

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 36 за 2024 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

А.А. Алексашкина, В.И. Мажукин

Молекулярно-динамическое исследование механизмов абляции золота под воздействием ультракоротких лазерных импульсов с использованием различных потенциалов

Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: 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. 30 с. <u>https://doi.org/10.20948/prepr-2024-36</u> <u>https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2024-36</u>

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В. Келдыша Российской академии наук

А.А. Алексашкина, В.И. Мажукин

Молекулярно-динамическое исследование механизмов абляции золота под воздействием ультракоротких лазерных импульсов с использованием различных потенциалов

А.А. Алексашкина, В.И. Мажукин

Молекулярно-динамическое исследование механизмов абляции золота под воздействием ультракоротких лазерных импульсов с использованием различных потенциалов

С помощью моделирования с использованием континуально-атомистической модели проведено исследование абляции при воздействии ультракороткого лазерного импульса на металл (Au). Исследованы три режима абляции: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол. Проведено сравнение результатов для двух ЕАМ потенциалов золота. Построен график зависимости количества удаленного вещества от флюенса лазерного излучения для двух потенциалов с последующим сравнением с данными эксперимента.

Ключевые слова: моделирование, ультракороткая лазерная абляция, золото

Anna Andreevna Aleksashkina, Vladimir Ivanovich Mazhukin

Molecular dynamics study of the mechanisms of gold ablation under the influence of ultrashort laser pulses using different potentials

Using simulation with a continuum-atomistic model, a study of ablation under the action of an ultrashort laser pulse on a metal (Au) was carried out. Three regimes of ablation were studied: supercritical expansion, phase explosion, and mechanical spallation. The results for two EAM potentials of gold are compared. A graph of the dependence of the amount of removed substance on the fluence of laser radiation for two potentials is constructed, followed by comparison with experimental data.

Key words: modeling, ultrashort laser ablation, gold

Результаты получены с использованием оборудования ЦКП ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (https://ckp.kiam.ru).

1. Введение

Ультракороткая лазерная абляция является наиболее олним ИЗ перспективных направлений развития широкого спектра приложений в различных областях, таких как материаловедение [1, 2], нанотехнологии [3-6], биомедицина [7, 8] и др. Большое значение для всех приложений имеет детальное исследование механизмов ультракороткой лазерной абляции материалов, в том числе металлов [6, 9, 10]. Из всех металлов золото является наиболее известным и широко используемым материалом в научных исследованиях [4], промышленном производстве [11] и, в последнее время, в проблемах биомедицины [7, 8]. Специфические особенности золота вызывают интерес не только в различных приложениях, но и большой фундаментальный – в связи с быстрым развитием новых наноразмерных материалов [12].

Исследования механизмов ультракороткой лазерной абляции золота (Au) представляют сложную проблему из-за большого разнообразия вовлеченных отличающихся пространственно-временной процессов, сильной разномасштабностью. В рамках экспериментальных [13] и теоретических [14, 15] исследований был изучен относительно узкий диапазон лазерного флюенса $F \approx 0.25 - 0.7 \ \text{Дж/см}^2$, 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 затруднено слишком короткими временными масштабами исследований протекающих процессов [16]. В силу указанных ограничений актуальным становится применение теоретических подходов, наиболее распространенным из которых является математическое моделирование [17, 18, 19]. Успешность математического моделирования во многом зависит от возможностей используемого математического аппарата. В его основу положены современные континуальные [20, 21] и атомистические [22-25] модели, численные методы [26,27] и вычислительные алгоритмы [28, 29]. В последнее время разработаны комбинированные континуально-атомистические модели [2, 24, 25], континуальных объединяющие достоинства 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. Особенностями воздействия ультракороткого сверхмощного лазерного излучения на металлы являются высокая скорость и объемный характер выделения энергии в электронной компоненте, приводящие к сильному отклонению от состояния локального термодинамического равновесия.

Целью данной работы является исследование механизмов ультракороткой лазерной абляции золотой мишени с помощью комбинированной континуально-атомистической модели [25]. В рассмотрение включены такие

механизмы лазерной абляции, как закритический разлет, фазовый взрыв, высокоскоростное плавление и механический откол жидкой и твердой фазы. В атомистическом моделировании важную роль играет используемый потенциал межчастичного взаимодействия, от которого зависит достоверность описания исследуемых процессов. В работе моделирование проводилось с двумя межатомными потенциалами «погруженного атома» ЕАМ, разработанными для золота в [30, 31]. Результаты моделирования сравнивались между собой и экспериментальными данными [32].

2. Постановка задачи

Постановка задачи лазерного воздействия на металл состоит в следующем: на поверхность металлической (Au) мишени, помещенной в вакуум, падает поток лазерного излучения гауссовской формы (рис. 1) по временной координате *t*, длиной волны λ , максимальной интенсивностью G₀ и длительностью τ . Часть излучения отражается поверхностью (0 < R < 1, R – коэффициент отражения). Оставшаяся доля излучения A = (1-R) поглощается электронной компонентой металла [33]. Особенности рассматриваемой проблемы определяются как режимом лазерного воздействия, так и свойствами облучаемого материала (металла).

Поглощенная часть энергии расходуется на нагрев, плавление и испарение образца, возникновения ударных волн и волн разгрузки, что в конечном результате приводит к удалению вещества с облучаемой и с тыльной сторон мишени.



Рис. 1. Временной профиль лазерного импульса $G = G_0 exp(-(t-t_0)/\tau)^2$

Особенность воздействия ультракороткого импульса состоит в том, что вначале вся поглощенная энергия в течение нескольких фемтосекунд выделяется в электронной компоненте. Затем посредством электрон-фононных столкновений в течение нескольких пикосекунд происходит перераспределение энергии от электронов к решетке. Перенос лазерной энергии в металлах происходит в основном через электронную подсистему кристалла. Электронный газ за счет высокой электронной теплопроводности осуществляет быстрый перенос поглощенной энергии ультракороткого лазерного импульса вглубь мишени, превращаясь в объемный источник энергии для ионов кристаллической решетки.

В итоге воздействие ультракороткого сверхмощного лазерного излучения на металлы характеризуется высокой скоростью выделения энергии в электронной компоненте, приводящей к сильному отклонению системы в целом от состояния локального термодинамического равновесия.

Неравновесная комбинированная континуальноатомистическая модель

В первых работах [34]–[36], посвящённых исследованию ультракороткого воздействия на металлы, лазерного использовавшаяся математическая постановка представляла собой комбинированную неравновесную модель, полученную путем сочетания континуальной двухтемпературной модели (TTM) [37], [38] с моделью классической молекулярной динамики (MD). Двухтемпературная модель (TTM) описывает временную эволюцию температур двух подсистем – электронной и решёточной – и состоит из двух связанных нелинейных уравнений теплопроводности. Атомистическая MD-модель предполагает, что все частицы удовлетворяют второму закону Ньютона (уравнения движения атомов) и взаимодействию с ближайшими соседями рассматриваемого иона.

На ранней стадии исследований [39]–[42] рассматривались умеренные режимы импульсного лазерного воздействия с достаточно большой временной шириной импульса ~ $(0.5 \div 200)$ пс, относительно невысокими значениями флюенса ~ $(2 \times 10^{-2} \div 0.3)$ Дж/см² и интенсивности ~ $(10^8 \div 10^{11})$ Вт/см². Для указанных режимов гибридная модель ТТМ-МD нашла успешное применение в моделировании различных явлений в металлических мишенях.

Двумя наиболее важными факторами, влияющими на результаты воздействия, являются ширина лазерного импульса и плотность энергии (флюенс) лазерного излучения. Уменьшение ширины лазерного импульса в диапазоне ~ (50 ÷ 200) фс при фиксированном значении флюенса сопровождается ростом пиковой температуры электронов и уменьшением времени, необходимого электронам для достижения пиковой температуры. Увеличение плотности энергии лазерного излучения в диапазоне ~ (1 ÷ 50) Дж/см² при фиксированном значении ширины лазерного импульса может приводить к существенному росту температур электронов T_e и решетки T_l .

область воздействия на Переход металлы сверхкороткими В И сверхмощными лазерными импульсами сопряжен с возникновением сильного вещества мишени. расширения В математическом моделировании экстремальных режимов лазерного воздействия учёт движения среды обязателен.

В широко известной и часто используемой TTM-MD модели [43]-[45] в ионной подсистеме в силу атомистического представления вещества движение среды учитывается естественным образом и представляется В виде гидродинамической скорости и. В электронной подсистеме учёт движения среды отсутствует, поскольку описание всех процессов ограничивается одним Учитывая нелинейной теплопроводности. уравнением использование односкоростного приближения, гидродинамическая скорость U должна фигурировать В обеих подсистемах TTM-MD модели. Отсутствие согласованности между подсистемами может приводить не только К электронейтральности системы, но и к нарушению нарушению закона энергии электронов. Достичь сохранения полной согласования между подсистемами модели можно посредством замены континуального уравнения теплопроводности уравнением полной энергии электронов, содержащего конвективное слагаемое $\partial(E_e u)/\partial x$ [25].

3.1. Математическая постановка

Математическая формулировка сверхбыстрого лазерного воздействия на металлическую мишень (Au), с некоторыми упрощениями, осуществлялась на односкоростной неравновесной комбинированной основе континуальноатомистической модели [25]. Разработанная модель состоит из двух подсистем. Первая – континуальная, используется для описания процессов в потоке коллективизированных электронов учётом переноса с вещества (1) – континуальное уравнение переноса лазерного И излучения Бугера-Ламберта). континуальное уравнение (2),(закон Вторая _ атомистическая, отображает поведение тяжелых частиц (ионов) В кристаллическом, жидком и парогазовом состоянии. Описание движения частиц осуществляется системой из 2N обыкновенных дифференциальных уравнений (3).

Полная постановка односкоростной неравновесной двухтемпературной комбинированной континуально-атомистической модели представлена в следующем виде:

$$\frac{\partial(E_e)}{\partial t} + \frac{\partial(E_e u)}{\partial x} = -\left(\frac{\partial W_e}{\partial x} + g(T_e)(T_e - T_i) + \frac{\partial G}{\partial x}\right),$$
(1)
$$\frac{\partial G}{\partial x} + \alpha(T_e)G = 0,$$
(2)
$$\begin{cases}
\frac{d\vec{r}_j}{dt} = \vec{v}_j \\
m\frac{d\vec{v}_j}{dt} = \vec{F}_j^{emb} + \vec{F}_j^{heat} & j = 1...N,
\end{cases}$$
(3)

где - $W_e = -\lambda_e(T_e, T_i) \cdot \partial T_i / \partial x$ – поток электронной энергии, $g(T_e)(T_e - T_i)$ – источник электрон-ионного энергообмена, \vec{F}_j^{emb} – сила межатомных взаимодействий, обеспечиваемых потенциалом погруженного атома (EAM) [30,31], $\vec{F}_j^{heat} = m_a(\vec{v}_j - \langle \vec{v} \rangle) g(T_e)(T_e - T_i)/3k_B T_i n_a$ – сила, обеспечивающая обмен тепловой энергией между электронной и ионной подсистемой,

Обозначения: t – время, E_e – объемная плотность электронной энергии, T_e , P_e – электронные температура и давление соответственно, $\lambda_e(T_e, T_i)$ – коэффициент теплопроводности электронов [46]; T_i – ионная температура, $g(T_e)$ – коэффициент электрон-ионного взаимодействия [47], $\vec{r_j}$, $\vec{v_j}$ – 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.

3.2. Расчетная область и граничные условия

Расчетная область для атомистической подсистемы (рис. 2) представляет собой параллелепипед, вытянутый вдоль оси X. Частицы образуют монокристалл с соответствующей кристаллической решеткой (ГЦК), где X, Y, Z обозначают кристаллографические направления [100], [010] и [001] соответственно. Расчётная область полностью заполнена частицами вдоль Y, Z-осей и частично вдоль оси X. По осям Y и Z размеры равны 5 нм, по оси X - 2500 нм. Полный размер области вдоль оси X больше размера образца на 500 нм. В данной области содержится порядка 3.5×10^6 частиц (N = 3 542 688), взаимодействующих между собой в двух вариантах расчета посредством ЕАМ-потенциалов, разработанных для золота [30, 31].



Рис. 2. Расчетная область в начальный момент времени

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 уравновешивается по ионной и электронной температуре до значений, $T_e = T_i = 300 \text{ K}$. Компоненты давления в направлениях Y и Z поддерживаются на нулевом уровне, $P_y = P_z = 0$.

В методе молекулярной динамики, применяемого для численного решения атомистической подсистемы (3), одной из наиболее весомых особенностей является выбор межатомного потенциала. В металлах в настоящее время, как правило, используются потенциалы погруженного атома (EAM), модели которых учитывают как парное взаимодействие, так и вклад плотности заряда электронов от ближайших соседей рассматриваемого атома. Один из используемых EAM-потенциалов [30] был ранее протестирован в работе [48] при определении теплофизических свойств и параметров критической точки золота.

Размер расчётной области для континуальной подсистемы полностью совпадает с размером атомистической подсистемы вдоль оси Х. Граничные условия для уравнения (1) задаются в виде потоков на концах отрезка (x_0 , x_r):

$$x = x_0: \qquad J_0(T_e, n_e) = -n_e \sqrt{\frac{3k_B T_e}{m_e}} k_B(T_e - T_0), \qquad (4)$$

$$x = x_r: \qquad J_r(T_e) = \sigma \cdot T_e^4. \tag{5}$$

В качестве источника энергии использовался ультракороткий лазерный импульс полушириной $\tau = 60$ фс на уровне 1/е (что соответствует ширине 100 фс на полувысоте), длиной волны $\lambda = 0.8$ мкм и флюенсом 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:

$$x = x_r$$
: $G = A \ G_0 \exp(-((t-t_0)/\tau)^2),$ (6)

где – А поглощательная способность облучаемой поверхности [33].

3.3. Алгоритм численного решения

Как уже отмечалось, в основу моделирования сверхбыстрого лазерного воздействия односкоростная металлическую мишень положена на неравновесная двухтемпературная комбинированная континуально-(1)-(3),атомистическая модель являющаяся модификацией ранее использовавшихся комбинированных моделей [40, 42, 44]. Основное отличие модифицированной модели состоит в учёте конвективного механизма переноса энергии в электронной подсистеме. Соответственно, основной вычислительной особенностью комбинированной модели (1)-(3)односкоростном В приближении $\partial(E_e u)/\partial x$ является наличие конвективного слагаемого В континуальном уравнении (1).

Гидродинамическая скорость *u*, характеризующая в уравнении (1) процесс переноса электронной энергии, определяется осреднением скоростей ионов в

каждой расчетной ячейке. Значение скорости при этом оказывается сильно флуктуирующей величиной, что затрудняет прямое численное решение уравнения (1). По этой причине численное решение континуального уравнения (1) потребовало применения метода расщепления по физическим процессам [49], позволяющего произвести выделение двух различных процессов переноса количества движения: конвективный и диффузионный. Для этого исходное дифференциальное уравнение (1) представляется в виде системы из двух уравнений

1. Этап диффузии:
$$\frac{\partial E_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) - g(T_e)(T_e - T_i) - \frac{\partial G_x}{\partial x}; \quad (7)$$

2. Этап конвекции:
$$\frac{\partial E_e}{\partial t} + \frac{\partial (E_e u)}{\partial x} = 0. \quad (8)$$

Численное решение системы (7), (8) на каждом шаге по времени состоит из двух этапов. На первом этапе диффузии (теплопроводности) уравнение (7) аппроксимируется явно-неявной конечно-разностной схемой Кранка-Николсона по пространственной и временной переменной (x_i, t^j) . Численное решение конечно-разностных уравнений осуществлялось итерационным методом Ньютона. Положения атомов и соответственно концентрации электронов при этом считались замороженными.

На втором этапе алгоритм предусматривает совершение шага по времени с молекулярной динамики. Решалась система обыкновенных помощью дифференциальных уравнений (3)с схемы Верле [50]. помощью Моделирование проводилось с помощью пакета молекулярной динамики LAMMPS [51], в котором реализована поддержка выбранных потенциалов [30, 31].

На рис. 3 приведена блок-схема, демонстрирующая реализацию вычислительного алгоритма на одном молекулярно-динамическом шаге по времени Δt_{MD} .

Красным пунктирным прямоугольником отмечен блок вычисления электронной энергии. Молекулярно-динамический блок заключен в зеленый пунктирный прямоугольник.

Расчетная область, содержащая молекулярно-динамические частицы (ионы), разбивается плоскостями, перпендикулярными оси X, на ячейки. Расстояние между плоскостями Δx одинаковое. Характерный размер Δx равен 2÷2.5 периодам решетки (в случае моделирования кристалла). Точки пересечения с осью X образуют эйлерову расчетную сетку для численного решения уравнения (4). Сеточные функции относятся к серединам расчетных ячеек. В дальнейшем будем нумеровать ячейки индексом [*j*] сверху в квадратных скобках (чтобы не путать со степенью).

Элементы блок-схемы голубого цвета реализуют первый этап алгоритма: численное решение уравнения (7) с использованием неявной разностной схемы

Кранка-Николсона на эйлеровой пространственной сетке. Здесь используется локальное время $t_{loc} \in [0, \Delta t_{MD}]$. Величина шага интегрирования δt_{loc} регулируется сходимостью ньютоновского итерационного процесса со следующим важным дополнительным условием. Пусть в некоторый момент времени $0 \le t_{loc} < \Delta t_{MD}$ возникла необходимость изменить шаг интегрирования δt_{loc} . Тогда он меняется таким образом, чтобы на оставшемся интервале времени ($\Delta t_{MD} - t_{loc}$) укладывалось целое число новых шагов δt_{loc} .

Выходными значениям численного решения (7) являются сеточные функции $E_e^{[j]}$ – объемная плотность электронной энергии на момент $t_{loc} = \Delta t_{MD}$ и $Q_{ei}^{[j]}$ – количество энергии на единицу объема, которое электронная подсистема должна передать/забрать (в зависимости от знака) у ионной подсистемы за молекулярно-динамический шаг Δt_{MD} . Как уже указывалось выше, положения ионов при выполнении данного этапа считаются замороженными.

Элементы блок-схемы зеленого цвета представляют собой блоки сопряжения с молекулярно-динамическим блоком.

Элемент, помеченный римской I, реализует пересчет скоростей ионов в каждой ячейке по формуле:

$$\vec{\upsilon}_{n}^{*} = \vec{\upsilon}_{n} + (\vec{\upsilon}_{n} - \vec{\upsilon}_{mid}^{[j]}) \left[\sqrt{\frac{1 + \frac{Q_{ei}^{[j]} V_{cell}}{\sum_{n=1}^{N^{[j]}} 0.5m(\vec{\upsilon}_{n} - \vec{\upsilon}_{mid}^{[j]})^{2}}} - 1 \right].$$
(9)

Здесь \vec{v}_n, \vec{v}_n^* – исходное и скорректированное значения скорости иона с номером *n* в ячейке, $N^{[j]}$ – количество ионов в ячейке, *m* – масса иона, V_{cell} – объем ячейки, $\vec{v}_{mid}^{[j]} = \frac{1}{N^{[j]}} \sum_{n=1}^{N^{[j]}} \vec{v}_n$ – средняя скорость по всем ионам ячейки.

Такой способ пересчета обеспечивает, с одной стороны, неизменность средней скорости $\vec{v}_{mid}^{[j]}$ в каждой ячейке, с другой стороны – изменяет кинетическую энергию ионов строго в соответствии с $Q_{ei}^{[j]}$. Т.е. изменяется только тепловая энергия ионов, и при этом не нарушается максвелловское распределение по скоростям.

Теперь новые значения скоростей \vec{v}_n^* будут начальным условием для выполнения молекулярно-динамического шага. Элемент, помеченный римской II, подготавливает второй этап решения исходного уравнения (1) путем расщепления по процессам – конвективный перенос электронной энергии (8). Для этого за каждым ионом в *j*-ячейке закрепляется значение электронной энергии, равное $(E_e^{[j]}V_{cell})/N^{[j]}$.

Далее выполняется молекулярно-динамический шаг – блок в зеленом пунктирном прямоугольнике. С помощью схемы Верле рассчитываются смещения ионов и изменения их скоростей за счет сил погруженного атома.



Рис. 3. Вычислительная блок-схема комбинированной двухтемпературной модели

При этом часть ионов пересекает границы ячеек, перенося с собой закрепленную за ними электронную энергию. Очевидно, усредненная скорость ионов в районе границ ячеек является гидродинамической скоростью *и* переноса (8) электронной энергии.

Таким образом, если теперь просуммировать по новому составу ионов в каждой ячейке закрепленную за ними электронную энергию и разделить на объем ячейки V_{cell} , то получим новую сеточную функцию $E_e^{[j]}$ уже с учетом конвективного переноса (8), что и завершит второй этап решения путем расщепления по процессам.

Такое суммирование и выполняется в элементе блок-схемы, помеченном римской цифрой III, который подготавливает необходимые сеточные функции для численного решения (7) на первом этапе.

Применяемый метод решения уравнения (8) фактически является аналогом метода «частиц в ячейке» решения дифференциальных уравнений (Particle-in-Cell, PiC).

3.4. Программная реализация

Описанный алгоритм был реализован как модуль (типа «fix») для пакета LAMMPS (версия от 31 марта 2017 года). В этом модуле на первом этапе (подготовка одномерных сеточных функций) и в конце (при распределении электронной энергии и пересчете скоростей теплового движения) применялось распараллеливание с использованием технологии MPI.

При моделировании отколов в расчетной области возникают пустоты. Поэтому при решении одномерных уравнений (1) и (2) вся расчетная область автоматически разбивалась на подобласти, в которых отдельно решалось уравнение теплопроводности и уравнение переноса лазерного излучения. Границы этих подобластей определялись по достижению 1/10 от максимальной плотности вещества. То есть области, где плотность меньше этого значения, считались пустотами, и в них уравнения не решались.

Выходными данными из описанного модуля расчета электронной температуры являются атомный массив электронной энергии, который затем передается в модуль усреднения по пространству «fix ave/chunk». Этот модуль был также модифицирован для более удобного сохранения данных в файлы. В стандартном пакете LAMMPS все данные сохраняются в виде одного большого файла, который может достигать размера несколько гигабайт, что не очень удобно для обработки и построения графиков. Поэтому модуль «fix ave/chunk» был модифицирован так, что он стал сохранять отдельно каждую величину и на каждый момент времени в отдельные файлы.

В пакете LAMMPS (версия от 31 марта 2017 г.) было два варианта модуля расчета электронной температуры. В них было реализовано трехмерное уравнение энергии, но в одном варианте – с постоянными коэффициентами, а в другой – с фиксированной формой зависимости коэффициентов от

температуры. Также в LAMMPS решение осуществлялось по явной схеме с очень мелким внутренним шагом. Кроме того, не была предусмотрена возможность усреднения и сохранения в файлы электронной температуры на выходе из блока ее расчета единообразно с остальными пространственными переменными. В данной работе в разработанном авторами модуле произвольной нелинейной коэффициенты могут быть любой формы, разностная схема при этом неявная с автоматическим изменением шага по времени, и все выходные данные усредняются и сохраняются единообразно и удобно для последующей обработки и построения графиков и видео.

4. Результаты моделирования

4.1. Механизмы отколов

Целью представленного исследования являлось исследование основных механизмов высокоскоростной абляции золотой мишени, к которым относятся: закритический разлет, фазовый взрыв, механический откол.

Закритический разлет и фазовый взрыв (взрывное вскипание) возникают в околокритической 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).

Механический откол относится к механизмам, у которых полость зарождается и развивается в области отрицательных давлений, которые могут возникать:

а) при выходе сильной ударной волны (волны сжатия) на свободную поверхность;

б) при непосредственном воздействии на поверхность ультракороткого (фс, пс) лазерного импульса, обеспечивающего в зоне откола большие величины отрицательного давления. Расширение полости и отлет приповерхностного слоя материала происходит за счет сил инерции.

Результаты моделирования ультракороткого лазерного воздействия на золотую мишень средствами комбинированной континуально-атомистической модели в односкоростном двухтемпературном приближении (1)-(3) с двумя межатомными потенциалами «погруженного атома» EAM [30, 31] представлены на рис. 4-12.

4.2. Закритический разлет

На рис. 4 приведены результаты моделирования для потенциала [31] в момент времени t = 12 пс. Динамика процесса абляции представлена после момента времени t = 0.1 пс, то есть развитие процесса абляции представлено после окончания лазерного импульса $t > \tau$. На рис. 4 вертикальной пунктирной

линией обозначена граница между конденсированной средой и паром. Видно, что температура решетки на поверхности уже увеличилась до $T_i \sim 13\ 000$ К, что значительно превышает критическую температуру для потенциала [31] ($T_{cr} = 9250$ К).



Рис. 4. Закритический разлет (потенциал [31]). Пространственные профили на момент t = 12 пс: а) потока частиц (скриншот), b) температур T_e , T_i , с) плотности ρ , d) давления P, е) скорости v

В приповерхностной области возникает гомогенное разрушение решетки, и частицы, находящиеся у границы образца, имеющие высокую температуру, начинают вылетать с поверхности вещества. Описанный механизм удаления частиц представляет закритический разлет, его можно заметить на графике пространственного распределения частиц, рис. 4а. Пространственные зависимости основных параметров вещества вблизи границы: температур T_e , T_i , плотности ρ , давления P и скорости v представлены на рис. 4b-е. На графике плотности ρ (рис. 4c) видно, что при приближении к границе между конденсированной средой и паром плотность вещества падает.

При этом наблюдается плавный переход вещества из конденсированной фазы в пар. Левее точки 2400 нм вещество в твердой фазе, потом правее жидкость и примерно при 2515 нм видна условная граница образца, справа от нее вылетевшие частицы.

В алгоритме расчета уравнения электронной энергии (1) граница конденсированной фазы определяется как точка достижения 1/10 от максимальной плотности. 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.

Удаление вещества с поверхности металла при температуре решетки выше критической $T_i > T_{cr}$ (закритический разлет) аналогично происходит при моделировании с использованием потенциала [30]. Критическая температура для этого потенциала составляет $T_{cr} = 7050$ К. Результаты моделирования в момент времени t = 20 пс представлены на рис. 5. Как и в случае использования потенциала [31], динамика процесса абляции представлена после окончания лазерного импульса $t > \tau$. Однако нагрев выше критической точки происходит немного медленнее, за t = 20 пс (t = 12 пс для потенциала [31]). На рис. 5а именно в этот момент времени становится заметным отделение частиц с поверхности. Температура решетки на границе вещества (вертикальная пунктирная линия на рис. 5b) намного выше критической $T_i > T_{cr} \sim 11000$ К. Давление на границе образца (2530 нм) составляет $P \approx 0.5$ Гпа (рис. 5d). Скорость вылетающих с поверхности вещества частиц $v \approx 1.9$ км/с (на границе вещества, рис. 5e).



Рис. 5. Закритический разлет (потенциал [30]). Пространственные профили на момент t = 20 пс: а) потока частиц (скриншот), b) температур T_e , T_i , с) плотности ρ , d) давления P, е) скорости v

По мере охлаждения мишени вещество вблизи поверхности переходит из закритической области в докритическую, т.е. в область другого механизма удаления вещества – фазового взрыва. Результаты моделирования фазового взрыва с потенциалом «погруженного атома» ЕАМ [31] представлены на рис. 6a-f, с потенциалом [30] – на рис. 7a-f. На скриншотах рис. 6a, b в пространственном представлении демонстрируется динамика фазового взрыва в два момента времени: t = 44 пс и t = 60 пс, после окончания лазерного импульса $t > \tau$. В момент времени t = 44 пс ионная температура (рис. 6c) достаточно высока $T_i \sim 8500$ К, но немного ниже критической $T_i < T_{crit}$, давление на границе положительное P > 0 (рис. 6е). Механизм фазового взрыва характеризуется взрывным испарением и выбросом с поверхности мишени частиц большего размера, чем при механизме закритического разлета. На графике пространственного распределения частиц в момент времени t = 60 пс (рис. 6b) можно заметить, что начинают появляться полости в веществе, которые в дальнейшем приводят к отделению вещества в этом месте, образец расширяется, скорость частиц на границе вещества $v \approx 1.7$ км/с (рис. 6f), давление $P \approx 0.1$ ГПа (рис. 6е).

На рис. 7а-f демонстрируются результаты моделирования фазового взрыва с потенциалом [30]. Процесс для потока частиц представлен для двух моментов времени t = 60 пс и t = 80 пс, после окончания лазерного импульса $t > \tau$. Результаты моделирования с потенциалом [30] дают результаты, подобные результатам моделирования с потенциалом [31]. Немного позже, через t = 60 пс (рис. 7а) после начала действия импульса в образце начинают появляться пустоты. На рис. 7а и 7b пространственного распределения потока частиц возникающие пустоты отмечены стрелками. Эти пустоты затем приводят к отделению вещества в указанных местах (время t = 80 пс). Давление на границе вещества $P \approx 0$ ГПа (рис. 7е), скорость вылетающих с поверхности вещества частиц $v \approx 1.7$ км/с (рис. 7f).

Описанные выше механизмы абляции – закритический разлет и фазовый взрыв – являются важными явлениями лазерной абляции. Закритический разлет приводит к образованию мелких наночастиц, а фазовый взрыв – чуть более крупных. Понимание этих процессов важно для управления характеристиками удаляемого вещества в процессе генерации наночастиц.



Рис. 6. Фазовый взрыв (потенциал [31]). Пространственные профили: а) потока частиц (скриншот) на момент t = 44 пс, b) потока частиц (скриншот) на момент t = 60 пс; пространственные профили на момент t = 44 пс, c) температур T_e , T_i , d) плотности ρ , e) давления P, f) скорости v

18



Рис. 7. Фазовый взрыв (потенциал [30]). Пространственные профили: а) потока частиц (скриншот) на момент t = 60 пс, b) потока частиц (скриншот) на момент t = 80 пс; пространственные профили на момент t = 60 пс, c) температур T_e , T_i , d) плотности ρ , e) давления *P*, f) скорости *v*

19

4.4. Механический откол

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. Это волна отрицательного давления P < 0, которая при превышении предела прочности материала вызывает отколы вещества. Механический откол может возникать в твердой и жидкой фазе. Результаты моделирования представлены на рис. 8 для потенциала [31] и на рис. 9 для потенциала [30]. По результатам моделирования с обоими потенциалами механический откол возникает только в жидкости, т.к. порог откола (по абсолютной величине отрицательного давления) в твердой фазе выше, чем в жидкости, и он не достигается при рассматриваемом режиме лазерного воздействия.

Для потенциала [31] в момент времени t = 72 пс на графике давления P (рис. 8е) видна волна отрицательного давления (волна разгрузки). Стрелками указаны те места с отрицательным давлением на графике пространственного распределения частиц (рис. 8а) и на графике давления (рис. 8е), где впоследствии возникают отколы (рис. 9b). 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. 8f).

Аналогично при расчетах с потенциалом [30] на графике давления P (рис. 9е) видна волна отрицательного давления, которая приводит к образованию полости в веществе. В момент времени t = 90 пс в отмеченных стрелками местах давление отрицательно P < 0. В момент t = 160 пс в этих местах образовались пустоты, которые еще чуть позже приведут к отколам крупных фрагментов вещества, скорость вылетающих с поверхности фрагментов $v \approx 1.2$ км/с (рис. 9f).

Следовательно, при моделировании с обоими потенциалами [30, 31], при воздействии лазерного импульса на металл возникает последовательность таких механизмов абляции, как закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол с небольшим запаздыванием $\approx 20-60$ пс при использовании потенциала [30].

Эти процессы приводят к образованию фрагментов вещества различного размера, от одиночных атомов до небольших наноразмерных фрагментов. Если при закритическом разлете скорость вылетающих частиц более 1.8–1.9 км/с, то при механическом отколе скорость снижается и становится в зависимости от потенциала 1.1–1.2 км/с. Таким образом, моделирование с обоими потенциалами показало, что при отколах за счет волны отрицательного давления частицы отделяются с меньшей скоростью.



Рис. 8. Механический откол (потенциал [31]). Пространственные профили: а) потока частиц (скриншот) на момент t = 72 пс, b) потока частиц (скриншот) на момент t = 105 пс; пространственные профили на момент t = 72 пс, с) температур T_e , T_i , d) плотности ρ , e) давления *P*, f) скорости *v*



Рис. 9. Механический откол (потенциал [30]). Пространственные профили: а) потока частиц (скриншот) на момент t = 95 пс, b) потока частиц (скриншот) на момент t = 160 пс; пространственные профили на момент t = 95 пс, с) температур T_{e} , T_{i} , d) плотности ρ , e) давления *P*, f) скорости *v*

По результатам моделирования высокоскоростной лазерной абляции золота с использованием комбинированной континуально-атомистической модели с межчастичными потенциалами взаимодействия [30, 31] 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. 10, 11, 12.

На рис. 10а, b представлены временные зависимости ионной T_e и электронной T_i температур. Из рисунков видно, что температуры уравниваются в момент $t \approx 25$ пс при моделировании с обоими потенциалами [30, 31]. Выравнивание температур происходит после закритического разлета, начало которого для потенциала [31] отмечается в t = 12 пс (рис. 4), а для потенциала [30] – в t = 20 пс.



Рис. 10. Временные профили электронной и ионной температур на поверхности мишени для потенциалов а) [30] и b) [31]

На рис. 11 представлены временные зависимости основного выноса вещества, полученные по результатам моделирования с потенциалами [30] и [31]. Вынос вещества в обоих случаях происходит с момента $t \approx 70$ пс. В этот момент уже закончились и импульс $t > \tau$, и быстрые тепловые процессы. Всё дальнейшее удаление вещества происходит уже за счет механического откола. Из представленной временной зависимости толщины отколотого вещества для результатов моделирования с потенциалом [30] (рис. 12) можно видеть, что за время t = 25 пс толщина откола составила ~ 1.1 нм, что составляет 0.4% от общего количества отколовшегося вещества. Для результатов с потенциалом [31] за t = 25 пс толщина откола составила ~ 0.7 нм, что также составляет 0.4% от всего количества вещества, отколовшегося под воздействием лазерного излучения.

Следовательно, основной вынос вещества с поверхности металла при лазерной абляции происходит за счет механизма механического откола.



Рис. 11. Временные профили толщины удаленного вещества для $F = 2 \text{ Дж/см}^2$ для потенциалов 1-[30] и 2-[31]



Рис. 12. Зависимости толщины удаленного вещества от флюенса для потенциалов 1 - [30], 2 - [31], 3 - результаты эксперимента [32].

Расчеты толщины удаленного вещества проводились с обоими потенциалами взаимодействия для разных значений флюенса *F* лазерного импульса. Полученные по результатам моделирования зависимости представлены на рис. 11. На этом же рисунке представлена толщина отколотого

вещества по результатам эксперимента [32]. На рисунке видно, что при флюенсе F = 1 Дж/см² значение толщины отколотого вещества, полученного по результатам моделирования с потенциалом [30] составляет 96 нм. Это значение толщины практически совпадает co значением отколотого вешества. полученного из эксперимента [32], которое составляет 105 нм. Отличие составляет 8.5%. Заметим, что при том же флюенсе ($F = 1 \ \text{Дж/см}^2$) по результатам моделирования с потенциалом [31] отколов еще нет. При F=1.1 Дж/см² для потенциала [31] толщина отколотого вещества составила 87.9 нм. Затем с увеличением флюенса количество удаленного вещества для результатов с потенциалом [31] ближе к экспериментальным значениям, чем для результатов с потенциалом [30]. При приближении к флюенсу F = 3 Дж/см² толщина отколов по результатам с потенциалом [31] отличается от экспериментальных данных на несколько процентов, в то время как толщина отколов по результатам с потенциалом [31] значительно превышает как результаты с потенциалом [31], так и результаты эксперимента [32] (рис. 12).

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, потенциал [31] лучше описывает процессы в веществе в этой области.

5. Заключение

1. В работе с помощью комбинированной континуально-атомистической односкоростной двухтемпературной модели проведено исследование происходящих процессов, при воздействии на мишень ИЗ золота ультракоротким лазерным импульсом длительностью $\tau = 0.1$ пс и с флюенсом F= 2 Дж/см². С помощью моделирования было получено и проанализировано несколько механизмов высокоскоростной абляции: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол.

2. В рассматриваемом режиме при субпикосекундной длительности импульса значительная часть аблированного вещества, а именно 93.3%, удаляется при механическом отколе, и 6.7% от всей глубины абляции приходится на механизмы закритического разлета и фазового взрыва.

3. Проведено сравнение глубины абляции в зависимости от флюенса при моделировании с использованием потенциалов [30] и [31] и экспериментальных данных [32]. Показано, что потенциал [31] лучше согласуется с экспериментом по глубине абляции в рассматриваемых режимах.

Расширены возможности пакета LAMMPS: 4. 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.

Библиографический список

1. Meyers M.A., Mishra A., Benson D.J. Mechanical properties of nanocrystalline materials // Prog. Mater. Sci., 2006, v. 51, №4, pp. 427–556. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2005.08.003.

2. Ivanov D.S., Terekhin P.N., Kudryashov S.I., Klimentov S.M., Kabashin A.V., Garcia M.E., Rethfeld B., Zavestovskaya I.N. The Atomistic Perspective of Nanoscale Laser Ablation // Ultrafast Laser Nanostructuring, Stoian, R., Bonse, J. (eds), Springer Series in Optical Sciences, vol. 239, Springer, Cham, 2023. DOI: 10.1007/978-3-031-14752-4_2.

3. Zhang Z., Xu Z., Wang C., Liu S., Yang Z., Zhang Q., Xu W. Molecular dynamics-guided quality improvement in the femtosecond laser percussion drilling of microholes using a two-stage pulse energy process // Opt. Laser Technol., 2021, v. 139. DOI: 10.1016/j.optlastec.2021.106968.

4. Shafeev G.A., Rakov I.I., Ayyyzhy K.O., Mikhailova G.N., Troitskii A.V., Uvarov O.V. Generation of Au nanorods by laser ablation in liquid and their further elongation in external magnetic field // Appl. Surf. Sci., 2019, v. 466, pp. 477–482. DOI: 10.1016/j.apsusc.2018.10.062.

5. Chichkov B. Laser printing: trends and perspectives // Appl. Phys. A, 2022, v. 128, 1015 p. DOI: 10.1007/s00339-022-06158-9.

6. Li X., Guan Y. Theoretical fundamentals of short pulse laser-metal interaction: A review // Nanotechnol. Precis. Eng., 2020, v. 3, pp. 105-125. DOI:10.1016/j.npe.2020.08.

7. Nejati K., Dadashpour M., Gharibi T., Mellatyar H., Akbarzadeh A. Biomedical Applications of Functionalized Gold Nanoparticles: A Review // J. Clust. Sci., 2022, v.33, pp. 1–16. DOI: 10.1007/s10876-020-01955-9.

8. Elahi N., Kamali M., Baghersad M.H. Recent biomedical applications of gold nanoparticles: A review // Talanta, 2018, v. 184, pp. 537–556. DOI: 10.1016/j.talanta.2018.02.088.

9. Mazhukin V.I., Mazhukin A.V., Lobok M.G. Comparison of Nano- and Femtosecond Laser Ablation of Aluminium // Las. Phys., 2009, v. 19, №5, pp. 1169–1178. DOI: 10.1134/S1054660X0905048X.

10. Mazhukin A.V., Mazhukin V.I., Demin M.M. Modeling of femtosecond laser ablation of Al film by laser pulses // Appl. Surf. Sci., 2011, №257, pp. 5443–5446. DOI:10.1016/j.apsusc.2010.11.154.

11. Jendrzej S., Gökce B., Epple M., Barcikowski S. How Size Determines the Value of Gold - Economic Aspects of Wet Chemical and Laser-Based Metal Colloid Synthesis // Chem. Phys. Chem., 2017, v. 18, pp. 1–9. DOI: 10.1002/cphc.201601139.

12. Barcikovski S., Hahn A., Kabashin A.V., Chichkov B.N. Properties of nanoparticles generated during femtosecond laser machining in air and water // Appl. Phys. A, 2007, v. 87, №1, pp. 47–55. DOI: 10.1007/s00339-006-3852-1.

13. Pflug T., Wang J., Olbrich M., Frank M., Horn A. Case study on the dynamics of ultrafast laser heating and ablation of gold thin films by ultrafast pump-probe reflectometry and ellipsometry // Appl. Phys. A, 2018, v. 124, №2, pp. 1–7. DOI: 10.1007/s00339-018-1550-4.

14. Ashitkov S.I., Komarov P.S., Zhakhovsky V.V., Petrov Y.V., Khokhlov V.A., Yurkevich A.A., and all. Ablation of gold irradiated by femtosecond laser pulse: Experiment and modeling // Journal of Physics: Conference Series, 2016, 774, 012097. DOI: 10.1088/1742-6596/774/1/012097.

15. Yao J., Qi D., Liang H., He Y., Yao Y., Jia T., Yang Y., Sun Z., Zhang S. Exploring femtosecond laser ablation by snapshot ultrafast imaging and molecular dynamics simulation // Ultrafast Science, 2022, v. 2022, Article ID 9754131, pp. 1–11. DOI: 10.34133/2022/9754131.

16. Parris G., Goel S., Nguyen D.T., Buckeridge J, Zhou X. A critical review of the developments in molecular dynamics simulations to study femtosecond laser ablation // Mater. Today Proc., 2022, v. 64, №3, pp. 1339–1348. DOI: 10.1016/j.matpr.2022.03.723.

17. Mazhukin V.I., Demin M.M., Shapranov A.V. High-speed laser ablation of metal with pico- and subpicosecond pulses // Appl. Surf. Sci., 2014, v. 302, pp. 6–10. DOI: 10.1016/j.apsusc.2014.01.111.

18. Jia X., Zhao X. Numerical study of material decomposition in ultrafast laser interaction with metals // App. Surf. Sci., 2019, v. 463, pp. 781–790. DOI: 10.1016/j.apsusc.2018.08.225.

19. Fang R., Wei H., Li Z., & Zhang D. Improved two-temperature model including electron density of states effects for Au during femtosecond laser pulses // Solid State Communications, 2012, v. 152, №2, pp. 108–111. DOI:10.1016/j.ssc.2011.10.031.

20. Mazhukin V.I. Kinetics and Dynamics of Phase Transformations in Metals Under Action of Ultra-Short High-Power Laser Pulses // Laser Pulses–Theory, Technology, and Applications, InTech, Croatia, 2012.

21. Mazhukin V.I., Demin M.M., Shapranov A.V., & Mazhukin A.V. Role of electron pressure in the problem of femtosecond laser action on metals // Appl. Surf. Sci., 2020, v. 530, 147227. DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.147227.

22. Yuan, W., Sizyuk, T. Ablation study in gold irradiated by single femtosecond laser pulse with electron temperature dependent interatomic potential and electron - phonon coupling factor // Las. Phys., 2021, v. 31, №3, 036002. DOI: 10.1088/1555-6611/abdcb8.

23. Norman G.E., Starikov S.V. & Stegailov V.V. Atomistic simulation of laser ablation of gold: Effect of pressure relaxation // J. Exp. Theor. Phys., 2012, v. 114, pp. 792–800. DOI: 10.1134/S1063776112040115.

24. Fokin V.B., Povarnitsyn M.E., & Levashov P.R. Simulation of ablation and plume dynamics under femtosecond double-pulse laser irradiation of aluminum: Comparison of atomistic and continual approaches // Appl. Surf. Sci., 2017, v. 396, pp. 1802–1807. DOI: 10.1016/j.apsusc.2016.11.208.

25. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Demin M.M., Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Visualization analysis of the results of continual-atomistic modeling of a Coulomb explosion in metals under the influence of ultrashort (fs, ps) laser exposure // Sci. Vis., 2023, v. 15, №1, pp. 112-126. DOI: 10.26583/sv.15.1.10.

26. Mazhukin A.V., Mazhukin V.I. Dynamic Adaptation for Parabolic Equations // Comp. Math. Math. Phys., 2007, v. 47, №11, pp. 1833–1855. DOI: 10.1134/S0965542507110097.

27. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Samokhin A.A., Ivochkin A.Yu. Mathematical modeling of non-equilibrium phase transition in rapidly heated thin liquid film // Math. Montis., 2013, v. 27, pp. 65–90. URL: https://www.montis.pmf.ac.me/allissues/27/Mathematica-Montisnigri-27-5.pdf.

28. Mazhukin V.I., Mazhukin A.V., Demin M.M., Shapranov A.V. Nanosecond laser ablation of target Al in a gaseous medium: explosive boiling // Appl. Phys. A, 2018, v. 124, №3, 237(1-10). DOI: 10.1007/s00339-018-1663-9.

29. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Gostevskaya A.N. et al. Modeling by a Molecular Dynamics Method of Structural Changes of a BCC Metal Surface Layer with Short-Term High-Energy External Action // Met. Sci. Heat. Treat., 2022, v. 64, pp. 258–263. DOI: 10.1007/s11041-022-00796-9.

30. 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., 2009, v. 255, pp. 9592–9596. DOI: 10.1016/j.apsusc.2009.04.082.

31. 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, pp. 1–10. DOI: 10.48550/arXiv.1811.11990.

32. 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 // Las. Phys., 2008, v. 18, <u>№</u>4, pp. 374–379. DOI: 10.1134/s11490-008-4002-6.

33. Blumenstein 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, 2020, v. 101, 165140. DOI: 10.1103/PhysRevB.101.165140.

34. Hakkinen H., & Landman U. Superheating, melting, and annealing of copper surfaces // Phys. Rev. Lett., 1993, v. 71, №7, pp. 1023–1026. DOI: 10.1103/physrevlett.71.1023.

35. Schäfer C., Urbassek H.M., & Zhigilei, L.V. Metal ablation by picosecond laser pulses: A hybrid simulation // Phys. Rev. B, 2002, v. 66, №11, 115404(1-8). DOI: 10.1103/physrevb.66.115404.

36. Ivanov D.S., & Zhigilei L.V. Combined atomistic-continuum modeling of shortpulse laser melting and disintegration of metal films // Phys. Rev. B, 2003, v. 68, №6, 064114(1-22). DOI: 10.1103/physrevb.68.064114.

37. Kaganov M.I., Lifshitz I.M., Tanatarov L.V. Relaxation Between Electrons and the Crystalline Lattice // Sov. Phys. JEPT, 1957, v. 4, №2, 173–178.

38. Anisimov S.I., Kapeliovich B.L., and Perel'man T.L. Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses // Sov. Phys. JETP, 1974, v. 39, 375–377.

39. Sonntag S., Roth J., Gaehler F., & Trebin H.-R. Femtosecond laser ablation of aluminium // Appl. Surf. Sci., 2009, v. 255, №24, 2009, pp. 9742–9744. DOI: 10.1016/j.apsusc.2009.04.062.

40. Zhigilei L.V., Lin Z., & Ivanov D.S. Atomistic modeling of short pulse laser ablation of metals: connections between melting, spallation, and phase explosion // J. Phys. Chem. C, 2009, v. 113, №27, pp. 11892–11906. DOI: 10.1021/jp902294m.

41. Roth J., Krauß A., Lotze J., & Trebin H.-R. Simulation of laser ablation in aluminum: the effectivity of double pulses // Appl. Phys. A, 2014, v. 117, №4, pp. 2207–2216. DOI: 10.1007/s00339-014-8647-1.

42. Gan Y., & Chen J. K. Integrated continuum-atomistic modeling of nonthermal ablation of gold nanofilms by femtosecond lasers // Appl. Phys. Lett., 2009, v. 94, №20, 201116. DOI: 10.1063/1.3142878.

43. Meng Yu, Gong An, Chen Z., Wang Q., Guo J., Li Z., Li J. Atomistic-continuum study of an ultrafast melting process controlled by a femtosecond laser-pulse train // Materials, 2024, v. 17, №1, 185 p. DOI:10.3390/ma17010185.

44. Wu C., Christensen M.S., Savolainen J.-M., Balling P., & Zhigilei L.V. Generation of subsurface voids and a nanocrystalline surface layer in femtosecond laser irradiation of a single-crystal Ag target // Phys. Rev. B, 2015, v. 91, №3, 035413 (1-14). DOI: 10.1103/physrevb.91.035413.

45. Yin C, Zhang S, Dong Y, Ye Q, Li Q. Molecular-dynamics study of multi-pulsed ultrafast laser interaction with copper // APEM, 2021, v. 16, №4, pp. 457–472. DOI: 10.14743/apem2021.4.413.

46. Aleksashkina A.A., Demin M.M., Mazhukin V.I. Molecular dynamic calculation of lattice thermal conductivity of gold in the melting-crystallization region // Math. Montis., 2019, v. 46, pp. 106–122. DOI: 10.20948/mathmontis-2019-46-9.

47. Smirnov N.A. Copper, gold, and platinum under femtosecond irradiation: Results of first-principles calculations // Phys. Rev. B, 2020, v. 101, 094103. DOI: 10.1103/PhysRevB.101.094103.

48. Mazhukin V.I., Koroleva O.N., Demin M.M., Shapranov A.V., Aleksashkina A.A. Atomistic simulation of the coexistence of liquid-vapor phase states for gold and determination of critical parameters // Math. Models Comput. Simul., 2022, v. 14, №5, pp. 819–828. DOI: 10.1134/S207004822205009X.

49. Воеводин А.Ф., Гончарова О.Н. Метод расщепления по физическим процессам для расчета задач конвекции // Матем. моделирование, 2001, v. 13, №5, с. 90–96.

50. Verlet L. Computer «Experiments» on Classical Fluids. I. Thermodynamically Properties of Lennard-Jones Molecules // Phys. Rev., 1967, v. 159, pp. 98-103.

51. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys., 1995, v.117, №1, pp. 1–19. DOI: 10.1006/jcph.1995.1039.

Оглавление