

На правах рукописи

Алексашкина Анна Андреевна

Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов
импульсной лазерной абляции золота.

Специальность 1.2.2 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2024

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук".

Научный руководитель: **Мажукин Владимир Иванович**,
доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник ИПМ
им. М.В. Келдыша РАН

Официальные оппоненты: **Киселев Сергей Петрович**
доктор физико-математических наук, ведущий
научный сотрудник ИТПМ СО РАН

Жаховский Василий Викторович
кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник ОИФТ РАН

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Федеральный
исследовательский центр «Институт общей
физики им. А.М. Прохорова Российской
академии наук» ИОФ РАН

Защита состоится «12» сентября 2024 г. в 11 часов на заседании
диссертационного совета 24.1.237.01, созданного на базе ИПМ
им. М.В. Келдыша РАН, по адресу: 125047, г. Москва, Миусская пл., д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИПМ
им. М.В. Келдыша РАН
https://keldysh.ru/council/3/D00202403/alekshashkina_aa_diss.pdf

Автореферат разослан «____» _____ 2024 г.

Учёный секретарь диссертационного совета 24.1.237.01
кандидат физико-математических наук

Корнилина М.А.

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. В последние годы изучение свойств наноматериалов приобретает все большее значение в связи с широким спектром их применения в электронике, физике, биологии, медицине. Разработаны различные методы синтеза наночастиц. Одним из наиболее перспективных методов является лазерная абляция металлов импульсами ультракороткой (фемто-пикосекундной) длительности, с помощью которой можно контролируемо получать наночастицы для целого ряда приложений.

Использование нанотехнологий во многих отраслях научных исследований и инновационных технологических приложениях вызывает теоретический и практический интерес исследователей. Благодаря возрастающим возможностям импульсной лазерной абляции в производстве наночастиц это направление становится все более привлекательным и для фундаментальных исследований.

Из всех металлов золото и медь являются наиболее известными и широко используемыми материалами в научных исследованиях, промышленном производстве и, в последнее время, в проблемах биомедицины. Специфические особенности благородных металлов вызывают интерес не только в различных приложениях, но и большой фундаментальный - в связи с быстрым развитием новых наноразмерных материалов. Наночастицы золота и меди обладают уникальными свойствами, что послужило основой для их возможного использования в целях тераностики в наномедицине. Поэтому актуальным является исследование условий получения наночастиц этих благородных металлов с управляемыми свойствами. Преимуществом генерации наночастиц посредством лазерной абляции является возможность их производства практически без примесей. Однако разработка технологии получения наночастиц на основе этого способа затруднительна вследствие сложности и дороговизны экспериментальной оптимизации параметров синтеза. Поэтому для исследования данного процесса применяют методы математического моделирования. Успешность математического моделирования во многом зависит от возможностей используемого математического аппарата. В его основу положены современные континуальные и атомистические модели, численные методы и вычислительные алгоритмы. В последнее время разработаны комбинированные континуально-атомистические модели, объединяющие достоинства континуальных, позволяющих моделировать электронное возбуждение ультракоротким лазерным излучением, и атомистических, позволяющих отслеживать движение каждой молекулы или атома, моделировать детализированную абляцию и фазовые переходы после облучения мишени ультракороткими лазерными импульсами.

Особенностью ультракороткого (фемто-пикосекундного) лазерного воздействия на металлы является протекание всех процессов в условиях сильной термодинамической неравновесности, характеризующейся, в частности, наличием двух температур – электронной T_e для вырожденного газа свободных

электронов и фононной T_{lat} для кристаллической решетки. В проблемах математического моделирования наличие двух температур требует разделения и количественного определения всех термодинамических и теплофизических характеристик исследуемого материала. Для континуальных моделей свойства вещества являются входными параметрами, при этом моделирование процессов лазерной абляции происходит с заходом в высокотемпературную область, в том числе в область критической точки. Поэтому одной из наиболее важных проблем математического моделирования является необходимость определения для каждой из подсистем теплофизических, оптических и термодинамических характеристик в широком диапазоне температур – от комнатной $T_0 = 300\text{ K}$ до критической T_{cr} . Экспериментальный подход определения свойств имеет ограничения из-за трудностей измерения, при температурах значительно превышающих температуру плавления $T > T_m$ (T_m – температура плавления). Наблюдается также разброс значений в различных экспериментах. Поэтому известных данных становится недостаточно. К тому же для работы с математическими моделями актуальным является получение температурных зависимостей в широком диапазоне параметров. С этим связано использование теоретического подхода для получения температурных зависимостей характеристик золота и меди. Широко применяемым инструментом теоретического подхода является атомистическое моделирование, опирающееся на достоинства метода молекулярной динамики (МД), позволяющего рассчитывать траектории и скорости движения частиц системы.

Важную роль при использовании метода МД играет выбор потенциала взаимодействия частиц. Для металлов общепризнанными являются потенциалы погруженного атома (ЕАМ). Потенциалы ЕАМ являются полуэмпирическими, поэтому содержат большое количество подгоночных параметров. С этим связана важнейшая проблема выбора потенциала взаимодействия наиболее соответствующего решаемой задаче.

Степень научной разработанности. Для определения свойств материалов традиционным является экспериментальный подход. Однако этот подход имеет ряд ограничений, прежде всего по диапазону условий измерений, особенно в области плавления и в околокритической области. Барические зависимости равновесной температуры плавления для меди и золота определены в диапазоне только от 0 до 50 кбар, для удельной теплоты плавления известно значение только для нулевого давления. Плотность, энтальпия и удельная теплоемкость меди в твердом и жидком состояниях измерялась в экспериментах многими авторами. Измерения плотности, энтальпии и теплоемкости кристаллической меди при $T > 298.15\text{ K}$ проведены во многих работах. Для жидкой меди были получены разными авторами данные по энтальпии и теплоемкости в широком интервале температур (1386 К – 1887 К) и (1428 К– 2007 К). Результаты тщательного анализа экспериментальных данных из большого количества работ, приводятся в справочниках Халтгринга и JANAF. Плотность меди получена в

эксперименте в широком диапазоне температуры $300 \text{ K} \leq T \leq 5000 \text{ K}$. Однако экспериментальный подход имеет ограничения из-за трудностей измерения при температурах значительно превышающих температуру плавления, поэтому значения свойств, полученных экспериментально имеют большой разброс.

Сведений об определении теплофизических свойств золота как экспериментальными, так и теоретическими методами значительно меньше, чем для меди. Экспериментальные данные, для жидкого золота, полученные при температурах выше температуры плавления $T > T_m$, в литературе весьма немногочисленны и ограничиваются, в основном, значениями энтальпии. В последнее время проводятся исследования для определения фонной теплопроводности золота, однако вычислить температурную зависимость в широком диапазоне пока не удалось. В различных работах имеются значения в одной точке при температуре 300 К, в промежутке от 100 К до 500 К и от 300 К до 1000 К.

Для обоих металлов (Cu, Au) наблюдается значительный разброс значений в различных экспериментах, что отмечалось многими исследователями.

Определение критических параметров меди и золота экспериментальным способом пока нерешенная задача, известны лишь расчеты других авторов, использовавших различные вычислительные методы.

В силу ограниченных возможностей инструментального измерения теплофизических характеристик исследуемых материалов в области высоких температур $T > T_m$, актуальным становится теоретический подход.

Исследования механизмов ультракороткой лазерной абляции золота (Au) представляют сложную проблему. В рамках экспериментальных и теоретических исследований был изучен относительно узкий диапазон лазерного флюенса $F \approx 0.25\text{--}0.7 \text{ Дж/см}^2$, в котором наблюдается откольная абляция за счет явлений разгрузки в расплаве вблизи облучаемой поверхности. Однако сложные процессы, протекающие в зоне облучения, связанные с метастабильными перегретыми состояниями в твердой фазе и гомогенным механизмом плавления, изучены недостаточно. Проведение экспериментальных исследований затруднено слишком короткими временными масштабами протекающих процессов. В силу указанных ограничений актуальным становится применение теоретических подходов, наиболее распространенным из которых является математическое моделирование. В его основу положены современные континуальные и атомистические модели, численные методы и вычислительные алгоритмы. В последнее время разработаны комбинированные континуально-атомистические модели, объединяющие достоинства континуальных моделей, позволяющих моделировать электронное возбуждение ультракоротким лазерным излучением, и атомистических, позволяющих отслеживать движение каждой молекулы или атома, моделировать детализированную абляцию и фазовые переходы после облучения мишени ультракороткими лазерными импульсами.

Целью данной работы является определение методом молекулярной динамики термодинамических и теплофизических свойств металлов меди и золота в широком диапазоне температур ($T_0 = 300 \text{ К} \leq T \leq T_{\text{cr}}$) и давлений ($0 \text{ бар} \leq P \leq 100 \text{ кбар}$). А также модификация односкоростной неравновесной двухтемпературной комбинированной континуально-атомистической модели для исследования механизмов ультракороткой лазерной абляции золота.

Задачами исследования являются:

- Определение для золота и меди: в диапазоне $0 \text{ бар} \leq P \leq 100 \text{ кбар}$ барических зависимостей, температуры плавления $T_m(P)$ и удельной теплоты плавления $L_m(P)$; в диапазоне $300 \text{ К} \leq T \leq 5700 \text{ К}$ температурных зависимостей энтальпии $H(T)$, удельной теплоемкости $C_p(T)$, плотности $\rho(T)$, линейного размера $l(T)$, коэффициента линейного расширения $\alpha(T)$, теплопроводности $\lambda(T)$; параметров критической точки T_{cr} , P_{cr} , ρ_{cr} .
- Исследование основных механизмов удаления вещества под действием лазерного импульса: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол с помощью комбинированной континуально-атомистической модели.
- Вычисление количества удаленного вещества при разных механизмах откола.
- Молекулярно-динамическое моделирование процессов абляции металлической (Au) мишени с использованием двух различных потенциалов взаимодействия частиц. Осуществление валидации результатов моделирования для каждого из используемых потенциалов взаимодействия.

Научная новизна работы включает комплекс решений (математических, алгоритмических и программных), а также результаты расчетов, обеспечивающих достижение цели работы.

1. Вычислены теплофизические свойства металлов (меди и золота) в широком температурном диапазоне, включающем область фазового перехода (плавление-кристаллизация), а также околкритическую область.
2. Определены параметры критической точки меди и золота.
3. Исследованы потенциалы погруженного атома, использующиеся в моделировании механизмов ультракороткой лазерной абляции золота.
4. Модифицирована односкоростная неравновесная двухтемпературная комбинированная континуально-атомистическая модель для исследования механизмов ультракороткой лазерной абляции золота.
5. В результате моделирования ультракороткой лазерной абляции получены и проанализированы основные механизмы откола вещества: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол. Проведено сравнение результатов глубины абляции при моделировании с использованием двух потенциалов с экспериментальными данными.
6. Расширены возможности пакета LAMMPS: добавлен модуль, реализующий комбинированную двухтемпературную модель с неявной

разностной схемой с автоматическим выбором шага по времени для электронной температуры. В этом модуле возможен расчет с любой нелинейной формой коэффициентов. Также была произведена модификация существующего модуля “fix ave/chunk”, сохраняющего усредненные результаты в файлы, позволяющая единообразно сохранять электронную температуру в файлы вместе с другими величинами для удобного построения графиков и видео.

Теоретическая и практическая ценность исследования заключается в определении температурных и барических зависимостей теплофизических и термодинамических свойств меди и золота в широком диапазоне температуры и давления, включающем область фазового перехода (плавление-кристаллизация), а также окологритическую область. Эти свойства могут найти применение в теоретических и практических исследованиях в различных областях, таких как материаловедение, нанотехнологии, биомедицина и др.

Ультракороткая лазерная абляция является одним из наиболее перспективных направлений развития широкого спектра приложений в различных областях, таких как материаловедение, нанотехнологии, биомедицина и др. Поэтому возможность теоретического получения и детального исследования по результатам моделирования ультракороткой лазерной абляции золота основных механизмов откола (закритического разлета, фазового взрыва, механического откола) имеет большое значение для многих перспективных приложений в электронике, физике, биологии, медицине, что будет способствовать оптимизации параметров лазерного синтеза наночастиц и нанокластеров.

Методология и методы исследования. Для определения теплофизических характеристик и критических параметров металлов использовали классический метод молекулярной динамики. Техническая реализация была осуществлена с помощью пакета молекулярной динамики Lammps (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator).

Для исследования механизмов ультракороткой лазерной абляции золота используется модифицированная односкоростная неравновесная двухтемпературная комбинированная континуально-атомистическая модель. Для ее применения в пакет Lammps был добавлен модуль, реализующий неявную разностную схему с автоматическим выбором шага по времени для электронной температуры.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Впервые в широком диапазоне температуры $300\text{K} \leq T \leq 5700\text{K}$, включающем фазовый переход плавления-кристаллизации и окологритическую область, и давления $0 \leq P \leq 100$ кбар методом молекулярной динамики

определены следующие теплофизические и термодинамические характеристики меди и золота:

а) барические зависимости удельной теплоты плавления $L_m(P)$ и равновесной температуры плавления $T_m(P)$;

б) температурные зависимости энтальпии $H(T)$, удельной теплоемкости $C_p(T)$, плотности $\rho(T)$, линейного размера $\ell(T)$ и коэффициента линейного расширения $\alpha(T)$, теплопроводности $\lambda(T)$.

2. Впервые для выбранных потенциалов взаимодействия частиц для золота и меди молекулярно-динамическим моделированием получены параметры критической точки T_{cr} , ρ_{cr} , P_{cr} этих металлов.

3. Верификация и валидация результатов молекулярно-динамического моделирования показали, что используемые потенциалы взаимодействия позволяют описывать свойства металлов (Cu, Au) с допустимой погрешностью.

4. Была модифицирована односкоростная неравновесная двухтемпературная комбинированная континуально-атомистическая модель, что впервые позволило получить и проанализировать следующие механизмы ультракороткой лазерной абляции золота: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол и выявить основной механизм удаления вещества с поверхности.

5. Был разработан и добавлен в пакет LAMMPS программный модуль, расширяющий его возможности в реализации неявной разностной схемы с автоматическим выбором шага по времени для электронной температуры в односкоростной комбинированной двухтемпературной модели. Также была произведена модификация существующего модуля “fix ave/chunk”, сохраняющего усредненные результаты в файлы, позволяющая единообразно сохранять электронную температуру в файлы вместе с другими величинами для удобного построения графиков и видео.

6. Валидация результатов моделирования проводилась с применением двух различных потенциалов для золота и позволила определить потенциал, лучше согласующийся с экспериментальными данными по глубине абляции, в рассматриваемом режиме воздействия.

Достоверность и обоснованность. Обоснованность полученных результатов следует из корректности постановки задачи, использования общеизвестной модели молекулярной динамики, двухтемпературной модели, которые опубликованы ранее другими авторами, а также применения апробированных потенциалов взаимодействия частиц для меди и золота. Достоверность результатов подтверждается согласованием с экспериментальными данными и данными работ других авторов.

Апробация результатов работы была проведена посредством личного представления автором результатов на ряде научных конференций:

- Конкурс работ молодых ученых ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Москва, Россия, 2023)

- Конкурс работ молодых ученых ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Москва, Россия, 2022)
- IX Международная конференция «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии» (КРИС-2022) (Ижевск, Россия, 2022)
- XXVIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2021» (Москва, Россия, 2021)
- XXXVI International Conference on interaction of intense energy fluxes with matter (Elbrus, Russia, 2021)
- E-MRS «Spring Meeting 2019» (Nica, France, 2019)
- ICASS «3rd International Conference on Applied Surface» (Pisa, Italy, 2019)
- The 27th annual International Conference on Advanced Laser Technologies ALT19 (Praga, Czech Republic, 2019)
- XVIII International Seminar Mathematical Model & Modeling in Laser-Plasma Processes & Advanced Science Technologies. (Petovac, Montenegro, 2019)
- XVII International Seminar Mathematical Model & Modeling in Laser-Plasma Processes & Advanced Science Technologies. (Budva, Montenegro, 2018)
- XVII International Seminar Mathematical Model & Modeling in Laser-Plasma Processes & Advanced Science Technologies. (Budva, Montenegro, 2018)

В рамках данной работы было **опубликовано** 17 статей в том числе 7 из списка ВАК, 11 индексируются в базах Web of Science, Scopus и MathSciNet.

Личный вклад автора заключается в том, что все численные исследования, результаты которых изложены в диссертационной работе, проведены лично автором в процессе его научной деятельности. Материалы из совместных публикаций, использованные в работе, содержат оригинальные результаты автора. Автором были проведены все молекулярно-динамические расчеты, а также расчеты с применением комбинированной континуально-атомистической модели и выполнена интерпретация полученных данных.

Объем и структура диссертации. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Диссертация содержит 110 страниц и 40 рисунков.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность исследуемой проблемы, сформулированы основные цели и задачи работы, показана теоретическая и практическая значимость. Описаны основные положения, выносимые на защиту, а также структура и объем диссертации.

В первой главе проведен краткий обзор литературы, представлены описания исследований других авторов, проведенных по теме диссертации. Показаны основные методы получения наночастиц, обоснован выбор лазерной абляции как наиболее перспективного способа синтеза наночастиц и нанокластеров. Описаны способы моделирования лазерной абляции: атомистические и континуальные, их преимущества и недостатки. Перечислены известные методы определения равновесной температуры плавления, теплоемкости и теплопроводности, а также параметров критической точки меди и золота с помощью моделирования.

Во второй главе описывается метод молекулярно-динамического моделирования. Математическая формулировка задачи состоит в представлении объекта в виде атомистической системы. Каждый атом этой системы является материальной точкой, для которой задаются масса m_i , радиус-вектор \vec{r}_i и скорость \vec{v}_i . Взаимодействие между собой атомов, а также их движения в пространстве подчиняются классическим уравнениям, а именно уравнениям Ньютона. Получается система дифференциальных уравнений. Для объекта, состоящего из N частиц, в этой системе будет $2N$ дифференциальных уравнений.

$$\begin{cases} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + F_i^{ext} \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{cases}, i = 1 \dots N \quad (1)$$

В правой части уравнения (1) находятся \vec{F}_i^{ext} - сила взаимодействия с внешними полями и $\vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i}$ - сила взаимодействия между частицами, где $U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ потенциальная энергия системы. Для решения системы задаются начальные условия: координаты частиц в узлах кристаллической решетки, скорости частиц - в соответствии с распределением Максвелла для необходимой температуры, также при необходимости накладываются дополнительные «периодические» граничные условия. Например, по оси Ox это соответствует тому, что частица, которая вылетает через одну сторону образца, заменяется на частицу, имеющую такую же скорость, но влетевшую через другую сторону. Выбирается потенциал взаимодействия частиц – для металлов потенциал погруженного атома ЕАМ, имеющий следующий вид: $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N f(\rho_i)$, $\varphi(r_{ij})$ - потенциал взаимодействия i и j атома, находящихся на расстоянии r_{ij} , $f(\rho_j)$ - функция “погружения” i -го атома, ρ_i - суммарная электронная плотность для i -го атома, создаваемая сферически

симметричными функциями одноэлектронной плотности $n(r_{ij})$ других атомов:

$$\rho_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N n(r_{ij}).$$

В дальнейшем система уравнений решается с помощью разностной схемы Верле. Для молекулярно-динамического моделирования используется пакет Lammmps (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). В нем имеется поддержка для различных потенциалов, а также имеется возможность использовать встроенные термостаты и баростаты.

Представлены алгоритмы определения и значения, полученные с помощью моделирования, для барических зависимостей **равновесной температуры плавления меди и золота**. Определение равновесной температуры плавления металлов проводится на основе метода сосуществования твердой и жидкой фазы при одинаковой температуре. В ходе моделирования равновесная температура плавления меди при нулевом давлении оказалась равной 1330 К, известное экспериментальное значение составляет $T_m=1356$ К. Таким образом, результат моделирования равновесной температуры плавления отличается от экспериментального на 1,9%. Вычисленное значение равновесной температуры плавления золота при нулевом давлении составляет 1332 К, экспериментальное значение $T_m=1333,4$ К, отличие от справочных данных не существенное $\sim 0,1\%$. Вычислялась равновесная температура плавления в широком диапазоне давлений от 0 до 100 кбар, в то время как экспериментальные данные известны для температуры плавления в диапазоне от 0 до 50 кбар. Полученные данные представлены на рис.1а.

Удельная теплота плавления рассчитывалась как разность энтальпии жидкости и энтальпии твердого тела при $T = T_m$, т.е. $L_m = H_{\text{liquid}}(T_m) - H_{\text{solid}}(T_m)$. Полученные зависимости были получены в широком диапазоне давлений от 0 до 100 кбар, экспериментальные данные известны только при нулевом давлении (рис.1б). Отличие от экспериментальных данных для удельной теплоты плавления меди – менее 9%. Аналогичные расчеты были проведены для золота и получены характеристики в диапазоне от 0 до 100 кбар, отличие от экспериментальных данных – менее 2%.

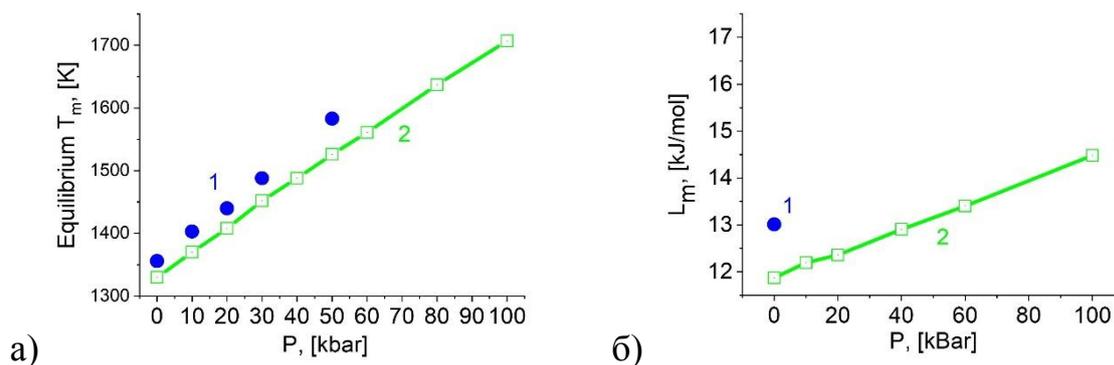


Рис.1 барические зависимости а) температуры плавления меди, 1 – эксперимент¹ (синие точки), 2 – моделирование (зеленый), б) удельной теплоты плавления меди, 1 – эксперимент¹ (синие точки), 2 – моделирование (зеленый).

Описан алгоритм вычисления температурной зависимости **плотности** (рис.2а), **энтальпии**, **линейного размера области** в широком температурном диапазоне от 300К до 6000 К, т.е. до области критической температуры. В твердой фазе известны экспериментальные значения плотности меди при $T=293$ К - $\rho=8,985$ г/см³, при $T=300$ К значение, вычисленное с помощью моделирования $\rho=8,81$ г/см³. При равновесной температуре плавления $T_m=1330$ К виден скачок как в экспериментальных данных, так и в результатах моделирования, значение плотности меди в твердой фазе по результатам моделирования $\rho_{\text{solid}}=8,27$ г/см³, и оно больше, чем в жидкости, $\rho_{\text{liquid}}=7,87$ г/см³. Величина скачка по результатам моделирования составляет 5%, согласно экспериментальным данным – 4,5%. В жидкой фазе максимальное отличие от экспериментальных данных при $T=1356$ К составляет 1,6%. Температурная зависимость плотности золота также вычислена в диапазоне от 300 К до около критической температуры. Максимальное отличие результатов моделирования от экспериментальных¹ в твердой фазе 1,4%, для жидкости – 1,1%.

Полученная зависимость энтальпии аппроксимировалась отдельно для твердой и жидкой фазы и затем дифференцировалась по температуре для вычисления **теплоемкости** $C_p(T) = \left(\frac{\partial \bar{H}(T)}{\partial T} \right)$. График представлен на рис.2б. В твердой фазе с увеличением температуры теплоемкость увеличивается, наибольшее отличие от экспериментальных данных составляет ~2,3% затем при равновесной температуре плавления происходит скачок, при котором $C_{p,\text{solid}}(T_m) > C_{p,\text{liquid}}(T_m)$. Величина скачка составляет ~5,8%. На рисунке видно, что при перегреве твердой фазы (зеленая пунктирная линия) теплоемкость также увеличивается и температура достигает 1600 К. В жидкости фазе максимальное отличие от эксперимента 8%.

¹Физические величины. // Справочник под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З., М.: Энергоатомиздат, 1991.

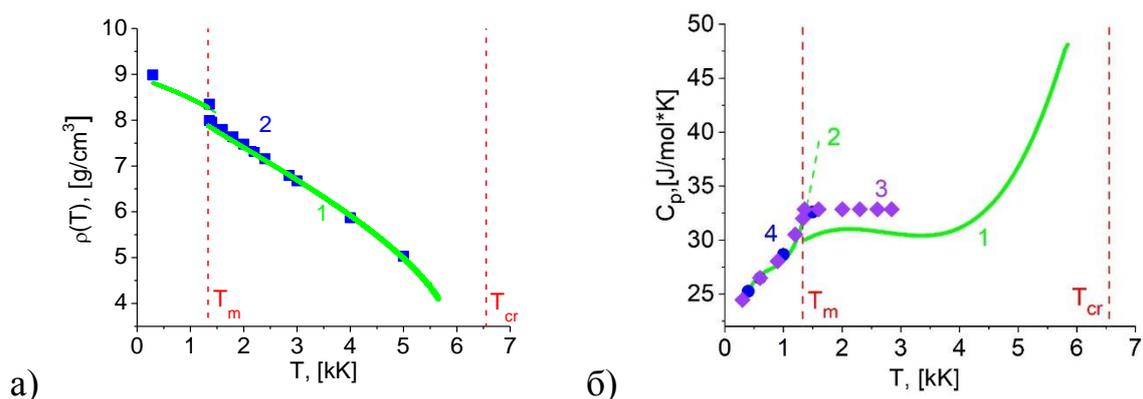


Рис.2 температурные зависимости а) плотности меди, 1 – результаты моделирования (зеленая линия), 2 – экспериментальные данные² (синие точки) б) теплоемкости меди, 1 – результаты моделирования (зеленая линия), 2 – перегрев твердой фазы, 3, 4 – экспериментальные данные³ (синие точки)

Далее описывается следующая определяемая характеристика – **теплопроводность**. Известно, что основной вклад в теплопроводность металлов вносит электронная компонента. Однако для решения некоторых задач, в частности неравновесных задач, в области фазового перехода, важную роль и основной вклад в полную теплопроводность играет фононная теплопроводность. **Фононная теплопроводность** меди и золота определялась прямым неравновесным методом. Метод заключается в создании источников тепла и стока в ячейках моделирования, для получения постоянного теплового потока вдоль определенного направления. На рисунке 3 представлен график пространственного распределения температуры по образцу меди при 300 К, после установления постоянного теплового потока. При приближении к источникам тепла и стока виден сильный нелинейный профиль температур. В области, выделенной пунктиром, наблюдается практически линейная зависимость, поэтому именно на этом участке измерялся градиент температуры. Тепловой поток вычислялся по формуле: $W = dQ/(SNdT))/2$. Согласно прямому неравновесному методу для получения постоянного потока тепла необходимо, чтобы ячейка моделирования была больше среднего расстояния, проходимого фононами. Однако это создает проблему при изучении твердых тел, поскольку в расчетах коэффициент теплопроводности зависит от размера области из-за рассеяния фононов на границах. Для решения этой проблемы была использована процедура экстраполяции данных, полученных в результате серии симуляций с различной длиной расчетной области, а затем взятие обратного значения длины расчетной области. В каждом случае коэффициент теплопроводности рассчитывался по закону Фурье: $W = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$.

² Физические величины. // Справочник под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З., М.: Энергоатомиздат, 1991.

³ JANAF Thermochemical Tables, Third Edition. Chase M. W., Davies C. A., Downey J. R., Frurip D. J., McDonald R. A., Syverud A. N. // J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 14, Suppl. 1, 1985.

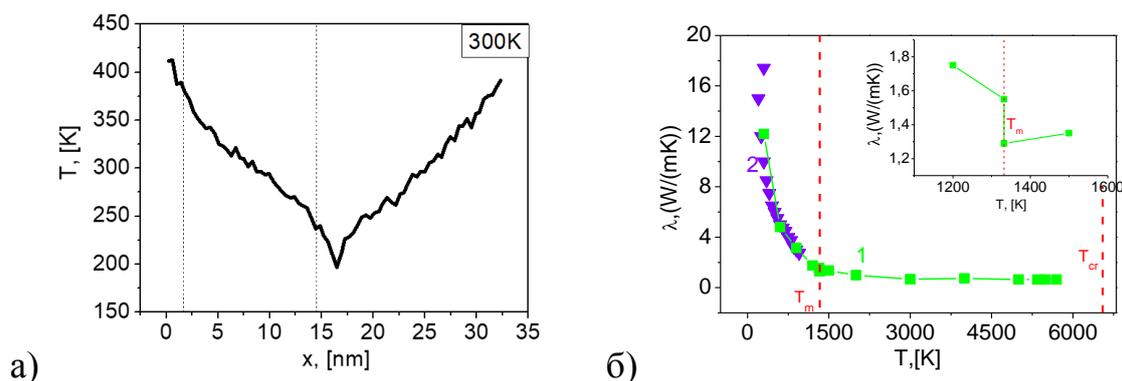


Рис.3 а) пространственное распределение температуры меди при 300К, б) 1 – температурная зависимость теплопроводности меди (зеленые точки). 2 – результаты работы (фиолетовые точки)⁴

Эксперименты проводили при разных начальных температурах образца. Полученные данные представлены на графике. При увеличении температуры значение коэффициента теплопроводности золота уменьшается. Известны экспериментальные значения только для твердой фазы. Наибольшее отличие при $T=300$ К составляет $\Delta\lambda \sim 32\%$. При $T=600$ К- $\Delta\lambda \sim 12\%$, а при $T=900$ К – значения практически совпадают. При более высоких температурах данных работ других авторов не известно.

При равновесной температуре плавления $T_m = 1332$ К виден скачок, составляющий $\Delta\lambda = 0,11$ W/mK. Расчет проводился области околокритической температуры, т.е. до $T = 6000$ К, $\lambda(6000\text{K}) = 0,31$ W/mK. Полученная зависимость фонной теплопроводности с ростом температуры не противоречит представлениям о поведении фонной теплопроводности металлов.

В **третьей** главе приведены результаты моделирования для определения параметров критической точки меди и золота. Экспериментальных данных для критических параметров меди и золота неизвестно. Расчеты проводились для выбранных потенциалов взаимодействия частиц. Определение критических параметров проводилось с помощью построения бинадали, т.е. линии сосуществования жидкости и пара (рис. 4а, б). При этом была проведена серия предварительных расчетов по выбору размеров образца: необходимо, чтобы граница жидкость-пар не исчезала раньше достижения критической температуры, и вся область не была заполнена расширившейся жидкостью. Затем проводился нагрев образца до установленной температуры $T_i = T_{i-1} + \Delta T_i$ и установления равновесия между жидкостью и насыщенным паром при температуре T_i . Рассчитывалось давление насыщенного пара и плотность путем усреднения по времени и пространству.

⁴Wang Y., Lu Z., Ruan X., First principles calculation of lattice thermal conductivity of metals considering phonon-phonon and phonon-electron scattering // Journal of applied physics, 119, 225109, 2016.

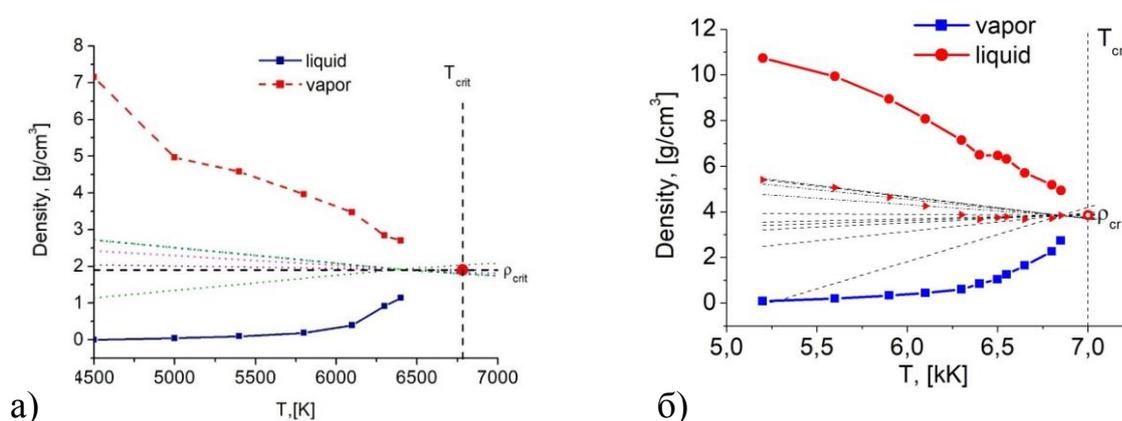


Рис.4 Варианты прямолинейного диаметра. а) Бинодаль меди. б) Бинодаль золота.

Для меди $\rho_{cr} = 1,895 \text{ г/см}^3$, $T_{cr} = 6550 \text{ К}$, $P = 160 \text{ МПа}$. Для золота $\rho_{cr} = 3,85 \text{ г/см}^3$, $T_{cr} = 7000 \text{ К}$, $P = 134 \text{ МПа}$. Проведено сравнение с результатами работ других авторов. Вычисленные данные лежат в диапазоне других результатов.

В четвертой главе описывается исследование механизмов фемтосекундной лазерной абляции.

Постановка задачи лазерного воздействия на металл состоит в следующем: на поверхность металлической (Au) мишени, помещенной в вакуум, падает поток лазерного излучения гауссовской формы по временной координате t , длиной волны λ , максимальной интенсивностью G_0 и полушириной импульса τ . Часть излучения отражается поверхностью ($0 < R < 1$, R – коэффициент отражения). Оставшаяся доля излучения $A = (1-R)$ поглощается электронной компонентой металла.

Для моделирования модифицируется односкоростная комбинированная континуально-атомистическая модель⁵. Модифицированная модель⁶ (2)-(4) состоит из двух подсистем. Первая – континуальная, используется для описания процессов в потоке коллективизированных электронов с учётом переноса вещества и переноса лазерного излучения (закон Бугера-Ламберта). Вторая – атомистическая, отображает поведение тяжелых частиц (ионов) в кристаллическом, жидком и парогазовом состоянии. Описание движения частиц осуществляется системой из $2N$ обыкновенных дифференциальных уравнений. Основное отличие модифицированной модели состоит в учёте конвективного механизма переноса энергии в электронной подсистеме. Соответственно, основной вычислительной особенностью комбинированной модели (2)–(4) в односкоростном приближении является наличие конвективного слагаемого $\partial(E_{el}u)/\partial x$ в континуальном уравнении (2).

Полученная система уравнений:

⁵Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Demin M.M., Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Visualization Analysis of the Results of Continuum-Atomistic Modeling of a Coulomb Explosion in Metals Under the Influence of Ultrashort (fs, ps) // Laser Action Scientific Visualization, vol. 15, № 1, 2023, p. 112 - 126, DOI: 10.26583/sv.15.1.10

⁶Алексашкина А.А., Мажукин В.И. Молекулярно-динамическое исследование механизмов абляции золота под воздействием ультракоротких лазерных импульсов с использованием различных потенциалов. // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, №36, 2024.

$$\frac{\partial(E_e)}{\partial t} + \frac{\partial(E_e u)}{\partial x} = - \left(\frac{\partial W_e}{\partial x} + g(T_e)(T_e - T_i) + \frac{\partial G}{\partial x} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial G}{\partial x} + \alpha(T_e)G = 0 \quad (3)$$

$$\begin{cases} \frac{d\vec{r}_j}{dt} = \vec{v}_j \\ m \frac{d\vec{v}_j}{dt} = \vec{F}_j^{emb} + \vec{F}_j^{heat} \quad j=1 \dots N \end{cases} \quad (4)$$

Обозначения: $W_e = -\lambda_e(T_e, T_i) \cdot \partial T_i / \partial x$ – тепловой поток электронной энергии, $\lambda_e(T_e, T_i)$ – коэффициент теплопроводности электронов⁷; $g(T_e)(T_e - T_i)$ – источник электрон-ионного энергообмена, $g(T_e)$ – коэффициент электрон-фононного обмена⁸, T_e, T_i – электронная и ионная температуры. \vec{r}_j, \vec{v}_j – радиус-вектор и скорость j -го атома, ρ – плотность плёнки Au , m_a, n_a – масса и концентрация атомов, $\langle \vec{v} \rangle \equiv u$ – средняя гидродинамическая скорость атомов, n_i – концентрация ионов, k_B – постоянная Больцмана. \vec{F}_j^{emb} – сила, обусловленная ЕАМ потенциалом^{9,10}, $\vec{F}_j^{heat} = m_a(\vec{v}_j - \langle \vec{v} \rangle) g(T_e)(T_e - T_i) / 3k_B T_i n_a$ – сила, обеспечивающая обмен тепловой энергией между электронной и ионной подсистемами, $\langle \vec{v} \rangle$ – средняя скорость атомов (гидродинамическая), n_a – концентрация атомов. В молекулярной динамике важную роль играет выбор потенциала взаимодействия частиц. В данной главе расчеты проводились с двумя различными потенциалами для золота^{9,10}. В направлениях Y и Z наложены периодические граничные условия, благодаря чему 3-D молекулярная динамика сведена к 1-D задаче по X . Перед лазерным воздействием частицы (ионы) находятся в узлах ГЦК решетки, для скоростей задается распределение Максвелла и молекулярно-динамическая система термически уравнивается по ионной и электронной температуре до значений, $T_e = T_i = 300$ К. Компоненты давления в направлениях Y и Z поддерживаются на нулевом уровне, $P_y = P_z = 0$.

Граничные условия для уравнения (2) задаются в виде потоков на концах отрезка (x_0, x_f):

⁷Petrov Yu. V., Inogamov N. A., Anisimov S. I., Migdal K. P., Khokhlov V. A., Khishchenko K. V., Thermal conductivity of condensed gold in states with the strongly excited electron subsystem // Journal of Physics: Conference Series 653, 012087, 2015.

⁸Smirnov N. A. Copper, gold, and platinum under femtosecond irradiation: Results of first-principles calculations. // Phys. Rev. B. V. 101, 094103, 2020.

⁹Zhakhovskii 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 // Appl. Surf. Sci. Vol. 255, 2009, p.9592-9596. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2009.04.082>

¹⁰Khokhlov V.A., Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V. Formation of solitary microstructure and ablation into transparent dielectric by a subnanosecond laser pulse. // arXiv:1811.11990v1 [cond-mat.mes-hall], 2018, p.1-10. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1811.11990>

$$x = x_0: \quad J_0(T_e, n_e) = -n_e \sqrt{\frac{3k_B T_e}{m_e}} k_B (T_e - T_0), \quad (5)$$

$$x = x_r: \quad J_r(T_e) = \sigma \cdot T_e^4. \quad (6)$$

В качестве источника энергии использовался ультракороткий лазерный импульс полушириной $\tau = 60$ фс на уровне $1/e$ (что соответствует ширине 100 фс на полувывсоте), длиной волны $\lambda = 0.8$ мкм и флюэнсом $F = 2$ Дж/см² с максимальной интенсивностью $G_0 = 2 \times 10^{13}$ Вт/см².

Граничное условия для уравнения (2) со стороны облучаемой поверхности в точке x_r формулировалось в виде следующего соотношения:

$$x = x_r: \quad G = A G_0 \exp(-((t-t_0)/\tau)^2) \quad (7)$$

где A – поглощательная способность облучаемой поверхности¹¹.

Алгоритм численного решения системы уравнений и программная реализация более подробно описана в тексте диссертации.

В ходе моделирования выделены и описаны возникающие при фемто секундном лазерном воздействии механизмы откола: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол. Закритический разлет и фазовый взрыв (взрывное вскипание) возникают в околоскритической области и реализуются при быстром вложении энергии в конденсированную среду в условиях сильного перегрева метастабильной фазы.

Механизмы сопровождаются большим положительным давлением. Закритический разлет реализуется при превышении температурой мишени критического значения, при этом фазовый переход исчезает, вещество переходит к однородному расширению (разлету).

Механизмы закритического разлета и фазового взрыва происходят при большом положительном давлении. Затем эти механизмы сменяются механическим отколом. Механический откол относится к механизмам, у которых полость зарождается и развивается в области отрицательных давлений, которые могут возникать при выходе сильной ударной волны (волны сжатия) на свободную поверхность или при непосредственном воздействии на поверхность ультракороткого (fs, ps) лазерного импульса, обеспечивающего в зоне откола большие величины отрицательного давления. Расширение полости и отлет приповерхностного слоя материала происходит за счет сил инерции.

Закритический разлет (рис. 5а-с). В приповерхностной области возникает гомогенное разрушение решетки, и частицы, находящиеся у границы образца, имеющие высокую температуру, начинают вылетать с поверхности вещества.

¹¹Blumenstein A., Zijlstra E.S., Ivanov D.S., Weber S.T., Zier T., Kleinwort F., Rethfeld B., Ihlemann J., Simon P., Garcia M.E., Transient optics of gold during laser irradiation: From first principles to experiment. // Phys. Rev. B. Vol.101, 165140, 2020.

На рисунке 5а-с представлены результаты моделирования с потенциалом¹². В момент $t = 12$ пс скорость частиц на границе вещества $v \approx 1,8$ км/с, давление еще положительное, вблизи нуля $P \approx 0,9$ ГПа. В этом режиме удаления вещество просто “распыляется” без образования более крупных фрагментов.

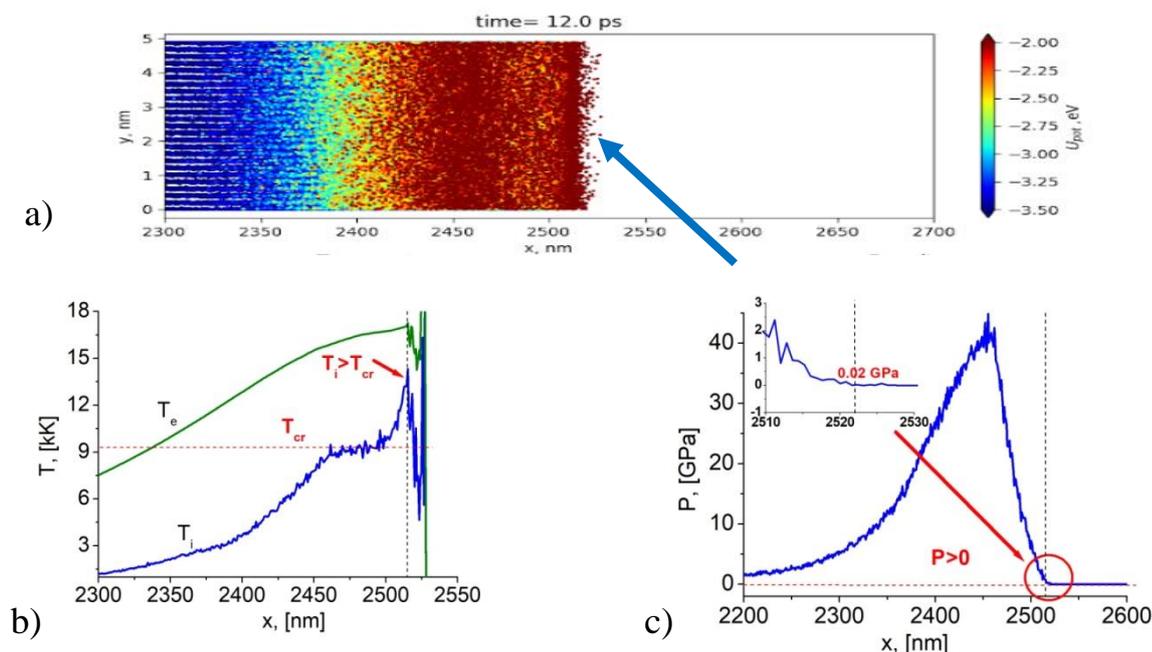


Рис. 5. Закритический разлет (потенциал¹²). Пространственные профили на момент $t = 12$ пс: а) потока частиц, б) температур T_e , T_i , с) давления P .

Фазовый взрыв (рис. 6а-д). По мере охлаждения мишени, вещество вблизи поверхности переходит из закритической области в докритическую, т.е. в область другого механизма удаления вещества - фазового взрыва. На рис. 6а-д в пространственном представлении демонстрируется динамика фазового взрыва в два момента времени $t = 44$ пс и $t = 60$ пс, после окончания лазерного импульса. Температура на границе $T_i \sim 8500$ К и $T_i < T_{crit}$, скорость частиц на границе вещества $v \approx 1,7$ км/с, давление $P \approx 0,1$ ГПа.

Механический откол (рис. 7а-ф). Быстрые процессы высокоскоростной лазерной абляции сменяются более медленным нетепловым процессом, а именно механическим отколом. Во время действия лазерного импульса на поверхность золотой мишени часть энергии поглощается в небольшом слое около поверхности, вызывая быстрый нагрев из-за передачи энергии от нагретых электронов решетке. Этот нагрев генерирует волну сжимающего давления, распространяющегося вглубь золотой мишени. За волной сжатия следует волна разгрузки. Для потенциала⁸ в момент времени $t = 72$ пс на графике давления P (рис. 7е) видна волна отрицательного давления (волна разгрузки). Стрелками на этом рисунке указана область отрицательного давления. На графике

¹² Khokhlov V.A., Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V. Formation of solitary microstructure and ablation into transparent dielectric by a subnanosecond laser pulse. // arXiv:1811.11990v1 [cond-mat.mes-hall], 2018, p.1-10. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1811.11990>

пространственного распределения частиц (рис. 7а) стрелками отмечены соответствующие области, где впоследствии (рис. 7b) возникают отколы. Волна отрицательного давления приводит в момент $t = 105$ пс к отколам более крупных фрагментов вещества, чем в случае фазового взрыва. Скорость частиц на границе вещества $v \approx 1,1$ км/с (рис. 7f).

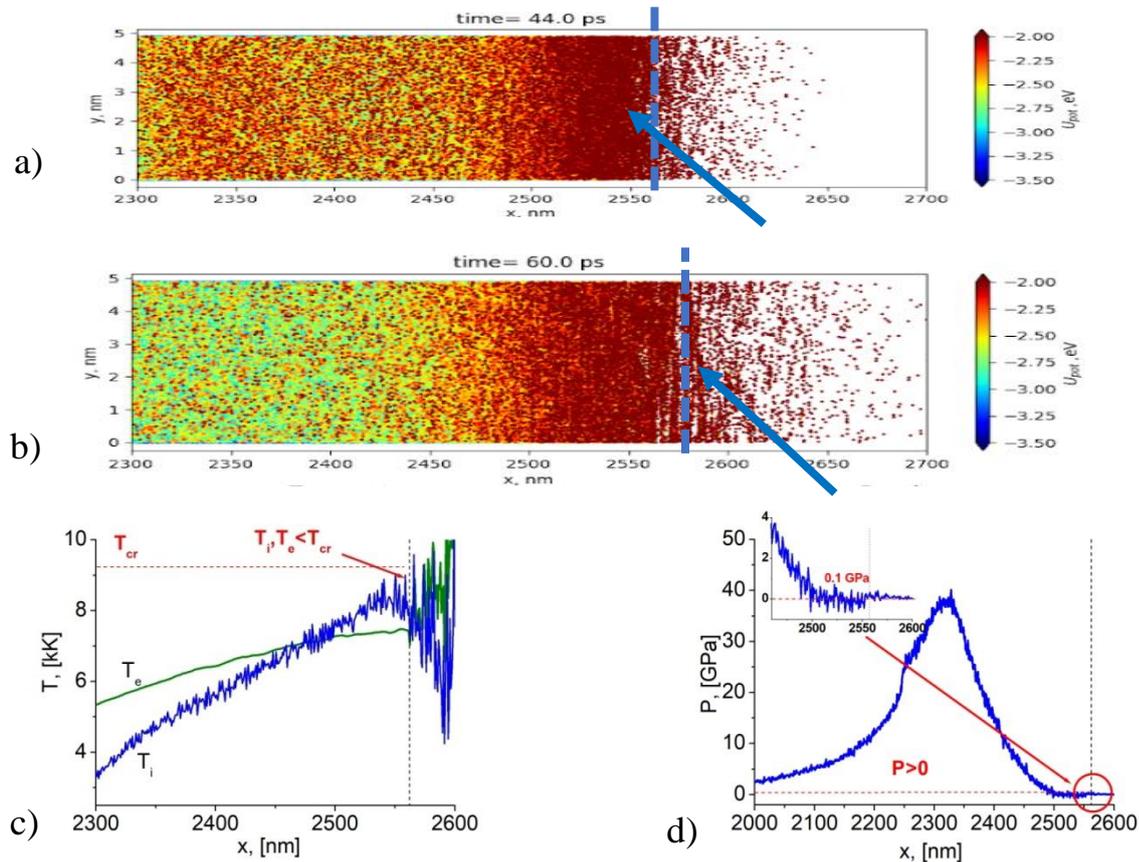


Рис.6. Фазовый взрыв (потенциал¹³). Пространственные профили: а) потока частиц (скриншот) на момент $t = 44$ пс, б) потока частиц (скриншот) на момент $t = 60$ пс; пространственные профили на момент $t = 44$ пс: с) температур T_e , T_i , д) давления P .

¹³ Khokhlov V.A., Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V. Formation of solitary microstructure and ablation into transparent dielectric by a subnanosecond laser pulse. // arXiv:1811.11990v1 [cond-mat.mes-hall], 2018, p.1-10. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1811.11990>

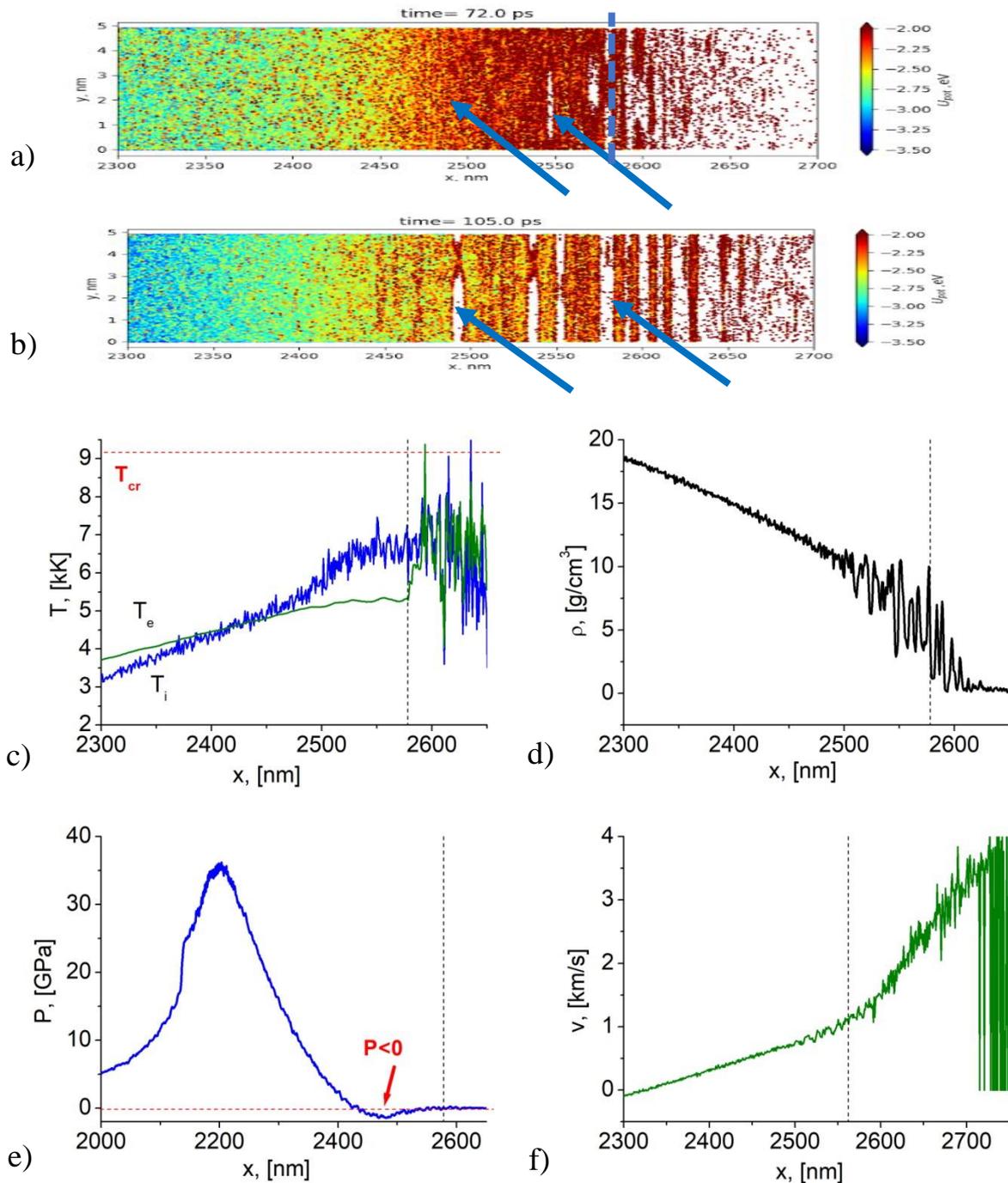


Рис.7. Механический откол (потенциал¹⁴). Пространственные профили: а) потока частиц (скриншот) на момент $t = 72$ пс, б) потока частиц (скриншот) на момент $t = 105$ пс; пространственные профили на момент $t = 72$ пс, с) температур T_e , T_i , д) плотности ρ , е) давления P , ф) скорости v .

На рисунке 8а представлена зависимость глубины абляции от времени для обоих потенциалов. Легко заметить, что основной вынос вещества происходит с

¹⁴ Khokhlov V.A., Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V. Formation of solitary microstructure and ablation into transparent dielectric by a subnanosecond laser pulse. // arXiv:1811.11990v1 [cond-mat.mes-hall], 2018, p.1-10. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1811.11990>

момента 70 пс, когда импульс и быстрые тепловые процессы закончились. Таким образом, 93,3% вещества откалывается за счет механического откола.

По результатам моделирования высокоскоростной лазерной абляции золота с использованием комбинированной континуально-атомистической модели с межчастичными потенциалами взаимодействия^{15,16} проведено исследование зависимости количества удаленного вещества от флюенса. Рассмотрена эффективность исследованных ранее механизмов абляции закритического разлета, фазового взрыва, и более медленного - механического откола. Результаты исследования представлены на рис.8б. На этом же рисунке представлена толщина отколотого вещества по результатам эксперимента¹⁷. На рисунке видно, что при флюенсе $F = 1 \text{ Дж/см}^2$ значение толщины отколотого вещества, полученного по результатам моделирования с потенциалом¹⁵ составляет 96 нм. Это значение практически совпадает со значением толщины отколотого вещества, полученного из эксперимента¹⁷, которое составляет 105 нм. Отличие составляет 8,5%. Заметим, что при том же флюенсе ($F = 1 \text{ Дж/см}^2$) по результатам моделирования с потенциалом¹⁶ отколов еще нет. При $F=1,1 \text{ Дж/см}^2$ для потенциала¹⁶ толщина отколотого вещества составила 87,9 нм. Затем с увеличением флюенса количество удаленного вещества для результатов с потенциалом¹⁶ ближе к экспериментальным значениям, чем для результатов с потенциалом¹⁵. При приближении к флюенсу $F = 3 \text{ Дж/см}^2$ толщина отколов по результатам с потенциалом¹⁶ отличается от экспериментальных данных на несколько процентов, в то время как толщина отколов по результатам с потенциалом¹⁵ значительно превышает как результаты с потенциалом¹⁶, так и результаты эксперимента¹⁷ (рис. 8).

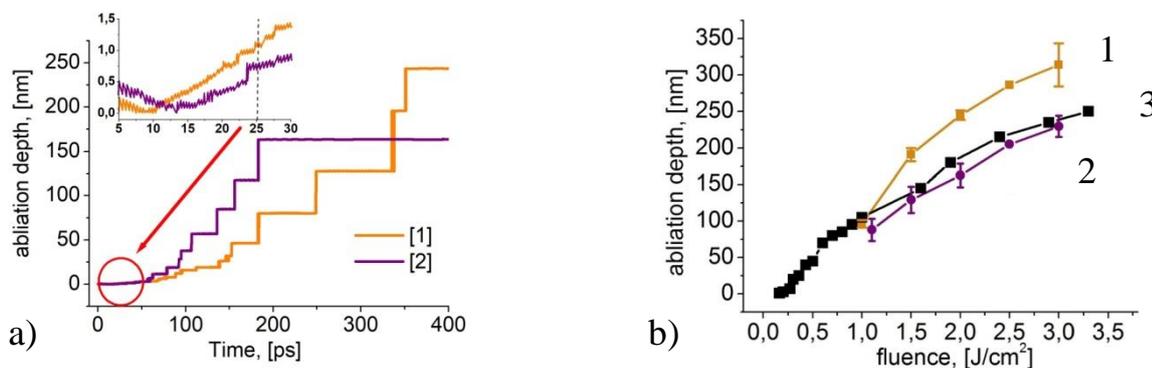


Рис. 8. а) Временные профили толщины удаленного вещества для $F = 2 \text{ Дж/см}^2$ для потенциалов 1-[15] и 2-[16]; б) количество удаленного вещества в зависимости от флюенса для: 1 – потенциал [15], 2 – потенциал [16] и из эксперимента [17].

¹⁵ 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 // Appl. Surf. Sci. Vol. 255, 2009, p.9592-9596. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2009.04.082>

¹⁶ Khokhlov V.A., Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V. Formation of solitary microstructure and ablation into transparent dielectric by a subnanosecond laser pulse. // arXiv:1811.11990v1 [cond-mat.mes-hall], 2018, p.1-10. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1811.11990>

¹⁷ Hermann J., Noël S., Itina T. E., Axente E., Povarnitsyn M. E. Correlation between Ablation Efficiency and Nanoparticle Generation during the Short-Pulse Laser Ablation of Metals. // Laser Physics. 2008. V. 18, No. 4, p. 374-379. <https://doi.org/10.1134/s11490-008-4002-6>

Глубина абляции в рассматриваемых режимах воздействия в основном зависит от режима механического откола, а он происходит при невысоких температурах, близких к температурам фазового перехода. Следовательно, потенциал¹⁸ лучше описывает процессы в веществе в этой области.

В заключении приведены основные результаты диссертационной работы.

Основные результаты

Основными результатами диссертационной работы, выносимыми на защиту, являются:

1. Впервые в широком диапазоне температуры $300\text{K} \leq T \leq 5700\text{K}$, включающем фазовый переход плавления-кристаллизации и околоскритическую область, и давления $0 \leq P \leq 100$ кбар методом молекулярной динамики определены следующие теплофизические и термодинамические характеристики меди и золота:
 - а) барические зависимости удельной теплоты плавления $L_m(P)$ и равновесной температуры плавления $T_m(P)$;
 - б) температурные зависимости энтальпии $H(T)$, удельной теплоемкости $C_p(T)$, плотности $\rho(T)$, линейного размера $\ell(T)$ и коэффициента линейного расширения $\alpha(T)$, теплопроводности $\lambda(T)$.
2. Впервые для выбранных потенциалов взаимодействия частиц для золота и меди молекулярно-динамическим моделированием получены параметры критических точек T_{cr} , ρ_{cr} , P_{cr} этих металлов.
3. Верификация и валидация результатов молекулярно-динамического моделирования показали, что используемые потенциалы взаимодействия позволяют описывать свойства металлов (Cu, Au) с допустимой погрешностью.
4. Была модифицирована односкоростная неравновесная двухтемпературная комбинированная континуально-атомистическая модель, что впервые позволило получить и проанализировать следующие механизмы ультракороткой лазерной абляции золота: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол и выявить основной механизм удаления вещества с поверхности.
5. Был разработан и добавлен в пакет LAMMPS программный модуль, расширяющий его возможности в реализации неявной разностной схемы с автоматическим выбором шага по времени для электронной температуры для комбинированной двухтемпературной модели. Также была произведена модификация существующего модуля “fix ave/chunk”, сохраняющего усредненные результаты в файлы, позволяющая

¹⁸ Khokhlov V.A., Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V. Formation of solitary microstructure and ablation into transparent dielectric by a subnanosecond laser pulse. // arXiv:1811.11990v1 [cond-mat.mes-hall], 2018, p.1-10. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1811.11990>

единообразно сохранять электронную температуру в файлы вместе с другими величинами для удобного построения графиков и видео.

6. Валидация результатов моделирования проводилась с применением двух различных потенциалов для золота и позволила определить потенциал, лучше согласующийся с экспериментальными данными по глубине абляции, в рассматриваемом режиме воздействия.

Публикации автора по теме диссертации:

1. Алексашкина А.А., Демин М.М., Мажукин В.И. Молекулярно-динамическое моделирование теплофизических свойств меди в окрестности точки плавления. Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. –2018. –№66. URL: doi:10.20948/prepr-2018-66(БАК)
2. Mazhukin V.I., Demin M.M., Aleksashkina A.A. Atomistic Modeling of Thermophysical Properties of Copper in the Region of the Melting Point. *Mathematica Montisnigri*. –2018. – Т. 41. – с. 73-90. URL: //doi.org/10.20948/mathmontis-2018-41-6(WoS)
3. Demin M.M., Koroleva O.N., Shapranov A.V., Aleksashkina A.A. Atomistic modeling of the critical region of copper using a liquid-vapor coexistence curve. *Mathematica Montisnigri*. – 2019. – Т.46. – с. 52-61. URL: //doi.org/10.20948/mathmontis-2019-46-6 (WoS)
4. Aleksashkina A.A., Demin M.M., Mazhukin V.I. Molecular dynamic calculation of lattice thermal conductivity of gold in the melting crystallization region. *Mathematica Montisnigri*. – 2019. – Т.46.– с. 106-122. URL: //doi.org/10.20948/mathmontis-2019-46-9 (WoS)
5. Demin M.M., Koroleva O.N., Aleksashkina A.A., Mazhukin V.I. Molecular-dynamic modeling of thermophysical properties of phonon subsystem of copper in wide temperature range. *Mathematica Montisnigri*. – 2020. – Т.47. – с. 137-151. URL: https://doi.org/10.20948/mathmontis-2020-47-12(WoS)
6. Демин М.М., Королева О.Н., Алексашкина А.А., Мажукин В.И. Атомистическое моделирование характеристик фононной подсистемы меди в широком температурном диапазоне. Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. – 2020. –№ 33. URL:https://doi.org/10.20948/prepr-2020-33(БАК)
7. Демин М.М., Алексашкина А.А., Королева О.Н. Атомистическое моделирование характеристик золота в области фазового перехода плавление–кристаллизация. Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. – 2020.– №1. URL: //doi.org/10.20948/prepr-2020-1(БАК)
8. Мажукин В.И., Королева О.Н., Демин М.М., Алексашкина А.А. Атомистическое моделирование параметров критической области золота с использованием кривой сосуществования жидкость–пар. Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. – 2021. – №83. URL:https://doi.org/10.20948/prepr-2021-83(БАК)

9. Мажукин В.И., Королева О.Н., Шапранов А.В., Алексашкина А.А., Демин М.М. Молекулярно-динамическое моделирование термического гистерезиса золота. Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша.– 2021. – №81. URL:<https://doi.org/10.20948/prepr-2021-81> (ВАК)
10. Алексашкина А.А. Молекулярно-динамическое моделирование теплофизических свойств золота. Ученые записки физического факультета МГУ. – 2022. – №1. (ВАК, WoS)
11. Мажукин В.И., Королева О.Н., Шапранов А.В., Демин М.М., Алексашкина А.А. Определение теплофизических свойств золота в области фазового перехода плавление-кристаллизация. Молекулярно-динамический подход. Математическое моделирование. – 2022. – Т.34, №1.–с.59-80. URL:<https://doi.org/10.20948/mm-2022-01-05> (Scopus, Q3).
12. Мажукин В.И., Королева О.Н., Демин М.М., Шапранов А.В., Алексашкина А.А. Атомистическое моделирование сосуществования фазовых состояний жидкость-пар для золота и определение критических параметров. Математическое моделирование. – 2022. – Т.34, №3.–с.101-116. URL:<https://doi.org/10.20948/mm-2022-03-06> (Scopus, Q3)
13. Мажукин В.И., Королева О.Н., Демин М.М., Алексашкина А.А. Неравновесные характеристики теплообмена меди в широком температурном диапазоне. Математическое моделирование. – 2022. –Т.34, №10. –с. 65-80. URL: <https://doi.org/10.20948/mm-2022-10-04> (Scopus, Q3)
14. Mazhukin V.I., Koroleva O.N., Shapranov A.V., Demin M.M., Aleksashkina A.A. Molecular dynamics study of the thermal hysteresis during melting-crystallization of noble metals. *Mathematica Montisnigri*. – 2022. – Т.53. – с. 90-99. URL: <https://doi.org/10.20948/mathmontis-2022-53-8> (MathSciNet)
15. Mazhukin V.I., Koroleva O.N., Demin M.M., Aleksashkina A.A. Atomistic modeling of the properties of gold in the region of phase transitions of the first order. *Mathematica Montisnigri*. – 2022. – Т.55. – с. 53-66. URL: <https://doi.org/10.20948/mathmontis-2022-55-6>(MathSciNet)
16. Mazhukin V.I., Koroleva O.N., Demin M.M., Aleksashkina A.A. Nonequilibrium Characteristics of Heat Transfer of Copper in a Wide Temperature Range. *Mathematical Models and Computer Simulations*. – 2023. – Т.15, No.3. – с. 415-426. URL:<https://doi.org/10.1134/S2070048223030110> (Scopus, Q3)
17. Алексашкина А.А., Мажукин В.И.. Молекулярно-динамическое исследование механизмов абляции золота под воздействием ультракоротких лазерных импульсов с использованием различных потенциалов. Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. – 2024. – №36 (ВАК)