИД ШОТАЕВИЧ**

**ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В ДИЭЛЕКТРИКАХ  
С ФРАКТАЛЬНОЙ СТРУКТУРОЙ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ  
ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ**

01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

НАЛЬЧИК  
2012

Работа выполнена на кафедре теоретической физики ФГБОУ ВПО «Кабардино-Балкарский государственный университет имени Х.М. Бербекова»

**Научный руководитель:** доктор физико-математических наук  
**Рехвиашвили Серго Шотович**

**Официальные оппоненты:** **Ашхотов Олег Газизович**, доктор физико-математических наук, профессор, Кабардино-Балкарский государственный университет имени Х.М. Бербекова, профессор кафедры компьютерных технологий и интегральных микросхем

**Хищенко Константин Владимирович**, кандидат физико-математических наук, Объединенный институт высоких температур РАН, заведующий отделом уравнений состояния

**Ведущая организация:** ФГБУН «Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук», г. Пермь

Защита состоится «30» января 2013 года в 13 час. на заседании диссертационного совета Д.212.076.02 при Кабардино-Балкарском государственном университете им. Х.М. Бербекова по адресу: 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке КБГУ по адресу: 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173, КБГУ, корпус 1.

Автореферат разослан «28» декабря 2012 года.

**Ученый секретарь  
диссертационного совета**



**А.А. Ахкубеков**

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность исследования.** В последнее время наблюдается повышение интереса к фрактальным твердотельным структурам. Такие структуры, сформированные, как правило, в сильно неравновесных условиях, имеют уникальные свойства, которые невозможно получить при традиционных способах формирования вещества.

Применение фрактального подхода для описания структурных неоднородностей нано- и микромасштаба, а также обоснование общих закономерностей, определяющих взаимосвязь структуры и свойств, является одним из современных научных направлений физики.

Изучению физико-химических свойств фрактальных кластеров посвящено большое количество экспериментальных и теоретических работ. Можно считать, что фрактальные кластеры, которые часто представляют собой нанобъекты размерами менее 100 нм, глобулы, молекулярные клубки и т.п., являются структурообразующими элементами полимеров, керамик, углеродных композитов и большого количества природных неорганических веществ. Вещество с фрактальной структурой формируется из отдельных кластеров и имеет самоподобную структуру, по крайней мере, в 2–3 пространственных масштабах. Такие твердотельные фрактальные структуры, образующиеся в результате процессов самоорганизации нанокластеров в открытых диссипативных системах, являются, по существу, новым типом вещества в конденсированном состоянии. В термодинамически неравновесных условиях атомы и молекулы группируются в частицы или кластеры нанометрового размера, из которых в дальнейшем формируются фрактальные агрегаты, характерной особенностью которых являются структурная иерархия, самоподобие, масштабная инвариантность, низкие значения плотности и пористость. Такая специфика строения позволяет, в известной мере, распространить расчеты физико-химических свойств отдельных кластеров на описание свойств макроскопического вещества с фрактальной структурой в целом.

Несмотря на проведенные в этой области исследования, исчерпывающая теория теплофизических свойств диэлектрических материалов с фрактальной структурой до сих пор не построена.

Такие материалы имеют перспективы применения в электронике, медицине и энергетике, поэтому дальнейшее развитие теории в этом направлении является актуальной задачей.

**Цель и задачи исследования.** Целью работы является теоретическое исследование теплофизических свойств диэлектрических материалов с фрактальной структурой при воздействии на них когерентного лазерного излучения в рамках единого системного подхода. Цель работы достигается решением следующих *основных задач*:

- 1) установить закономерности теплового излучения фрактального кластера с использованием диэлектрической функции Гавриилака – Негами;
- 2) определить особенности поведения коэффициента теплопроводности и изохорной теплоемкости диэлектрического вещества с фрактальной структурой с применением фрактального обобщения теории Дебая;
- 3) установить закономерности процесса лазерного нагрева диэлектрических вещества с фрактальной структурой с помощью нелинейного уравнения теплопроводности.

**Научные результаты, выносимые на защиту:**

1. При высоких температурах интенсивность теплового излучения является степенной функцией температуры, которая характерна для фрактальных систем.
2. В зависимости от времени диэлектрической релаксации интенсивность теплового излучения может достигать значительной величины, сравнимой с излучением абсолютно черного тела.
3. При низких температурах для коэффициента теплопроводности имеет место степенная зависимость  $\kappa \sim T^D$ . При высоких температурах коэффициент теплопроводности либо не зависит от температуры, либо уменьшается по закону  $\kappa \sim T^{-1}$  из-за уменьшения времени свободного пробега фононов.
4. Зависимость критической интенсивности от длительности импульса лазерного излучения в рамках теплового механизма разрушения вещества с фрактальной структурой объясняется не стационарностью процесса нагрева.

**Научная новизна результатов исследования:**

1. Получено новое выражение для интенсивности теплового излучения диэлектрического фрактального кластера с учетом частотной дисперсии диэлектрической функции. Показано, что при высоких температурах зависимость интенсивности излучения фрактального кластера от температуры дается степенной зависимостью с нецелым показателем.
2. Получено новое выражение для коэффициента теплопроводности диэлектрического вещества с фрактальной структурой. Показано, что температурные зависимости изохорной теплоемкости и коэффициента теплопроводности определяются одной и той же универсальной функцией, которая зависит от спектральной фрактальной размерности.

3. Установлено новое нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных для моделирования процесса нагрева вещества с фрактальной структурой. Проведено численное моделирование импульсного лазерного нагрева вещества и установлено влияние на процесс различных физических параметров.

4. Получены новые аналитические выражения для расчета критической интенсивности лазерного излучения, при которой происходит разрушение вещества с фрактальной структурой, в зависимости от длительности импульса.

#### **Теоретическая и практическая значимость работы**

1. Работа представляет интерес для специалистов, занимающихся теоретическими и экспериментальными исследованиями свойств фрактальных диэлектрических материалов, а также для специалистов по физике взаимодействия лазерного излучения с веществом.

2. Выполнено прогнозирование свойств диэлектрических материалов с заданной фрактальной структурой для оптимального синтеза новых конструкционных и функциональных систем, со сложной структурой, которые не являются ни кристаллами, ни аморфными телами в классическом понимании.

3. Определены характеристики вещества с фрактальной структурой в условиях лазерного воздействия, которые могут быть использованы для установления критических параметров ведущих к разрушению.

4. Научные результаты используются в учебном процессе.

**Соответствие диссертации Паспорту научной специальности.** Отраженные в диссертации научные положения соответствуют области исследования 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника, определяющей разработку фундаментальных, теоретических и экспериментальных исследований молекулярных и макросвойств веществ в твердом, жидком и газообразном состоянии для более глубокого понимания явлений, протекающих при тепловых процессах и агрегатных изменениях в физических системах. Полученные научные результаты соответствуют пунктам 1 и 2 Паспорта специальности 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника.

**Личный вклад автора.** Цель и задачи диссертации были сформулированы и поставлены научным руководителем, который принимал участие в обсуждении результатов работы. Некоторые формулы получены совместно с научным руководителем. Основные численные и аналитические расчеты, научные положения и научные выводы сделаны самостоятельно диссертантом.

**Апробация и реализация результатов исследования.** Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на сле-

дующих симпозиумах и конференциях: II Международная конференция «Деформация и разрушение материалов» (г. Москва, 2008 г.), 10-й Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» (г. Сочи, Лоо, 2008 г.); Международный Российско-Азербайджанский симпозиум «Уравнения смешанного типа и родственные проблемы анализа и информатики» (г. Нальчик, п. Эльбрус, 2008 г.); V Международный симпозиум «Фракталы и прикладная синергетика в нанотехнологиях» (г. Москва, 2008 г.); Региональная научно-методическая конференция «Нанотехнологии и наноматериалы-2009» (Нальчик, 2009 г.); XXIV Международная конференция «Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество» (п. Эльбрус, 2009 г.), XXV Международная конференция «Уравнения состояния вещества» (п. Эльбрус, 2010 г.); IV Международная конференция «Деформация и разрушение материалов» (г. Москва, 2011 г.), XXVI Международная конференция «Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество» (г. Нальчик, п. Эльбрус, 2011 г.); II Международный Российско-Казахский симпозиум «Уравнения смешанного типа, родственные проблемы анализа и информатики» (г. Нальчик, 2011 г.), XXVII Международная конференция «Уравнения состояния вещества» (п. Эльбрус, 2012 г.); а также на заседаниях научно-исследовательского семинара по современному анализу, информатике и физике НИИ ПМА КБНЦ РАН (2007–2012 гг.).

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 18 работ, в том числе 4 статьи в ведущих рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки России, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертации на соискание ученой степени кандидата и доктора наук, и 1 зарубежная публикация.

**Структура диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, основных выводов и библиографического списка. Библиографический список содержит 169 наименований.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации, формулируется цель работы, отмечается научная новизна и практическая значимость полученных в работе результатов, приводятся основные положения, выносимые на защиту.

В главе 1 приведен литературный обзор экспериментальных и теоретических работ по диссертационной теме, а также результаты численного моделирования теплофизических свойств материалов с фрактальной структурой. Рассмотрены методы получения фрактальных объектов с заданной фрактальной размерностью.

Определены основные теоретические и экспериментальные подходы к исследованию особенностей поглощения и излучения диэлектрических фрактальных структур, находящихся в поле электромагнитного излучения.

Для описания излучательных процессов с участием фрактального кластера допустимы некоторые приближения. Предполагается, что для оптической и инфракрасной области спектра и рассматриваемых размеров частиц выполняется условие малости размера кластера и соответственно, частиц, из которых он сформирован, по сравнению с длиной волны излучения  $\lambda$  :

$$\lambda \gg r_0, R, \quad (1)$$

где  $r_0$  – характерный размер частиц,  $R$  – характерный размер кластера.

Рассмотрено определение фрактальной размерности  $D$  для фрактального кластера, под которой понимается показатель степени в формуле, связывающей число частиц в кластере  $N$  с его линейным размером  $R$  :

$$N = k_0 \left( \frac{R}{r_0} \right)^D, \quad (2)$$

где коэффициент  $k_0$  называют префактором;  $r_0$  – размер первичных частиц.

Рассмотрены фазовые переходы в кластерах, происходящие в поле излучения электромагнитной волны. Под действием лазерного излучения умеренной интенсивности в кластере могут реализоваться в основном два типа возбуждений: конфигурационное, обусловленное изменением конфигурации атомов, и тепловое за счет колебаний атомов. В противоположность металлическим кластерам, для которых жидкое состояние при фазовом переходе включает в себя большое число конфигурационных состояний, зависящих от температуры, конфигурация атомов диэлектрических кластеров в жидком агрегатном состоянии мало изменяется при нагревании и более существенную роль играют колебательные (тепловые) степени свободы [1].

Обсуждены понятия и положения, играющие ключевую роль во многих физико-химических процессах с участием кластеров, таких как кластерная температура, критерий Линдемана и другие критерии плавления.

Проанализированы особенности взаимодействия лазерного излучения с веществом, обладающим фрактальной структурой, на примере полимеров. Отмечено, что при различной энергии, интенсивности и длительности импульса лазерного излучения в веществе начинают развиваться различные термофизические процессы, отличающиеся многостадийностью.

Анализ научных данных позволяет сделать выводы:

- недостаточно изучено взаимодействие излучения с фрактальными кластерами;
- недостаточно исследованы теплофизические явления, происходящие в веществе с фрактальной структурой.

**Глава 2** диссертации посвящена детальному рассмотрению излучательных процессов с участием фрактального кластера при воздействии лазерного излучения умеренной длительности.

Предложена полуфеноменологическая модель излучения диэлектрического фрактального кластера при воздействии на него лазерного пучка. Фрактальность учитывается при оценке объема кластера; сечение поглощения фотонов рассчитывается с использованием диэлектрической функции Гаврилияка – Негами, которая имеет место для диэлектрических материалов с фрактальной структурой (в частности, полимеров). В рамках рассмотренной модели находят объяснение некоторые известные факты.

Разрабатывается теоретическая модель излучения фрактальных структур. Теория базируется на вычислении мощности теплового излучения отдельного малого кластера в длинноволновом случае. Предполагается, что интенсивность падающего излучения намного ниже порога оптической прочности кластера и, помимо этого, выполняется условие (1). На основе закона Кирхгофа для интенсивности излучения получено общее выражение:

$$I = \frac{\hbar V}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \frac{\omega^4 \operatorname{Im} \varepsilon d\omega}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}, \quad (3)$$

где  $k_B$  и  $\hbar$  – постоянные Больцмана и Планка,  $c$  – скорость света в вакууме,  $\omega = 2\pi c/\lambda$  – частота излучения,  $\operatorname{Im} \varepsilon$  – мнимая составляющая диэлектрической функции, которая характеризует поглощение излучения,  $T$  – абсолютная температура.



Для описания комплексной диэлектрической проницаемости в материалах с фрактальной структурой принято использовать формулы Коула–Коула, Коула – Дэвидсона и Гаврилияка – Негами, адекватность которых неоднократно подтверждалась опытами по диэлектрической и емкостной спектроскопии, ядерному магнитному резонансу и рассеянию нейтронов. Наиболее общий вид имеет комплексная диэлектрическая функция Гаврилияка – Негами:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{(1 + (i\omega\tau)^a)^b}, \quad (4)$$

$$0 < a, b \leq 1,$$

где  $a$  и  $b$  – полуэмпирические параметры, учитывающие структуру фрактального кластера,  $\tau$  – время релаксации,  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  – высокочастотная и низкочастотная диэлектрические проницаемости ( $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$ ). Выражение (4) описывает в качестве частых случаев процессы диэлектрической релаксации Дебая при  $a = b = 1$ , Коула–Коула при  $b = 1$  и Коула – Дэвидсона при  $a = 1$ . Из (3) и (4) получена формула, описывающая излучение фрактального кластера:

$$I = \frac{\hbar(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)V}{\pi^2 c^3 \tau^5} \Phi(y), \quad (5)$$

$$\Phi(y) = y^5 \int_0^\infty \frac{\sin\left(b \arctg\left(\frac{(yx)^a \sin(\pi a/2)}{1 + (yx)^a \cos(\pi a/2)}\right)\right) x^4 dx}{(\exp(x) - 1) \left(1 + 2(yx)^a \cos(\pi a/2) + (yx)^{2a}\right)^{b/2}},$$

где  $y = k_B T / \hbar \omega_0$  – безразмерный параметр, характеризующий температуру и свойства излучения,  $\omega_0 = 1/\tau$  – частота пика диэлектрических потерь. Безразмерная функция  $\Phi(y)$  в (5) определяет температурную зависимость излучения фрактального кластера в широком температурном диапазоне.

На рис. 1а, б показаны графики функции  $\Phi(y)$ , построенные с помощью численного интегрирования, при различных значениях параметров  $a$  и  $b$ . Обращает на себя внимание неординарный ход кривых при  $y > 1$ . Предполагается, что это связано с тем, что параметры  $a$  и  $b$  учитывают коллективное взаимодействие частиц в фрактального кластера, а диэлектрическая релакса-

ция в фрактальном кластере вызвана вращением, конформационными изменениями и локальными колебаниями элементов кластера в различных пространственных масштабах.

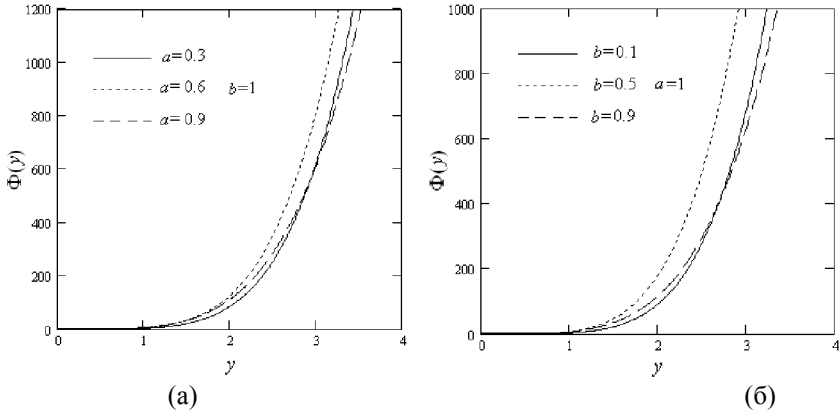


Рис. 1. Графики функции, которая определяет температурную зависимость интенсивности излучения фрактального кластера:

а) параметр  $b = 1$ ; б) параметр  $a = 1$

Если параметры  $a$  и  $b$  близки к единице и при высоких температурах выполняется условие  $y \gg 1$ , то интеграл в (5) может быть выражен через известные функции

$$\Phi(y) = y^m \sin(\pi ab/2) \Gamma(m) \zeta(m), \quad (6)$$

где  $\Gamma(m)$  – гамма-функция Эйлера,  $\zeta(m)$  – дзета-функция Римана,  $m = 5 - ab$ . Тогда для интенсивности излучения фрактального кластера можно написать

$$I = \frac{\hbar(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \sin(\pi ab/2) \Gamma(m) \zeta(m) V}{\pi^2 c^3 \tau^5} \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \right)^m. \quad (7)$$

Таким образом, при высоких температурах интенсивность излучения фрактального кластера становится степенной функцией температуры с нецелым показателем  $I \sim T^m$ , что свойственно для фракталов. При дебаевской релаксации  $a = b = 1$ , поэтому из (7) имеем

$$I = \frac{\pi^2 (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) V k_B^4 T^4}{15 c^3 \hbar^3 \tau} = \frac{4(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) V}{c \tau} \sigma T^4, \quad (8)$$

где  $\sigma$  – постоянная Стефана – Больцмана. Из (7) и (8) видно, что интенсивность излучения фрактального кластера увеличивается с уменьшением времени диэлектрической релаксации.

Анализ показал, что учет частотной дисперсии диэлектрической проницаемости при расчете интенсивности излучения фрактального кластера оказывает весьма существенное влияние. Так, при высоких температурах ( $y \gg 1$ ) при переходе от частотно независимой диэлектрической проницаемости к комплексной диэлектрической проницаемости, описываемой функцией Гаврилиака-Негами, показатель степени в температурной зависимости интенсивности излучения, как показывают (7) и (8), меняется от 5 до 4.

В главе 3 диссертации рассмотрено приложение модели Дебая для расчета теплоемкости и теплопроводности твердых тел, имеющих фрактальную структуру.

Квантово-статистическим методом выводится выражение для коэффициента теплопроводности диэлектрического вещества с фрактальной структурой, которое сравнивается с ранее полученным выражением для изохорной теплоемкости. В рассматриваемой модели фрактальная размерность  $D$  выступает в качестве параметра, который определяет степень заполнения твердого тела газом фононов

$$D = \frac{\ln(N/A)}{\ln(1/\lambda)} = \frac{\ln(N/B)}{\ln(\omega)}, \quad (9)$$

где  $N$  – число фононов,  $A$  и  $B$  – некоторые постоянные, зависящие от физических свойств твердого тела,  $\lambda$  и  $\omega$  – длина волны и частота фононов. Данную фрактальную размерность, а также соответствующую ей фоновую структуру твердого тела, логично называть спектральной. С учетом определения (9) получено выражение для плотности состояний фононов

$$g(\omega) = \frac{2D}{\Gamma(D/2)} \left( \frac{L}{2\sqrt{\pi}c_s} \right)^D \omega^{D-1}. \quad (10)$$

где  $L$  – линейный размер образца,  $c_s$  – скорость звука. Параметр  $D$  (фрактальная размерность) в (10) учитывает поляризацию фононов: при  $D = 3$  имеется одна продольная и две поперечные поляризации, при  $D = 2$  имеется одна продольная и одна поперечная поляризация, при  $D = 1$  имеется одна продольная поляризация. Из условий нормировки определена характеристическая частота

$$\omega_0 = \frac{2\sqrt{\pi}c_s}{V^{1/3}} \left( N_A \Gamma\left(\frac{D}{2} + 1\right) \right)^{1/D}, \quad (11)$$

где  $N_A$  – постоянная Авогадро,  $V = L^3$  – молярный объем.

Коэффициент теплопроводности вычислялся в квантово-статистическом приближении

$$\kappa = \frac{\hbar c_s^2 \tau \omega_0}{3V} \int_0^\infty g(\omega) \left( \frac{\partial N}{\partial T} \right) \omega d\omega, \quad (12)$$

где  $\tau = const$  – время свободного пробега фононов. Используя распределение Бозе – Эйнштейна и выражение (10), из (12) получаем

$$\kappa = \frac{D^2 c_s^2 \tau k_B n_V}{3} \left( \frac{T}{\theta} \right)^{D \theta/T} \int_0^\infty \frac{x^{D+1} \exp(x) dx}{(\exp(x) - 1)^2}, \quad (13)$$

где  $n_V = N_A/V$  – объемная концентрация атомов,  $\theta = \hbar \omega_0 / k_B$  – температура Дебая. Ранее в рамках фрактального обобщения модели Дебая выведено следующее выражение для изохорной теплоемкости [2]

$$C_V = D^2 k_B N_A \left( \frac{T}{\theta} \right)^{D \theta/T} \int_0^\infty \frac{x^{D+1} \exp(x) dx}{(\exp(x) - 1)^2}. \quad (14)$$

Сравнивая выражения (13) и (14), приходим к известному из кинетической теории газов выражению

$$\kappa = \frac{1}{3} c_s^2 \tau C_V^0, \quad (15)$$

где  $C_V^0 = C_V/V$  – удельная изохорная теплоемкость.

Следовательно, при  $\tau = const$  фрактальное обобщение выражения для коэффициента теплопроводности не меняет его вида, соответствующего кинетической теории (выражение (15)). Изохорная теплоемкость и коэффициент теплопроводности вещества с фрактальной структурой зависят от одной и тоже универсальной функции

$$G(y) = D^2 y^D \int_0^{1/y} \frac{x^{D+1} \exp(x) dx}{(\exp(x) - 1)^2}, \quad (16)$$

график, которой показан на рис. 2.

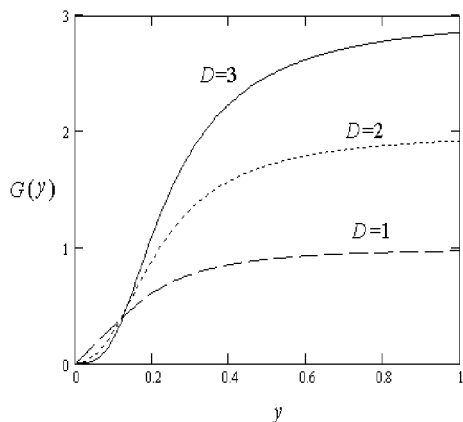


Рис. 2. График функции, которая определяет температурную зависимость коэффициента теплопроводности и изохорной теплоемкости при различных значениях фрактальной размерности  $D$

В области очень низких температур ( $T \ll \theta$ ) можно считать, что время свободного пробега фононов  $\tau$  не зависит от температуры, поэтому имеет место зависимость  $\kappa \sim T^D$ , которая определяется температурной зависимостью изохорной теплоемкости. В области низких температур ( $T < 0.1\theta$ ) теплоемкость вещества с фрактальной структурой практически не зависит от температуры и  $\kappa \sim T^{-1}$ , что связано с температурной зависимостью времени свободного пробега фононов. Численные расчеты функции  $G(y)$ , представленные на рис. 2, показывают, что коэффициент теплопроводности твердого тела при низких температурах ( $T < 0.1\theta$ ) может увеличиваться с уменьшением фрактальной размерности. Это объясняется тем, что в низкоразмерных системах атомы связаны между собой слабо и, тем самым, более «охотно» совершают тепловые колебания. При высоких температурах ( $T > 0.1\theta$ ) увеличение размерности приводит к увеличению коэффициента теплопроводности за счет превалирующего вклада степеней свободы.

В главе 4 диссертации рассматривается процесс нагрева вещества с фрактальной структурой электромагнитной волной, и проводится моделирование этого нагрева.

Получено нелинейное дифференциальное уравнение, которое описывает нагрев твердого диэлектрика с фрактальной структурой под действием лазерного излучения конечной длительности. Известные из литературы уравнения могут рассматриваться как частные случаи этого уравнения.

При нагреве вещества лазерным излучением часть поглощенной энергии может расходоваться на тепловое излучение. Вещество с фрактальной структурой будет остывать за счет радиационных потерь энергии.

С учетом выражений (7), (13), (14) и (16), а также закона Бугера – Ламберта – Бера, одномерное уравнение теплопроводности для вещества с фрактальной структурой принимает вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\alpha \exp(-\beta z) \Phi(t_0 - t) - \gamma u^m + 1}{G(u)}, \quad (17)$$

где  $u = u(z, t)$  – безразмерная (отнесенная к температуре Дебая) температура,  $t$  и  $z$  – безразмерные время и координата,  $\Phi(t_0 - t)$  – функция Хевисайда, моделирующая лазерный импульс длительностью  $t_0$ . Безразмерные параметры в уравнении (17) равны

$$\alpha = \frac{I_L(1-R)}{I_0}, \beta = \sqrt{\frac{\delta c_s^2 \tau_p k_B \theta n_V \Omega}{3I_0}}, \gamma = (\theta/T_0)^m, \quad m = 5 - ab,$$

где  $\delta$  и  $R$  – коэффициенты поглощения и отражения лазерного излучения,  $\Omega$  – эффективная поверхность вещества с фрактальной структурой,  $I_L$  – интенсивность лазерного пучка,  $I_0$  – интенсивность теплового излучения, вычисляемая по формуле (7) при температуре окружающей среды  $T_0$ . Время и координата в уравнении (17) отнесены соответственно к следующим размерным константам

$$\frac{\rho k_B \theta N_A \Omega}{\delta I_0 M_A} \quad \text{и} \quad \beta/\delta.$$

При записи уравнения (17) предполагалось также, что в результате нагрева объем вещества с фрактальной структурой меняется незначительно, поэтому  $C_V \approx C_p$ , где  $C_p$  – изобарная теплоемкость. Кроме того, в целях упрощения расчетов из уравнения (17) исключено слагаемое, содержащее  $(\partial u / \partial z)^2$ . С физической точки зрения это оправдано при высоких температурах; согласно полученным выше результатам, коэффициент теплопроводности  $\kappa$  при высоких температурах меняется слабо, поэтому производная  $\kappa'_u \rightarrow 0$ .

При моделировании предполагалось, что на концах облучаемого образца поддерживается одна и та же температура, равная температуре окружающей среды

$$u(z, 0) = u(0, t) = u(l, t) = u_0, \quad t \in [0, t_c], \quad z \in [0, l], \quad (18)$$

где  $u_0$  и  $l$  – задают температуру окружающей среды и линейный размер образца,  $t_c$  – время, до которого осуществляется счет. Рассматривались отдельно два случая:  $t_c \leq t_0$  и  $t_c > t_0$ .

Нелинейное уравнение (17) вместе с условиями (18) не может быть решено в аналитическом виде. Поэтому в диссертации рассматривался один частный случай, в котором предполагается, что нагрев вещества с фрактальной структурой происходит вблизи поверхности ( $z \rightarrow 0$ ). В этом случае из уравнения (17) при высоких температурах ( $u > 1$ ,  $G(u) \rightarrow D$ ) и дебаевской релаксации ( $m = 4$ ) получаем:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\alpha \Phi(t_0 - t) - \gamma u^4 + 1}{D}. \quad (19)$$

Решение уравнения (19) может быть представлено в виде:

$$T_s = \frac{(1 - R)W \delta M_A}{D \rho k_B N_A \Omega} = \frac{(1 - R)W \delta}{\rho C_p S \Omega}, \quad (20)$$

где  $W = I_L t_0 \Omega$  – энергия лазерного импульса,  $C_p = D k_B N_A / M_A$  – удельная изобарная высокотемпературная теплоемкость, соответствующая обобщенному закону Дюлонга – Пти. Формула (20) позволяет приблизительно оценить температуру на поверхности образца, которая устанавливается в результате импульсного лазерного облучения.

Для проведения численного моделирования процесса лазерного нагрева фрактальных диэлектрических структур с помощью нелинейного уравнения теплопроводности (17) вместе с граничными условиями (18) использовались возможности программного комплекса Mathcad 14.

Чтобы выявить влияние всех физических параметров фрактальных диэлектрических структур на процесс импульсного лазерного нагрева, был построен ряд зависимостей. Оценки показывают, что предельное значение от-

носительной температуры  $u_m = T_m / \theta$ , при которой происходит плавление, для ряда диэлектриков (кварц, сапфир, рубин, алмаз) находится в достаточно узком интервале от 2 до 2.5. В связи с этим, интенсивность лазерного излучения при моделировании нагрева необходимо подбирать так, чтобы выполнялось условие  $u(z,t) < u_m$ . Общие для всех рассмотренных случаев исходные данные имели следующие значения  $u_0 = 0.01$ ,  $l = 1$  и  $t_c = 0.5$ . Примеры расчета температурных распределений приведены на рис. 3.

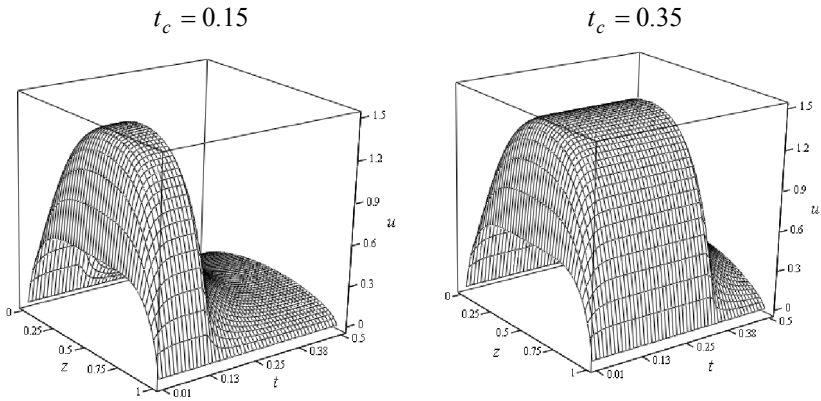


Рис. 3. Тепловые импульсы в образце при различных длительностях импульса лазерного излучения ( $\alpha = 10^2$ ,  $\beta = 0.1$ ,  $\gamma = 20$ ,  $D = 3$ ,  $m = 4$ ,  $t_c$  – расчетное время)

Анализ тепловых процессов в диэлектрических материалах с фрактальной структурой выявляет следующие основные особенности. Увеличение интенсивности лазерного излучения приводит к возрастанию температуры и сокращению времени выхода на стационарный режим нагрева. Поглощение лазерного излучения в начальные моменты времени обуславливает неравномерный температурный профиль и увеличивает время наступления стационарного режима нагрева. Образец, кроме того, может эффективно остывать за счет радиационного теплообмена. При переходе от частотно независимой диэлектрической проницаемости к комплексной диэлектрической проницаемости, описываемой формулой Гавриилака – Негами (4), показатель степени



$m$  в температурной зависимости интенсивности теплового излучения меняется от 5 до 4. Такое изменение влечет за собой незначительное увеличение температуры нагрева. В низкоразмерных системах атомы или молекулы связаны между собой слабо и поэтому более подвижны. По этой причине снижение фрактальной размерности приводит к возрастанию температуры. Кроме того, учет функции  $G(u)$  в уравнении (17) заметно уменьшает время установления стационарного режима нагрева. Действие лазерного излучения в течение конечного промежутка времени  $t_0$  приводит к появлению теплового импульса в образце. При этом передний и задний фронты этого импульса размыты за счет нестационарных процессов нагрева и остывания. Это является причиной зависимости критической интенсивности лазерного импульса, при которой происходит разрушение диэлектрика, от длительности импульса.

Для исследования характера зависимости критической интенсивности излучения от длительности импульса на основе уравнения (17) и граничных условий (18) было проведено моделирование процесса разрушения вещества с фрактальной структурой. Условие, при котором происходит лазерное разрушение, имеет вид

$$u(z, t) \geq u_m, \quad (21)$$

где  $u_m = T_m / \theta$  – безразмерная (отнесенная к температуре Дебая) температура плавления образца. Для оценки  $u_m$  использовалась формула:

$$u_m = 1.75 \cdot 10^{-5} (2n^2 + 1)^2 \theta, \quad (22)$$

где  $n$  – главное квантовое число [3].

Суть модели сводится к численному решению краевой задачи (18) для уравнения (17) для различных значений параметров  $t_0$  и  $\alpha$  при выполнении условия (21) с некоторой наперед заданной погрешностью (не более 5 %). Вычислительный эксперимент проводился с помощью программы MathCad 14. Общие для всех рассмотренных случаев исходные данные имели следующие значения  $u_0 = 0.01$ ,  $l = 1$  и  $t_c = 0.5$ . В качестве максимального значения безразмерной температуры плавления было принято значение  $u_m = 2$ , которое характерно для диэлектрических материалов. При моделировании одновременно уменьшалась длительность лазерного воздействия  $t_0$  и увеличивалась интенсивность  $\alpha$  с тем, чтобы обеспечить требуемое значение  $u_m$ .

На рис. 4а показан пример построенной таким образом зависимости критической интенсивности, при которой происходит плавление наноструктуры, от длительности импульса.

В целом, как показал вычислительный эксперимент, зависимость на рис. 4а, б с приемлемой точностью аппроксимируется формулой

$$\alpha = \alpha_{\infty} \exp(p t_0^{-q}), \quad (23)$$

где  $p$  и  $q$  – параметры, зависящие от свойств вещества с фрактальной структурой,  $\alpha_{\infty}$  – критическая интенсивность при непрерывном действии лазера ( $t_0 \rightarrow \infty$ ). Следует, кроме того, отметить, что формула (23) достаточно хорошо описывает известные из литературы экспериментальные

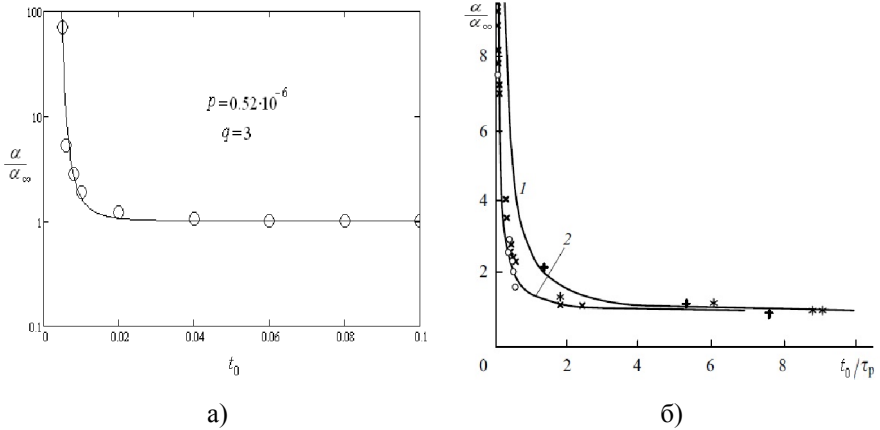


Рис. 4. Зависимость критической интенсивности лазерного излучения от длительности импульса: а) на основе теоретической модели при  $\beta = 0.1$ ,  $\gamma = 20$ ,  $D = 3$ ,  $m = 4$ ; б) на основе экспериментальных данных для  $\text{SiO}_2$  [4], для лазерных импульсов прямоугольной (1) и гауссовой (2) формы, где  $\tau_p$  – время релаксации температуры включения

При более мощных и коротких лазерных воздействиях может происходить смена механизмов оптического разрушения диэлектрических материалов с фрактальной структурой при изменении длительности лазерного импульса, однако, согласно нашим работам, есть основания полагать, что формула (23) останется справедливой и в этом случае, при других значениях параметров  $p$  и  $q$ .

## ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

1. Интенсивность теплового излучения диэлектрического фрактального кластера является степенной функцией температуры с нецелым показателем. Интенсивность излучения обратно пропорционально времени диэлектрической релаксации и может достигать значительной величины, сравнимой с излучением абсолютно черного тела; в чем ключевую роль играет частотная дисперсия диэлектрической функции, которая вычисляется с помощью уравнения Гаврилияка – Негами.

2. Коэффициент теплопроводности вещества с фрактальной структурой при низких температурах (температура на порядок меньше температуры Дебая) увеличивается с уменьшением фрактальной размерности. При высоких температурах (температура больше десятой части температуры Дебая) увеличение размерности приводит к увеличению коэффициента теплопроводности за счет превалирующего вклада степеней свободы. Также при высоких температурах коэффициент теплопроводности может уменьшаться из-за снижения времени свободного пробега фононов.

3. Снижение фрактальной размерности образца ведет к возрастанию температуры нагрева. Учет частотной дисперсии диэлектрической функции также приводит к увеличению расчетной температуры нагрева.

4. Когда действие импульсного лазерного излучения приводит к появлению теплового импульса в образце, передний и задний фронты этого импульса размыты за счет нестационарного нагрева и остывания, определяясь фрактальной размерностью образца.

5. Причиной зависимости критической интенсивности лазерного излучения от длительности импульса на начальной стадии является инерционность лазерного нагрева. Для разрушения образца с фрактальной структурой лазерными импульсами малой длительности требуется увеличивать интенсивность излучения до более высоких критических значений.

## Цитируемая литература

1. Берри, Р. С. Фазовые переходы и сопутствующие явления в простых системах связанных атомов / Р. С. Берри, Б. М. Смирнов // УФН. – 2005. – Т. 175. – № 4. – С. 367–411.

2. Рехвиашвили, С. Ш. // К вопросу о теплоемкости нанокристаллических веществ / С. Ш. Рехвиашвили // Письма в ЖТФ. – 2004. – Т. 30, № 22. – С. 65–69.

3. Ощерин, Б. Н. Полуэмпирический метод расчета характеристических температур на ЭВМ. / Б. Н. Ощерин, А. М. Шевчук // Физические свойства металлов и сплавов. Межвузовский сборник. – Вып. 5. – 1986. – С. 129–132.

4. Маненков, А. А. Проблемы физики взаимодействия мощного лазерного излучения с прозрачными твердыми телами в области сверхкоротких импульсов / А. А. Маненков / Квантовая электроника. – 2003. – Т. 33, № 7. – С. 639–644.

#### **Список работ, в которых опубликованы основные положения диссертации:**

А.1. **Гавашели, Д. Ш.** Об излучении диэлектрического фрактального кластера / С. Ш. Рехвиашвили, Д. Ш. Гавашели // Физика твердого тела. – 2011. – Т. 53. – № 9. – С. 1727–1731 (из перечня ВАК).

А.2. **Гавашели, Д. Ш.** Тепловое разрушение фрактальных наноструктур под действием импульсного лазерного излучения / Д. Ш. Гавашели, С. Ш. Рехвиашвили // Нано- и микросистемная техника. – 2011. – № 8. – С. 36–40 (из перечня ВАК).

А.3. **Гавашели, Д. Ш.** Теплопроводность и теплоемкость твердых тел с фрактальной структурой / С.Ш. Рехвиашвили, Д.Ш. Гавашели // Нелинейный мир. – 2011. – Т. 9. – №. 5. – С. 288-293 (из перечня ВАК).

А.4. **Гавашели, Д. Ш.** Моделирование импульсного лазерного нагрева диэлектрического твердого тела с фрактальной структурой / С. Ш. Рехвиашвили, Д. Ш. Гавашели // Нелинейный мир. – 2011. – Т. 9, № 12. – С. 785–792 (из перечня ВАК).

А.5. **Gavasheli, D. Sh.** Modeling of Laser Pulse Heating of Solid Dielectric with a Fractal Structure / S. Sh. Rekhviashvili, D. Sh. Gavasheli // American Journal of Condensed Matter Physics. – 2012. – V. 2, No. 2. – P. 53–56.

А.6. **Gavasheli, D. Sh.** Destruction of ionic crystals and glasses by laser beams / D. Sh. Gavasheli, Yu. O. Gavasheli, A. P. Savintsev // Physics of Extreme States of Matter. – Chernogolovka: IPCP RAS, 2010. – P. 143–145.

А.7. **Гавашели, Д. Ш.** К вопросу о проробое плавленого кварца сфокусированными лазерными пучками / Д. Ш. Гавашели, Ю. О. Гавашели, А. П. Савинцев //Материалы III Международной научно-технической конференции «Микро- и нанотехнологии в электронике». – Нальчик: Каб.-Балк. ун-т, 2010. – С. 97–99.

А.8. **Гавашели, Д. Ш.** Моделирование лазерного нагрева кристаллического диэлектрика. / Д. Ш. Гавашели, Ю. О. Гавашели, А. П. Савинцев // Материалы III Международной научно-технической конференции «Микро- и нанотехнологии в электронике». Нальчик: Каб.-Балк. ун-т, 2010. – С. 157–159.

А.9. **Gavasheli, D. Sh.** Study of the breakdown mechanism of fused quartz by focused laser beam. / D. Sh. Gavasheli, Yu. O. Gavasheli, A. P. Savintsev // Physics of Extreme States of Matter. – Chernogolovka: IPCP RAS, 2011. – P. 43–44.

А.10. **Гавашели, Д. Ш.** Моделирование излучения диэлектрического фрактального кластера / Д. Ш. Гавашели // *Материалы Второго Международного Российско-Казахского симпозиума «Уравнения смешанного типа, родственные проблемы анализа и информатики»*. – 2011. – С. 56.

А.11. **Гавашели, Д. Ш.** Наноразмерные эффекты и фазовые переходы при высокоинтенсивных воздействиях на диэлектрики. / Д. Ш. Гавашели, А. П. Савинцев, Ю. О. Пахунова // *Материалы Региональной научно-методической конференции «Нанотехнологии и наноматериалы–2009»*. – Нальчик, 2009. – С. 74–76.

А.12. **Гавашели, Д. Ш.** Моделирование межатомного взаимодействия в газах и нанобъектах. / Д. Ш. Гавашели, А. П. Савинцев, Ю. О. Пахунова // *Материалы Региональной научно-методической конференции «Нанотехнологии и наноматериалы–2009»*. – Нальчик, 2009. – С. 77–79.

А.13. **Гавашели, Д. Ш.** Диффузионная модель разрушения прозрачных твердых тел лазерными импульсами наносекундного диапазона / Д. Ш. Гавашели, С. Ш. Рехвиашвили // *Материалы I Всероссийской конференции молодых ученых «Математическое моделирование фрактальных процессов, родственные проблемы анализа и информатики»*. – Терскол, 2010. – С. 71–72.

А.14. **Gavasheli, D. Sh.** Features of laser destructions of glasses and ionic crystals / D. Sh. Gavasheli, Yu. O. Gavasheli, A. P. Savintsev // *Book of Abstracts of the XXV Interaction Conference «Equation of State for Matter»*. – Chernogolovka: IPCP RAS, 2010. – P. 122–123.

А.15. **Gavasheli, D. Sh.** Investigation parameters 2T-state into sodium chloride / D. Sh. Gavasheli, Yu. O. Gavasheli, A. P. Savintsev // *Book of Abstracts of the XXVI Interaction Conference «Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter»*. – Chernogolovka: IPCP RAS, 2011. – P. 38–39.

А.16. **Gavasheli, D. Sh.** Calculation of heat flows in sodium chloride / D. Sh. Gavasheli, Yu. O. Gavasheli, A. P. Savintsev // *Book of Abstracts of the XXVI Interaction Conference «Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter»*. – Chernogolovka: IPCP RAS, 2011. – P. 39–40.

А.17. **Gavasheli, D. Sh.** Research of avalanche ionization in fused quartz / D. Sh. Gavasheli, Yu. O. Gavasheli, A. P. Savintsev // *Book of Abstracts of the XXVI Interaction Conference «Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter»*. – Chernogolovka: IPCP RAS. – 2011. – P. 40–41.

А.18. **Gavasheli, D. Sh.** Destruction of fractal solid states under the action of pulsed laser radiation. / D. Sh. Gavasheli, S. Sh. Rekhviashvili // *Book of Abstracts of the XXVII Interaction Conference «Equation of State for Matter»*. – Chernogolovka: IPCP RAS, 2012. – P. 111.

В печать 25.12.2012. Тираж 100 экз. Заказ № 6730.  
Полиграфический участок ИПЦ КБГУ  
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.