

1.2. Аннотация

Лазерные технологии становятся все более совершенными с расширением доступных энергий фотонов и переходом на субмикронные масштабы воздействия на вещество. Соответственно расширяется спектр приложений в науке и появляется возможность развития субмикронных и нанометровых технологий в промышленности.

В данной заявке на продление гранита РФФИ будут выполнены новые исследования в самых современных областях науки и техники, связанных

- (a) с манипуляциями электромагнитным (ЭМ) излучением на нано- и микромасштабах,
- (b) с применением лазеров при изучении термодинамических, прочностных и транспортных характеристик веществ в состояниях с высокой плотностью и высокой температурой; динамические явления и неустойчивости при распространении ударных волн и выходе их на свободную поверхность,
- (c) с изучением воздействия излучения на слоистые мишени (например, на многослойные зеркала для рентгеновской оптики).
- (d) Будут изучены принципиально новые вопросы, относящиеся к применению сложного лазерного воздействия к комплексным мишеням. Речь идет об использовании высокоапертурных (high numerical aperture NA) объективов и фазовых пластинок для формирования заданного ЭМ поля на мишени. Кроме того, будут рассмотрены ЭМ поля, которые возникают при интерференции падающей ЭМ волны и плазмон-поляритонных (ППР) волн, возбуждаемых трехмерным нанообъектом. Причем для импульсов разной продолжительности во времени и с разной длиной волны. Эти импульсы будут действовать на комплексные мишени, под которыми понимаются слоистые или ограниченные пространственно мишени (например, капля на поверхности подложки или микро- наночастица в вакууме или окружающей прозрачной среде.

Относительно пункта (d) добавим, что, как известно, вариация длительности лазерного (L) импульса τ_L качественно меняет физику взаимодействия:

субпикосекундные импульсы – здесь необходимо учитывать возбуждение электронов, двухтемпературную стадию, генерацию высоких давлений, связанных с быстрым разогревом неподвижного вещества, тепловое расширение не поспевает за нагревом, возникают сильнейшие термомеханические эффекты, термомеханическая абляция;

пикосекундные импульсы – высокие давления, термомеханические явления, двухтемпературность выражена слабо;

субнаносекундные – наносекундные импульсы – сильный разогрев, динамика определяется испарением).

Все это требуется описывать вместе с плавлением и рекристаллизацией разной степени неравновесности. Не менее существенно на физике взаимодействия сказывается вариация энергии фотона от ближней инфракрасной области (скажем, хром-фостеритовые лазеры, 1 эВ) до жесткого ультрафиолета (фотон 10-100 эВ) и затем до жесткого рентгена (фотон 10-20 кэВ, лазеры на свободных электронах).

Выше перечислены основные трудные задачи с разной физикой взаимодействия. Они будут являться естественным продолжением, успешных, на наш взгляд, исследований, проведенных благодаря гранту РФФИ номер 14-19-01599 (26 публикаций за 2.5 года, см. список к п. 1.3 ниже и итоговый отчет).

В заявке на продление получают дальнейшее развитие плодотворные связи и совместные работы с экспериментальными группами, существенно стимулированные при выполнении гранта 14-19-01599. Сюда относятся

- (I) Разработка и совершенствование физической теории взаимодействия путем обработки результатов опытов, проводимых в ОИВТ РАН, в лаборатории сверхбыстрого лазерного воздействия на вещество под руководством М.Б. Аграната (это сотрудничество сложилось давно и в рамках гранта плодотворно продолжалось). Публикации [1,2] в списке к п. 1.2 и [22] в списке к п. 1.3. На новом этапе будут изучены особенности уравнений состояния и транспорта в состояниях с сильно нагретыми электронами и динамики ударных волн. Будет изучена проблема воздействия через жидкую прозрачную среду на поглощающую мишень. Смена газовой среды на жидкость сильно меняет морфологию пятна воздействия.
- (II) Kansai Photon Science Institute (KPSI), Department of Advanced Photon Research, X-ray Laser Group, Deputy Group Leader is Dr. Masahara Nishikino. Previous group leader was Prof. Tetsuya Kawachi. Наши совместные исследования в рамках гранта РФФИ (14-19-01599) суть: [1,3-6] в списке к п. 1.2. В новой заявке будет выполнено принципиально важное исследование роли электронного давления на первых пикосекундах после воздействия фемтосекундного импульса. Будут проведены расчеты и подобраны параметры опытов. Затем эти опыты будут осуществлены (часть результатов уже имеется). Экспериментальные результаты будут сопоставлены с теорией. Нами будет создана схема расчетов рентгеновской оптики и построены «мгновенные» (разрешение по времени 7 пс) изображения очага лазерного воздействия в рентгеновских лучах с варьируемой задержкой построения изображения после фемтосекундного воздействия (под соответствующие опыты в KPSI). Это позволит проследить за развитием процессов, запущенных ультракоротким лазерным ударом. Будут решена задача о расшифровке результатов синхронизованного воздействия (техника pump-probe) субнаносекундного оптического лазерного импульса (pump) на изучаемую пленку с генерацией в ней ударной волны (УВ) с одной стороны и фемтосекундного жесткого (длина волны менее Ангстрема) рентгеновского импульса XFEL (probe) с другой стороны; X-ray Free Electron Laser (XFEL). Импульс XFEL требуется для построения мгновенной дифракционной картины упорядочивания атомов в пленке с распространяющейся по ней сильной УВ.
- (III) Благодаря РФФИ 14-19-01599 была создана теория, объясняющая эксперименты, выполненные совместными усилиями наших коллег из Владивостока (Дальневосточный федеральный университет и ИАПУ ДВО РАН - Институт автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук), московского ФИАНа и ИТМО (Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики), см. [13] в списке литературы к п. 1.3 ниже. Облучение пленочных мишеней (пленка металла на диэлектрической или полупроводниковой подложке) осуществлялось острорасфокусированным одиночным лазерным пучком в режиме одного выстрела. В результате образуются уединенные формирования сложной морфологии. Плазмонный резонанс этих формирований зависит от их размеров и топологии. Управляя с помощью оптики размерами и топологией можно регулировать резонансные характеристики, что существенно для приложений. Полученные результаты были изложены в работах [7-9] в списке к п. 1.2.

В продолжение проекта будут решены интереснейшие задачи о воздействии через фокусирующую систему с высокой числовой апертурой и с использованием фазовых пластинок. Будут рассмотрены резко пространственно неоднородные ЭМ поля, являющиеся суммой падающей ЭМ волны и плазмон-поляритонных (ППР) волн. Будут выполнены расчеты соответствующих ЭМ полей. Будут рассмотрены ситуации с толстыми пленками, толщина которых превышает толщину нагретого слоя. В этом случае нельзя пользоваться удобной аппроксимацией с быстрым прогревом пленки по толщине, а затем начала гидродинамического движения, что намного упрощало решение трехмерной задачи. С помощью этой аппроксимации были выполнены расчеты тонких пленок [6-9], список к п. 1.2. Именно такого рода новые эксперименты с толстыми пленками и освещением или со стороны пленки, или со стороны подложки планируются и ведутся сейчас в группе ИАПУ, ДВФУ, ФИАН, ИТМО, причем первые полученные наблюдаемые нетривиальные явления не находят объяснений, что требует от нас построения новых теоретических моделей.

Литература к п. 1.2

- [1] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, D.K. Ilnitsky, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eyama, N. Kakimoto, T. Tomita, M. Baba, Y. Minami, T. Suemoto, and T. Kawachi, *Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump--X-ray probe experiment*, Appl. Phys. B **119**, 413-419 (2015).
- [2] S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, A.A. Yurkevich, D.K. Ilnitsky, N.A. Inogamov, and M.B. Agranat, *Ablation of gold irradiated by femtosecond laser pulse: Experiment and modeling*, J. Phys.: Conf. Ser. **774**, 012097 (2016); 60 pages. doi:10.1088/1742-6596/774/1/012097
- [3] M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, and M. Yamagiwa, *Very low electron temperature in warm dense matter formed by focused picosecond soft x-ray laser pulses*, J. Appl. Phys. **116**, 183302 (2014). doi: 10.1063/1.4901943
- [4] M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, M. Yamagiwa, *Low electron temperature in ablating materials formed by picosecond soft x-ray laser pulses*, Proc. SPIE 9589, X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications XI, 958904 (September 22, 2015); doi:10.1117/12.2186053
- [5] T.A. Pikuz, A.Ya. Faenov, N. Ozaki, N.J. Hartley, B. Albertazzi, T. Matsuoka, K. Takahashi, H. Habara, Y. Tange, S. Matsuyama, K. Yamauchi, R. Ochante, K. Sueda, O. Sakata, T. Sekine, T. Sato, Y. Umeda, Y. Inubushi, T. Yabuuchi, T. Togashi, T. Katayama, M. Yabashi, M. Harmand, G. Morard, M. Koenig, V. Zhakhovsky, N. Inogamov, A. S. Safronova, A. Stafford, I. Yu. Skobelev, S.A. Pikuz, T. Okuchi, Y. Seto, K.A. Tanaka, T. Ishikawa, and R. Kodama, *Indirect monitoring shot-to-shot shock waves strength reproducibility during pump-probe experiments*, J. Appl. Phys. **120**, 035901 (2016). doi: 10.1063/1.4958796
- [6] N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Y.V. Petrov, V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, D.K. Ilnitsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, T. Kawachi, A.Y. Faenov, T.A. Pikuz, M. Baba, Y. Minami, and T. Suemoto, *Rarefaction after fast laser heating of a thin metal film on a glass mount*,

AIP Conf. Proc. (accepted). 19th Biennial APS Conference on Shock Compression of Condensed Matter (SCCM15)

[7] П.А. Данилов, Д.А. Заярный, А.А. Ионин, С.И. Кудряшов, А.А. Руденко, А.А. Кучмижак, О.Б. Витрик, Ю.Н. Кульчин, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, *Перераспределение материала при фемтосекундной лазерной абляции тонкой серебряной пленки*, Письма в ЖЭТФ **104**(11), 780-786 (2016).

[8] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov, A.A. Kuchmizhak, S.I. Kudryashov, *Blistering of film from substrate after action of ultrashort laser pulse*, J. Phys.: Conf. Ser., **774**, 012102 (2016); doi:10.1088/1742-6596/774/1/012102

[9] A. Kuchmizhak, O. Vitrik, Yu. Kulchin, D. Storozhenko, A. Mayor, A. Mirochnik, S. Makarov, V. Milichko, S. Kudryashov, V. Zhakhovsky, and N. Inogamov, *Laser printing of resonant plasmonic nanovoids*, Nanoscale **8**, 12352-12361 (2016). DOI: 10.1039/C6NR01317A

1.2. Abstract

Laser technologies become more and more advanced as the spectrum of photon energies becomes wider and transition to submicron scale in laser-matter interaction occurs. Correspondingly, the field of applications of lasers in science expands and a possibility of development of submicron and nanometer technologies appears.

In this application for the continuation of the RSF grant new investigations connected with modern branches of science and technology are proposed including:

- (a) Nano- and microscale manipulations with electromagnetic (EM) radiation,
- (b) Application of lasers to the study of thermodynamic, strength, and transport properties of matter at high density and temperature; dynamical properties and instabilities of shock waves crossing a boundary between two media,
- (c) Study of the action of radiation on layered targets (e.g. on multilayer mirrors used in X-ray optics),
- (d) New problems related to complex laser interaction with compound targets will be studied. The study should be performed for various laser pulse lengths and various light frequencies. Such pulses will interact with complex targets, e.g. , a droplet at a substratum or micro- nanoparticle in vacuum or in transparent medium. With respect to the point (d) one should add that a variation in laser pulse length changes qualitatively the picture of interaction: subpicosecond pulses – it is necessary to take into account the excitation of electrons, the two-temperature stage, high pressure generation due to fast heating of material at rest (thermal expansion is going on slower than laser heating, that results in very strong thermomechanical effects), thermomechanical ablation;

picosecond pulses – high pressures, thermomechanical phenomena, weak two-temperature effects, sub-nanosecond – nanosecond pulses – strong heating, most important process is vaporization. This set of processes supplemented by melting and crystallization, should be analyzed. One more important parameter strongly affecting laser-matter interaction is the photon frequency. It varies from infrared (e.g. Chromium-fosterite laser, photon energy is about 1 eV) to hard UV (10 – 199 eV) and hard X-ray (10 – 20 keV, free electron laser).

The above mentioned complicated problems fall within different realms of physics. They would be natural prolongation of the successful, in our opinion, investigations carried out owing to the grant of the RSF N 14-19-01599 (25 papers published during 2,5 year (see below, the reference list to point 3 and the final Report).

In the present application we propose to continue joint productive cooperation with experimental

teams considerably supported by the RSF grant 14-19-01599. This proposal includes:

(I) The development and improvement of physical theory of laser-matter interaction using the results of experiments performed at JIHT RAS, Laboratory of superfast laser-matter interaction, under the leadership of Prof. M.B. Agranat (this cooperation proceeds successfully for a long time due to the support of the

RSF (grant N 14-19-01599); Publications [1,2,22] . During new

stage the problem of laser irradiation of the absorbing target through

transparent liquid will be studied. Replacement of gaseous medium by liquid strongly changes the morphology of interaction spot.

(II) Kansai Photon Science Institute (KPSI), Department of Advanced Photon Research, X-ray Laser Group, Deputy Group Leader is Dr. Masahara Nishikino. Previous group leader was Prof. Tetsuya Kawachi. Our joint studies within the framework of the

RSF grant N 14-19-01599 are described in [1, 3-6]. In our new

application an important problem concerning the role of electron pressure immediately after the femtosecond pulse is planned to be

resolved. Calculation will be carried out and parameters for the experiment will be selected. Then the experiments will be realized

(some results were obtained already). Experimental results will be

compared with theory. We will create an outline of X-ray optics

calculations and construct a “momentary” (time resolution ~ 7 ps) X-ray image of the interaction area with varied time delay after

femtosecond laser pulse (in respect to corresponding experiments at KPSI).

The decoding will be performed of the results of synchronized effect (pump-probe method) of subnanosecond optical laser (pump)

on film target (generating a strong shock wave within the film), on

the one hand, and femtosecond hard (the wavelength is shorter than 1 Angstrom) X-ray pulse (probe), produced by free electron laser

(XFEL), on the other hand, A pulse of XFEL is required for the

construction of instantaneous diffraction picture of the ordering of

atoms in the film subjected to strong shock wave (SW).

(III) Owing to the RSF grant N 14-19-01599 the theory has been constructed by joint efforts of our colleagues from Vladivostok (Far Eastern Federal University and IAPC FRB RAS), from Moscow (LPI), and from St.Petersburg (St.Petersburg National Research University for Information Technologies, Mechanics, and Optics – ITMO). Irradiation of film targets (metallic film on a dielectric or semiconductor substrate) was realized in single shot regime by single sharply focused beam. As a result, complicated solitary structures were created. Plasmon resonance of such structures depends on their size and topology. Using optical methods of control of the size and topology one

can regulate the resonance characteristics. This is important for applications.

The results of the experiments were described in [7 – 9].

In the course of the project very interesting problems will be solved connected with usage of focusing systems with high numerical aperture and optical

retarders. Corresponding EM fields will be calculated. The case of thick films will be considered, when film thickness exceeds the depth of heated layer. In

this case it is impossible to use convenient approximation assuming fast warm

up of the film through its thickness with subsequent origin of hydrodynamic motion (this approximation simplified strongly the solution of the three

dimensional problem; it has been used in calculation of thin films [6 – 9]). Just such new

experiments with thick films irradiated from the film side or from

the side of substrate are planned and carried out now in the group including

LPI, IAPC, and ITMO. Note that the first results can not be explained in terms

of standard theory and requires from us to construct a new theory.

References to 1.2

- [1]. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, D.K. Ilnitsky, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eyama, N. Kakimoto, T. Tomita, M. Baba, Y. Minami, T. Suemoto, and T. Kawachi, Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump--X-ray probe experiment, *Appl. Phys. B* 119, 413-419 (2015).
- [2] S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, A.A. Yurkevich, D.K. Ilnitsky, N.A. Inogamov, and M.B. Agranat, Ablation of gold irradiated by femtosecond laser pulse: Experiment and modeling, *J. Phys.: Conf. Ser.* 774, 012097 (2016); 60 pages.
Doi:10.1088/1742-6596/774/1/012097
- [3] M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, and M. Yamagiwa, Very low electron temperature in warm dense matter formed by focused picosecond soft x-ray laser pulses, *J. Appl. Phys.* 116, 183302 (2014). doi: 10.1063/1.4901943
- [4] M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, M. Yamagiwa, Low electron temperature in ablating materials formed by picosecond soft x-ray laser pulses, *Proc. SPIE 9589, X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications XI*, 958904 (September 22, 2015); doi:10.1117/12.2186053
- [5] T.A. Pikuz, A.Ya. Faenov, N. Ozaki, N.J. Hartley, B. Albertazzi, T. Matsuoka, K. Takahashi, H. Habara, Y. Tange, S. Matsuyama, K. Yamauchi, R. Ochante, K. Sueda, O. Sakata, T. Sekine, T. Sato, Y. Umeda, Y. Inubushi, T. Yabuuchi, T. Togashi, T. Katayama, M. Yabashi, M. Harmand, G. Morard, M. Koenig, V. Zhakhovsky, N. Inogamov, A. S. Safronova, A. Stafford, I. Yu. Skobelev, S.A. Pikuz, T. Okuchi, Y. Seto, K.A. Tanaka, T. Ishikawa, and R. Kodama, Indirect monitoring shot-to-shot shock waves strength reproducibility during pump-probe experiments, *J. Appl. Phys.* 120, 035901 (2016). doi: 10.1063/1.4958796
- [6] N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Y.V. Petrov, V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, D.K. Ilnitsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, T. Kawachi, A.Y. Faenov, T.A. Pikuz, M. Baba, Y. Minami, and T. Suemoto, Rarefaction after fast laser heating of a thin metal film on a glass mount, *AIP Conf. Proc.* (accepted). 19th Biennial APS Conference on Shock Compression of Condensed Matter (SCCM15)
- [7] П.А. Данилов, Д.А. Заярный, А.А. Ионин, С.И. Кудряшов, А.А. Руденко, А.А. Кучмижак, О.Б. Витрик, Ю.Н. Кульчин, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, Перераспределение материала при фемтосекундной лазерной абляции тонкой серебряной пленки, *Письма в ЖЭТФ* 104(11), 780-786 (2016).
- [8] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov, A.A. Kuchmizhak, S.I. Kudryashov, Blistering of film from substrate after action of ultrashort laser pulse, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 774, 012102 (2016); doi:10.1088/1742-6596/774/1/012102
- [9] A. Kuchmizhak, O. Vitrik, Yu. Kulchin, D. Storozhenko, A. Mayor, A. Mirochnik, S. Makarov, V. Milichko, S. Kudryashov, V. Zhakhovsky, and N. Inogamov, Laser printing of resonant plasmonic nanovoids, *Nanoscale* 8, 12352-12361 (2016). DOI: 10.1039/C6NR013.

1.3. Ожидаемые результаты и их значимость

Актуальность лазерных технологий очевидна, поскольку имеется широкий набор приложений в науке и промышленности от роботизированной лазерной резки и сварки в машиностроении до получения нанодисперсных сред (коллоиды) и поверхностей (наноструктуры) и до плазмоники (например, формирование и работа плазмонных наномантенн). Постепенно современная индустрия перестраивается с преимущественно механических средств обработки на комбинированные средства с использованием лазерных устройств. Разумеется, успешность применений связана с пониманием фундаментальных физических явлений, важных нерешенных проблем здесь много. Именно на это будет направлена предстоящая исследовательская деятельность.

В результате детальных теоретических и численных исследований, проводимых с целью объяснения экспериментальных результатов, а также для планирования будущих экспериментов в сотрудничающих с нами лабораториях, будет дан ответ на ряд следующих важных вопросов.

[А] Будет решена задача о движении вещества и формировании финальной структуры в результате облучения пленок разной толщины на подложке или многослойных мишеней при разных режимах облучения. Во-первых, наверно, самое современное приложение связано с применением оптики с высокой числовой апертурой $NA > 0.5$ и, соответственно, с ультрамалым пятном облучения (радиус 200-400 нм) и сложным распределением ЭМ излучения по пятну (интенсивность, угол падения и поляризация).

Во-вторых, в другом актуальном приложении применяют фазовую пластинку для формирования вихревого оптического пучка. Таким образом, например, может быть достигнута радиальная (в плоскости мишени) поляризация падающего на плоскость мишень излучения. При такого рода поляризации образуется темное пятно в центре с большим контрастом освещенности по отношению кольцо-центр. Результаты воздействия вихревым пучком должны резко отличаться от того, что получается при действии пучком с гауссовым распределением интенсивности с выраженным максимумом интенсивности в центре. В результате появляется возможность создание уединенных структур весьма необычной морфологии. Это новая проблема, для изучения которой необходимо разработать теоретическую модель и метод численного моделирования. Решение этой проблемы имеет существенное значение для плазмонных нанотехнологий.

В-третьих, будет рассмотрено влияние на формирующиеся структуры взаимодействия внешней ЭМ волны и плазмон-поляритонных (ППР) мод, связанных с наномантенной, установленной на плоской подложке.

Как говорилось в аннотации п. 1.2 выше, толщина пленки имеет значение для развития оптико-индуцированных процессов. Соответственно имеются два класса задач. В первом из них толщина пленки меньше толщины слоя прогрева d_T , во втором – больше. Поясним смысл значения d_T . Ультракороткий импульс за время порядка единиц пикосекунд создает приповерхностный слой прогрева d_T , в котором резко повышается давление, поскольку продолжительность времени, за которое создается слой d_T , меньше звукового масштаба времени $t_s = d_T/c_s$, за которое звук пробегает слой прогрева. Толщина d_T зависит от материала. В золоте она достаточно велика 100-200 нм, а в никеле меньше, порядка 70 нм.

Если $d_f < d_T$, то задача об отслоении пленки, которая слабо закреплена на подложке, решается относительно легко. В результате двухтемпературного гидродинамического

моделирования определяется зависимость скорости пленки после отделения от подложки от локальной величины поглощенного флюенса (см. статьи [1,4] в списке публикаций к данному пункту заявки). Эта зависимость далее используется при молекулярно-динамическом моделировании. При этом под скоростью пленки понимается скорость центра масс пленки в точке на поверхности пленки – т.е. локальное значение скорости центра масс $V_{cm}(r)$, где r – расстояние до оси лазерного пучка в плоскости пленки. Относительное движение вещества пленки в локальной системе координат, связанной с локальным центром масс, не имеет значения, поскольку амплитуды относительных скоростей невелики и затухают на больших масштабах времени, за которое образуется и затвердевает купол в задачах с фокусировкой на дифракционном пределе (малые фокальные пятна). Благодаря малому разбросу скоростей локальное значение скорости центра масс берется за локальное значение скорости пленки.

В случае толстых пленок $d_f > d_T$ хорошо определенной локальной скорости пленки нет. Соответственно очень сложными становятся и двухтемпературное гидромеханическое моделирование и молекулярная динамика. Из первых экспериментов, проведенных по этому поводу, известно, что относительно простого купола на толстых пленках нет. Вместо него образуются сложнейшие структуры с куполом и кольцами вокруг или без купола и оболочками в несколько слоев. Без детального анализа ситуации разобраться здесь не удастся. Работа в данном направлении запланирована в настоящей заявке.

Проблема будет решаться с учетом многообразия параметров воздействия и структур мишеней:

- (1) Толщина пленки, двух- и многослойные пленки на подложках и без;
- (2) Радиус пятна воздействия, влияние аспектного отношения радиус – толщина;
- (3) Разница между режимами с освещением поверхности пленки (фронтальная граница, фронтальное освещение) и с воздействием через прозрачную подложку на тыльную границу пленки (тыльное освещение). В случае тонкой пленки $d_f < d_T$ разница между фронтальным и тыльным режимами мала. В случае толстой пленки эта разница велика и имеет принципиальное значение.
- (4) Исключительно важным является аспект, который будет изучен, связанный с длительностью импульса. Случай наносекундного воздействия качественно по самой физике процессов отличается от фемтосекундного воздействия. Огромную роль начинают играть процессы сильного нагрева, испарения, неравновесности испарения (толстый кнудсеновский слой), тепловых и динамических эффектов, связанных с паровой фазой. При фемтосекундном воздействии с нагревами до таких значительных температур в пленке остается дырка (вся пленка улетает) внутри пятна фокусировки.

Более подробно перечисленные вопросы 1-4 изложены ниже в форме 4.

[В] Много внимания в проекте будет уделено работе рентгеновских лазеров, важность которых связана с абляцией и литографией предельно высокого пространственного разрешения.

Это весьма актуальная и современная тематика.

Имеется ряд вариантов рентгеновских лазеров от небольших « настольных » размеров до гигантских машин – лазеров на свободных электронах (X-ray Free Electron Laser: XFEL) – таких как LCLS (SLAC Linac Coherent Light Source, Стенфорд, США) и SAKLA (RIKEN/HARIMA/SPring8, префектура Хиого, Япония). Они перенастраиваются на разные длины волн и имеют разные продолжительности импульса. Сегодня в сторону высоких энергий фотона доходят до длин волн менее одного Ангстрема. В коллектив по проекту входит Анатолий Фаенов из университета Осаки (Институт академических инициатив) и

ИВТана, работающие вместе с нами и японскими коллегами из KPSI (см. п. 1.2) по экспериментам на рентгеновских лазерах.

Ультракороткий (несколько фемтосекунд) жесткий (10-20 кэВ) лазерный импульс XFEL может применяться в качестве диагностического импульса, который дает практически мгновенную дифракционную картину порядка атомов в кристалле, по которому распространяется сильная (0.1-10 Мбар) ударная волна. В предстоящей работе будут выяснены вопросы распространения сложных ударных волн (УВ) и их отражения от свободной поверхности. Сложными здесь названы волны с двумя (упруго-пластическая УВ) или более (связанными с полиморфными превращениями) скачками плотности. Ранее в работах по нашему РФФ проекту 14-19-01599 изучались такие комплексные квазистационарные УВ [22,23]. Теперь исследования будут проведены с учетом условий генерации УВ, конечной толщины пленки, по которой распространяется УВ (порядка единиц микрон) и отражения от тыльной стороны пленки (граница с вакуумом). Будет построена мгновенная дифракционная картина и спектр рентгеновской линии, отраженной от тыльной стороны пленки. Это позволит воссоздать картину эволюции УВ по экспериментальным дифракционным данным. Инициатором УВ в пленке является субнаносекундный оптический лазерный импульс [5], который создает горячую плазменную корону с фронтальной (облучаемой) стороны пленки [5]. Оптический импульс синхронизован с диагностическим рентгеновским импульсом XFEL.

Другой существенной проблемой является деградация многослойных зеркал из-за рентгеновского излучения. В связи с этим будут изучены абляционные явления, вызванные рентгеновским воздействием. Будет решена серьезная задача о распределении ЭМ поля в слоях. Полученные данные будут использованы при гидродинамическом моделировании теплового поля и динамики деформационного расширения приповерхностных слоев покрытия зеркала.

Литографию будущего (уже имеются промышленные прототипы, SEMATEX, см. [[1,2]]) для микро- и нанoeлектроники связывают с плазмой олова, излучающей на длине волны 13.5 нм (Extreme ultraviolet lithography, EUV lithography) с энергией фотона примерно 90 эВ. Этот диапазон относят как к жесткому ультрафиолету, так и к мягкому рентгену. Лазер на плазменной колонке из высокозарядных (неоноподобный Ag^{19+}) ионов серебра стабильно работает в группе наших коллег из KPSI (см. п. 1.2). Этот лазер имеет длину волны 13.9 нм, близкую к длине волны «оловянной лампочки». Поэтому большой интерес представляют абляционные явления, вызванные плазменным лазером. С другой стороны важно исследовать быстропротекающие процессы посредством «мгновенных» изображений стадий процесса в лучах плазменного лазера 13.9 нм. Такие работы будут выполнены в рамках продолжения проекта РФФ.

Будут изучены вопросы перемещения и разделения веществ при воздействии острогофокусированного импульса жесткого (10-20 кэВ) рентгена на 2-х и более слойные покрытия из чередующихся разных веществ. Это позволит создавать уединенные наноструктуры с требуемым составом веществ. Данная задача сложна. Для ее решения будут созданы и откалиброваны соответствующие физические модели и соответственно расширен пакет наших компьютерных программ. По опыту работы по исследованию динамики однослойной пленки [13] нам известно, что лазерный удар вызывает сильное перераспределение вещества по пленке. Работа [13] была выполнена благодаря проекту РФФ 14-19-01599. Там рассматривался оптический лазер и однослойное покрытие.

[С] Будут исследованы вопросы влияния электронного давления на динамические процессы в поверхностном слое облученной мишени. Ситуация, когда электронное

давление доминирует, представляется достаточно нестандартной. Обычно при температурах в несколько тысяч градусов электронной энергией и давлением можно пренебречь, поскольку электронная подсистема вырождена и ее теплоемкость невелика. Но в наших режимах с двухтемпературными состояниями, когда температура электронов доходит до нескольких эВ, электронное давление велико (до мегабара) и доминирует. Это продолжается до окончания двухтемпературной стадии, в конце которой происходит выравнивание температур электронов и ионов. Особенно существенны эти эффекты при фемтосекундном облучении золота, в котором из-за большого отношения масс между электроном и ионом двухтемпературная релаксация продолжается достаточно долго.

Для решения такой проблемы требуется уравнение состояния, учитывающее двухтемпературность. Оно было разработано благодаря проекту РНФ 14-19-01599, см. статью [9]. На следующем этапе будет выполнено численное моделирование динамических явлений с этим уравнением состояния. Главная цель состоит в сравнении с данными экспериментов, выполненными в KPSI (см. п. 1.2) на пленках золота. При этом слежение за разворачиванием событий во времени осуществлялось с помощью лазера на мягком рентгене 13.9 нм, который имеется в KPSI. Для этой задачи будет создана и на ней отработана численная модель рентгеновской оптики, которая применяется для построения «мгновенных» изображений развития процесса абляции, см. также п. [B].

Код для расчета рентгеновской оптики кроме учета работы собственно оптики (многослойные зеркала и двойного зеркала: double Lloyd's mirror) будет включать расчеты преломления и отражения диагностического импульса от мишени, находящейся в движении после воздействия ультракороткого оптического лазерного импульса; схему установки см. в [27]. Диагностический пучок 13.9 нм падает под углом к поверхности мишени. Мишень в результате оптического воздействия расщепляется на подвижный (будем называть его также откольным слоем) слой, пену, заполняющую промежуток между подвижным слоем и остатком мишени, и остаток мишени. Будет решена задача о прохождении наклонной ЭМ волны через эту систему. В результате будет вычислена сумма отраженных ЭМ волн. Отраженные волны доводятся до ПЗС-камеры через многослойные зеркала или через многослойные зеркала плюс двойное зеркало. Гидродинамическая модель и рентгеновский оптический код позволят полностью описать явления, которые имеют место в наших экспериментах [27].

[D] В проекте будет изучено воздействие лазерного излучения на малые частицы в широком диапазоне их размеров от единиц нанометров до десятков микрон. Это важно в двух отношениях.

Во-первых, в отношении влияния на функцию распределения наночастиц субволновых размеров (1-100 нм) сравнительно с длиной волны оптического излучения. Это существенно для задач управления характеристиками коллоидов. Коллоиды наночастиц получают как химическими методами, так путем облучения мишеней из конденсированного вещества лазером при погружении мишени в жидкую среду. В проекте будет исследована смежная задача о генерации наночастиц лазером от твердых мишеней в жидкой среде.

Оптическая часть задачи о дифракционных искажениях лазерной ЭМ волны, освещающей наночастицу, описана в литературе подробно. Коллектив авторов заявки включает специалиста по ЭМ части проблемы. С другой стороны то, как реагирует частица на облучение, известно лишь на уровне грубых феноменологических моделей. Такой подход не позволяет ответить на главные вопросы, связанные с физикой этого взаимодействия. При этом подход, где реакция вещества на внешнее воздействие описывается из первых

принципов, существует – это молекулярная динамика (МД). Высокопроизводительным параллельным МД кодом, имеющимся в нашем коллективе, можно детально описать происходящее в наночастице вплоть до радиусов частицы порядка 100 нм (до 200 миллионов атомов), используя 1024 вычислительных ядра. Объединение теории дифракции с гидродинамическим и МД моделированием позволит получить сквозное описание процессов от лазерного импульса до тепловых и механических последствий в виде плавления и рекристаллизации, осцилляций и распада частицы.

Во-вторых, огромное прикладное значение имеет задача о дроблении жидких капель оптическим лазерным импульсом [[1,2]]. Речь идет о литографических машинах для нанoeлектроники (Extreme ultraviolet lithography). Сердце машины – источник жесткого ультрафиолета (УФ), излучаемого плазмой олова. Для создания такой плазмы имеется дозатор, подающий каплю жидкого олова в источник. Размеры капель, вылетающих из дозатора, составляют десятки микрон. Для эффективности процесса плазмообразования такую крупную каплю необходимо раздробить на чрезвычайно мелкодисперсную фракцию. Дробление осуществляется импульсом оптического лазера. Из опытов ясно [[1,2]], что воздействие приводит к распылению капли, см., например, [[2]]. Однако как это происходит, физические процессы имеющие место неизвестны. В нашей работе данная проблема будет решена с помощью описания ЭМ поля, действующего на каплю, процессов поглощения излучения и порожденных воздействием тепловых и динамических процессов. Для описания будут намного расширены наши гидродинамические, МД и SPH (smooth particles hydrodynamics) коды. Бессеточный гидродинамический SPH код будет использоваться на пространственных масштабах, недоступных для описания в рамках МД.

[E] Разработка новых алгоритмов и кодов является важнейшей частью проекта. На базе параллельного алгоритма динамической декомпозиции моделируемого вещества по ячейкам Вороного, используемого в нашем МД коде, будет создана многопроцессорная версия SPH кода. Эта версия специально будет приспособлена для описания работы источника жесткого УФ. Распараллеливание на сотни и более процессоров позволит поднять число лагранжевых частиц в расчете методом SPH до многих десятков миллионов (против обычных 10-100 тысяч). Это позволит решать трехмерные задачи воздействия облучения на капли и пылинки. Таким образом, мы поднимем на совершенно новый уровень точность пространственного разрешения при моделировании. В результате будет получена количественно верная 3D картина сложных течений материала под действием ударных волн и волн разрежения с формированием струй и при наличии фрагментации мишеней.

Будет проведено сопоставление МД и SPH кодов на задачах с дроблением мелких капель. Такое сопоставление уже проводилось нами на другой задаче [3]. А именно, рассматривалось дробление конденсированной фазы при выходе сильной ударной волны на границу первоначально твердого образца с вакуумом при наличии пространственных возмущений на границе [3].

[F] Другое направление состоит в разработке моделей вещества. А именно, в разработке и модификации потенциалов межатомного взаимодействия для расчетов методом МД. Для задачи об абляции в жидкой среде (например, золото - вода) будут созданы потенциал воды и перекрестный потенциал, описывающий взаимодействие атомов золота и молекул воды вблизи границы контакта.

Будут созданы межатомные потенциалы олова и золота с искусственно пониженным коэффициентом поверхностного натяжения. При этом все остальные параметры

соответствуют табличным данным. Данные потенциалы требуются для масштабирования задачи по капиллярному числу (скейлинг). Масштабирование необходимо, чтобы обойти ограничения на число атомов и длительность расчета (число шагов по времени). Ограничения связаны с пределами на доступные численные ресурсы, см. следующий пункт.

[G] Будут усовершенствованы приемы масштабных преобразований, которые позволяют с помощью приемлемой по размерам и числу атомов МД системы моделировать тепловые процессы с фазовыми превращениями и динамику гораздо большей по числу атомов реальной системы. В рамках гранта РФФ 14-19-01599 таким способом удалось описать непонятые ранее процессы формирования уединенных структур размерами порядка сотен миллиардов атомов в эксперименте [13]. Прямые МД расчеты такого колоссального масштаба на несколько порядков превышают имеющиеся на сегодня возможности самых производительных многопроцессорных машин в мире.

В работах [15-18] по гранту РФФ 14-19-01599 для масштабирования (скалирования) использовалась вариация теплопроводности в коде Монте-Карло, описывающем транспорт тепла. Теперь к этому добавится вариация коэффициента поверхностного натяжения (см. п. [F]).

Отметим, что с помощью нашего гранта РФФ был создан уникальный комбинированный код молекулярной динамики (МД) для атомов, совмещенный с Монте-Карло (МК) для электронов с целью описания высокой теплопроводности металлов. Это позволило аккуратно учитывать процессы плавления, рекристаллизации и интенсивных гидродинамических перемещений при воздействии на пленки остросфокусированного лазерного импульса.

Список работ, выполненных благодаря гранту РФФ номер 14-19-01599

1. Иногамов Н. А., Жаховский, В. В.
Формирование наноразмерных струек и капель ультракоротким лазерным импульсом при фокусировке на дифракционном пределе,
Письма ЖЭТФ, 2014, **100**, 6-12

2. Ishino, M.; Hasegawa, N.; Nishikino, M.; Pikuz, T.; Skobelev, I.; Faenov, A.; Inogamov, N.; Kawachi, T. & Yamagiwa, M.
Very low electron temperature in warm dense matter formed by focused picosecond soft x-ray laser pulses,
J. Appl. Phys., 2014, **116**, 183302,1-6

3. Dyachkov, S. A.; Parshikov, A. N. & Zhakhovsky, V. V.
Shock-produced ejecta from Tin: comparative study by molecular dynamics and smoothed particle hydrodynamics methods,
Journal of Physics: Conference Series, 2015, **653**, 012003

4. Иногамов, Н. А.; Жаховский, В. В. & Хохлов, В. А.
Струеобразование при отрыве металлической пленки от подложки в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса,
ЖЭТФ, 2015, **147**, 20-56

5. Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. .V.; Hasegawa, N.; Nishikino, M.; Yamagiwa, M.; Ishino, M.; Agranat, M. B.; Ashitkov, S. I.; Faenov, A. Y.; Khokhlov, V. A.; Ilitsky, D. K.; Pikuz, T. A.; Takayoshi, S.; Tomita, T. & Kawachi, T.

Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump - X-ray probe experiment,

Appl. Phys. B, 2015, **119**, 413-419

6. Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V. & Khokhlov, V. A.

Three Dimensional Ablation Flow Produced by Ultrashort Laser Pulse from Perfectly Flat Target,

Progress In Electromagnetics Research Symposium Proceedings, Prague, Czech Republic, July 6–9, 2015, PIERS Proceedings, 2015, 2413-2417

7. Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V.; Khokhlov, V. A.; Petrov, Y. V.; Migdal, K. P. & Anisimov, S. I.

Eds.: Fortov, V. E.; Iosilevskiy, I. L. & Levashov, P. R.

RAPID NON-EQUILIBRIUM CRYSTALLIZATION OF FLYING MOLTEN THIN SHELL CREATED BY FEMTOSECOND LASER ACTION

Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics,

November 27-28, 2015, Moscow, Russia,

Book of Abstracts, 2015, 68-69

8. Ishino, M.; Hasegawa, N.; Nishikino, M.; Pikuz, T.; Skobelev, I.; Faenov, A.; Inogamov, N.; Kawachi, T. & Yamagiwa, M.

Low electron temperature in ablating materials formed by picosecond soft x-ray laser pulses, X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications XI, SPIE

Proceedings, 2015, 9598

9. Petrov, Y. V.; Migdal, K. P.; Inogamov, N. A. & Zhakhovsky, V. V.

Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse,

Appl. Phys. B, 2015, **119**, 401-411

10. Rosandi, Y.; Kabeer, F. C.; Cherednikov, Y.; Zijlstra, E. S.; Garcia, M. E.; Inogamov, N. A. & Urbassek, H. M.

Melting of Al Induced by Laser Excitation of 2p Holes,

Materials Research Letters, 2015, **3**, 149-155

11. V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, D. K. Ilitsky, K. P. Migdal and V.V. Shepelev,

Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation.

Shock Compression of Condensed Matter (the Proceedings of the 19th Biennial APS Conference on Shock Compression of Condensed Matter) (2015 г.)

AIP Conf. proc., (accepted, in press, to be published in 2016:

<http://scitation.aip.org/content/aip/proceeding/aipcp> “Forthcoming titles: 19th Biennial APS Conference on Shock Compression of Condensed Matter (SCCM15)”)

12. Ashitkov, S. I.; Komarov, P. S.; Zhakhovsky, V. V.; Petrov, Y. V.; Khokhlov, V. A.; Yurkevich, A. A.; Ilitsky, D. K.; Inogamov, N. A. & Agranat, M. B.

Ablation of gold irradiated by femtosecond laser pulse: experiment and modeling,

J. Phys.: Conf. Ser., 2016, **774**, 012097

13. Данилов, П. А.; Заярный, Д. А.; Ионин, А. А. Кудряшов, С. И.; Руденко, А. А.; Кучмижак, А. А.; Витрик, О. Б.; Кульчин, Ю. Н.; Жаховский, В. В. & Иногамов, Н. А. Перераспределение материала при фемтосекундной лазерной абляции тонкой серебряной пленки,
Письма в ЖЭТФ, 2016, **104**, 780-786

14. Il'nitskiy, D. K.; Khokhlov, V. A.; Zhakhovskiy, V. V.; Petrov, Y. V.; Migdal, K. P. & Inogamov, N. A.
Dynamics of laser ablation at the early stage during and after ultrashort pulse,
J. Phys: Conf. Ser., 2016, **774**, 012101

15. Inogamov, N. A. & Zhakhovskiy, V. V.
Surface 3D nanostructuring by tightly focused laser pulse: simulations by Lagrangian code and molecular dynamics,
J. Phys.: Conf. Ser., 2016, **681**, 012001[1-15]

16. Inogamov, N. A.; Zhakhovskiy, V. V. & Migdal, K. P.
Laser-induced spalling of thin metal film from silica substrate followed by inflation of microbump,
Appl. Phys. A, 2016, **122**, 432[1-9]

17. Inogamov, N. A.; Zhakhovskiy, V. V.; Khokhlov, V. A.; Kuchmizhak, A. A. & Kudryashov, S. I.
Blistering of film from substrate after action of ultrashort laser pulse,
J. Phys.: Conf. Ser., 2016, **774**, 012102

18. Inogamov, N. A.; Zhakhovskiy, V. V.; Khokhlov, V. A.; Petrov, Y. V. & Migdal, K. P.
Solitary Nanostructures Produced by Ultrashort Laser Pulse,
Nanoscale Research Letters, 2016, **11**, 177[1-13]

19. Kuchmizhak, A.; Vitrik, O.; Kulchin, Y.; Storozhenko, D.; Mayor, A.; Mirochnik, A.; Makarov, S.; Milichko, V.; Kudryashov, S.; Zhakhovskiy, V. & Inogamov, N.
Laser printing of resonant plasmonic nanovoids,
Nanoscale, 2016, **8**, 12352-12361

20. Migdal, K. P.; Petrov, Y. V.; Il'nitskiy, D. K.; Zhakhovskiy, V. V.; Inogamov, N. A.; Khishchenko, K. V.; Knyazev, D. V. & Levashov, P. R.
Heat conductivity of copper in two-temperature state
Appl. Phys. A, 2016, **122**, 408[1-5]

21. Pikuz, T. A.; Faenov, A. Y.; Ozaki, N.; Hartley, N. J.; Albertazzi, B.; Matsuoka, T.; Takahashi, K.; Habara, H.; Tange, Y.; Matsuyama, S.; Yamauchi, K.; Ochante, R.; Sueda, K.; Sakata, O.; Sekine, T.; Sato, T.; Umeda, Y. I.; Yabuuchi, T.; Togashi, T.; Katayama, T.; Yabashi, M.; Harmand, M.; Morard, G.; Koenig, M.; Zhakhovskiy, V.; Inogamov, N.; Safronova, A. S.; Stafford, A.; Skobelev, I. Y.; Pikuz, S. A.; Okuchi, T.; Seto, Y.; Tanaka, K. A.; Ishikawa, T. & Kodama, R.
Indirect monitoring shot-to-shot shock waves strength reproducibility during pump-probe experiments,
J. Appl. Phys., 2016, **120**, 035901[1-8]

22. Ashitkov, S. I.; Zhakhovskiy, V. V.; Inogamov, N. A.; Komarov, P. S.; Agranat, M. B. & Kanel, G. I.

The behavior of iron under ultrafast shock loading driven by a femtosecond laser,
AIP Conf. proc.,(accepted, in press, to be published in 2016:
<http://scitation.aip.org/content/aip/proceeding/aipcp> “Forthcoming titles: 19th Biennial APS
Conference on Shock Compression of Condensed Matter (SCCM15)”

23. Zhakhovsky, V. V.; Migdal, K. P.; Inogamov, N. A. & Anisimov, S. I.
MD simulation of steady shock-wave fronts with phase transition in single-crystal iron,
AIP Conf. proc., (accepted, in press, to be published in 2016:
<http://scitation.aip.org/content/aip/proceeding/aipcp> “Forthcoming titles: 19th Biennial APS
Conference on Shock Compression of Condensed Matter (SCCM15)”

24. Inogamov, N. A. & Zhakhovsky, V. V.
SIMULATIONS OF SHORT PULSE LASER-MATTER INTERACTION,
Lobachevskii Journal of Mathematics, 2017

25. Inogamov, N. A., Khokhov, V. A., Petrov, Y. V., Zhakhovsky, V. V., Migdal, K. P., Ilnitsky,
D. K., Hasegawa, N., Nishikino, M., Yamagiwa, M., Ishino, M., Kawachi, T., Faenov, A. Y.,
Pikuz, T., Baba, M., Minami, Y., & Suemoto., T.,
Rarefaction after fast laser heating of a thin metal film on a glass mount,
AIP Conf. proc., (accepted, in press, to be published in 2016:
<http://scitation.aip.org/content/aip/proceeding/aipcp> “Forthcoming titles: 19th Biennial APS
Conference on Shock Compression of Condensed Matter (SCCM15)”

26. Dyachkov, S., Parshikov, A., and Zhakhovsky, V.,
Ejecta From Shocked Metals: Comparative Simulations Using Molecular Dynamics and
Smoothed Particle Hydrodynamics,
AIP Conf. proc., (accepted, in press, to be published in 2016:
<http://scitation.aip.org/content/aip/proceeding/aipcp> “Forthcoming titles: 19th Biennial APS
Conference on Shock Compression of Condensed Matter (SCCM15)”

Дополнительная литература (наши публикации)

27. N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Ishino, N. Ohnishi, A. M. Ito, Y. Minami, M. Baba, A. Y.
Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, K. Kondo, and T. Suemoto,
The observation of transient thin film structures during the femto-second laser ablation process
by using the soft X-ray laser probe,
Conference: X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications
Symposium: SPIE Optics + Optoelectronics (to be published)

Внешняя дополнительная литература

[[1]] V. Y. Banine, K. N. Koshelev, and G. H. P. M. Swinkels,
Physical processes in EUV sources for microlithography,"
J. Phys. D: Appl. Phys. **44**, 253001 (2011).

[[2]] Dmitry Kurilovich, Alexander L. Klein, Francesco Torretti, Adam Lassise, Ronnie
Hoekstra, Wim Ubachs, Hanneke Gelderblom, and Oscar O. Versolato,
Plasma Propulsion of a Metallic Micro-droplet and its Deformation upon Laser Impact,
arXiv:1604.00214v1 [physics.plasm-ph] 1 Apr 2016

[[3]] Ch. Wu and L.V. Zhigilei,

Nanocrystalline and Polyicosahedral Structure of a Nanospike Generated on Metal Surface Irradiated by a Single Femtosecond Laser Pulse,
J. Phys. Chem. C **120**, 4438-4447 (2016).

[[4]] Kanel, G. I. and Razorenov, S. V. and Fortov, V. E.,
Shock-Wave Phenomena and the Properties of Condensed Matter,
Springer, 2004.

G. I. Kanel', and V. E. Fortov, and S. V. Razorenov,
Shock waves in condensed-state physics,
Phys. Usp. **50**, 771 (2007).

[[5]] M. B. Agranat, S.I. Anisimov, S.I. Ashitkov, V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, P.S. Komarov, A.V. Ovchinnikov, V.E. Fortov, V.A. Khokhlov, V.V. Shepelev,
Strength properties of an aluminum melt at extremely high tension rates under the action of femtosecond laser pulses,
JETP Lett. **91**(9), 471-477 (2010).

S. I. Ashitkov, M. B. Agranat, G. I. Kanel', P. S. Komarov, and V. E. Fortov,
Behavior of Aluminum near an Ultimate Theoretical Strength in Experiments with Femtosecond Laser Pulses,
JETP Lett. **92**(8), 516-520 (2010).

[[6]] A. Y. Vorobyev and Chunlei Guo,
Enhanced absorptance of gold following multipulse femtosecond laser ablation,
Phys. Rev. B **72**, 195422 (2005).

A. Y. Vorobyev and Chunlei Guo,
Direct observation of enhanced residual thermal energy coupling to solids in femtosecond laser ablation,
Appl. Phys. Lett. **86**, 011916 (2005).

A.Y. Vorobyev and Chunlei Guo,
Femtosecond laser nanostructuring of metals,
Optics Express **14**(6), 2164-2169 (2006).

[[7]] V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, K. Nishihara,
New mechanism of the formation of the nanorelief on a surface irradiated by a femtosecond laser pulse,
JETP Lett. **87**(8), 423-427 (2008).

V. Zhakhovskii, N. Inogamov, K. Nishihara,
Laser ablation and spallation of crystalline aluminum simulated by Molecular Dynamics,
J. Phys.: Conf. Ser. **112**, 042080 (2008).

[[8]] S.I. Ashitkov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, Yu.N. Emirov, M.B. Agranat, I.I. Oleinik, S.I. Anisimov, and V.E. Fortov,
Formation of Nanocavities in Surface Layer of Aluminum Target irradiated by Femtosecond Laser Pulse,
JETP Lett. **95**(4), 176-181 (2012).

[[9]] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, Yu.N. Emirov, K.V. Khichshenko, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, M. Ishino, M. Kando, N. Hasegawa, M. Nishikino, P.S. Komarov, B.J. Demaske, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, T. Kawachi, I.I. Oleynik, Ultrafast lasers and solids in highly excited states: results of hydrodynamics and molecular dynamics simulations, J. Phys.: Conf. Ser. **510**, 012041 (2014).

N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, S.I. Ashitkov, Yu.N. Emirov, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, M. Ishino, M. Kando, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Kawachi, M.B. Agranat, A.V. Andriash, S.E. Kuratov, and I.I. Oleynik, Surface nano-structuring produced by spallation of metal irradiated by an ultrashort laser pulse, J. Phys.: Conf. Ser. **500**, 112070 (2014).

[[10]] C. Wu, M.S. Christensen, J.-M. Savolainen, P. Balling, and L.V. Zhigilei, Generation of subsurface voids and a nanocrystalline surface layer in femtosecond laser irradiation of a single-crystal Ag target, Phys. Rev. B **91**, 035413 (2015).

[[11]] P.N. Mayer and A.E. Mayer, Late stages of high rate tension of aluminum melt: Molecular dynamic simulation, J. Appl. Phys. **120**, 075901 (2016).

4.1. Обоснование сохранения актуальности изучаемой в рамках Проекта 2014 научной проблемы

Актуальность лазерной проблематики за 2.5 года выполнения проекта РНФ 14-19-01599 только возрастала. Видно, что в год подачи проекта в 2014 г. коллектив встал на перспективную дорогу. Действительно, например, на направлении лазерной фабрикации уединенных микро- наноструктур (куполов, конусов, струй) и массивов из них имело место значительное продвижение и в эксперименте, и в теории.

Скажем несколько слов по истории направления. Первые работы были выполнены в 2003, 2004 годах и связаны с именами Бориса Николаевича Чичкова и Ёшики Наката, см. ссылки в наших работах по проекту РНФ [1,4,15-18] в списке в п. 1.3. Группы Чичкова и Накаты все эти годы продолжали исследования такого рода. Чичков работал над технологией LIFT (laser induced forward transfer) и лазерной печатью (напечатать живую ткань, см. <http://www.technosphaera.ru/news/1892>). Наката увлекался созданием плотных (когда расстояния между куполами порядка диаметра купола) массивов с помощью техники интерференции нескольких лучей. Он противопоставляет строго упорядоченные массивы наноэлементов лазерной фабрикации неупорядоченным наноструктурам, которые создаются химическими средствами.

В чем же заключается продвижение за годы 2014-2016? Благодаря работе по проекту были вскрыты принципы формирования уединенных наноструктур. Не в виде догадок, а с помощью физически ясной модели и численного моделирования. Была выяснена роль быстрого плавления, отскока пленки от подложки, ее полета и капиллярных эффектов; см. работы [1,4], цитируемые в списке статей, выполненных по проекту (список находится в конце п. 1.3), см. итоговый отчет по проекту. Была описана ключевая роль теплопроводности и неравновесной кристаллизации в формировании финальной геометрии структур [15-18] (напомним, что предыдущие представления связывали происхождение застывших струй в вершинах куполов сходимением неких радиально симметричных волн к центру и усилением амплитуды этих волн из-за концентрации к оси, см. справку в вводной части работы [16]). Нами были проанализированы кристаллические структуры вблизи области разрыва затвердевающей струи [24]. Показано, что в результате образуется весьма острый наконечник с радиусом в единицы нанометров. Найдено, что в окрестности острия имеются области упорядоченности с икосаэдрической симметрией, показанные на рис. 4.1.1, см. также итоговый отчет.

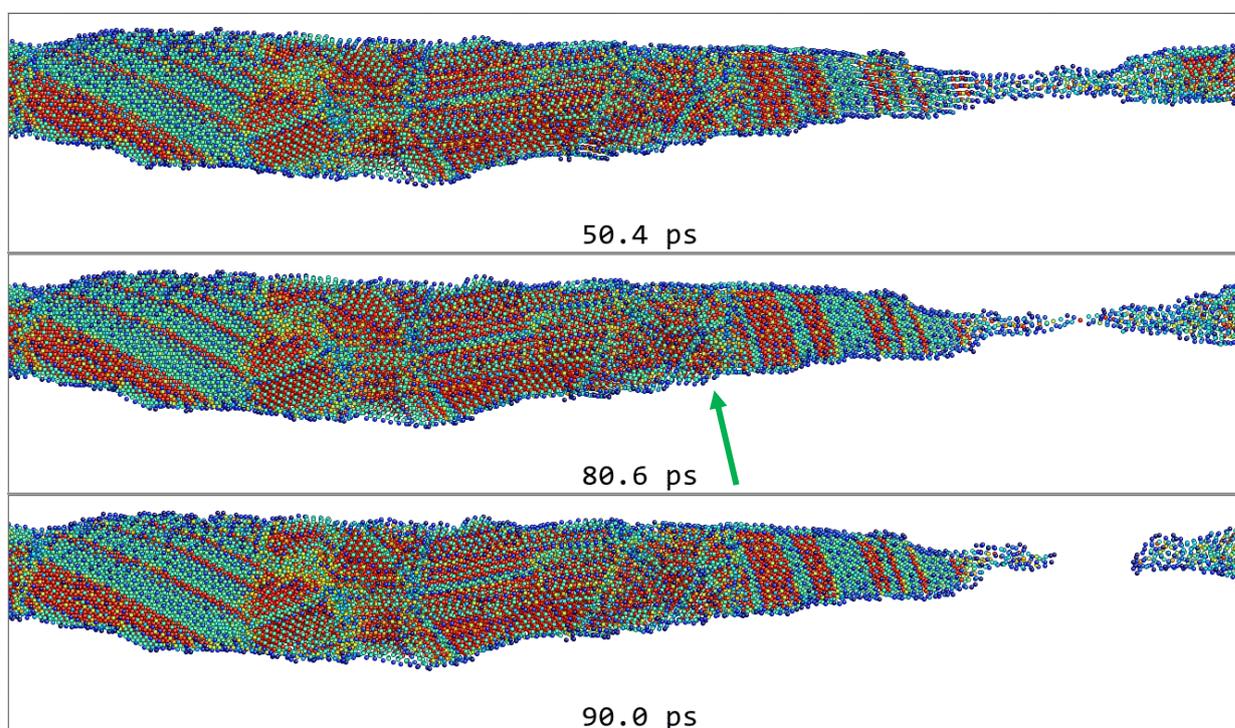


Рис. 4.1.1. Пространственно-временная окрестность разрыва шейки струи, находящейся в процессе рекристаллизации. Красным цветом отмечена ГЦК (гранцентрированная кубическая упорядоченность) решетка, голубым – ГПУ (гексагональная плотноупакованная) решетка, синие кружочки – атомы на поверхности. Каждый кружочек – отдельный атом. Построено с помощью пакета AtomEye. Это вид сбоку на шейку и прилегающую струю. Справа находится отлетающая наночастица, слева формирующееся nanoострие. Рисунок взят из статьи [24], входящей в итоговый отчет. В [24] это рис. 4. Стрелка указывает на одну из структур с симметрией икосаэдра.

В этом отношении (зародыши роста в виде икосаэдра) исследованные нами уединенные струи, формирующиеся при облучении на дифракционном пределе, схожи с множественными нитями жидкой фазы в разрушающейся нанопене, исследованными в недавней работе [[3]], см. литературу к п. 1.3. Участок нити с множественным появлением икосаэдров показан на рис. 4.1.2.

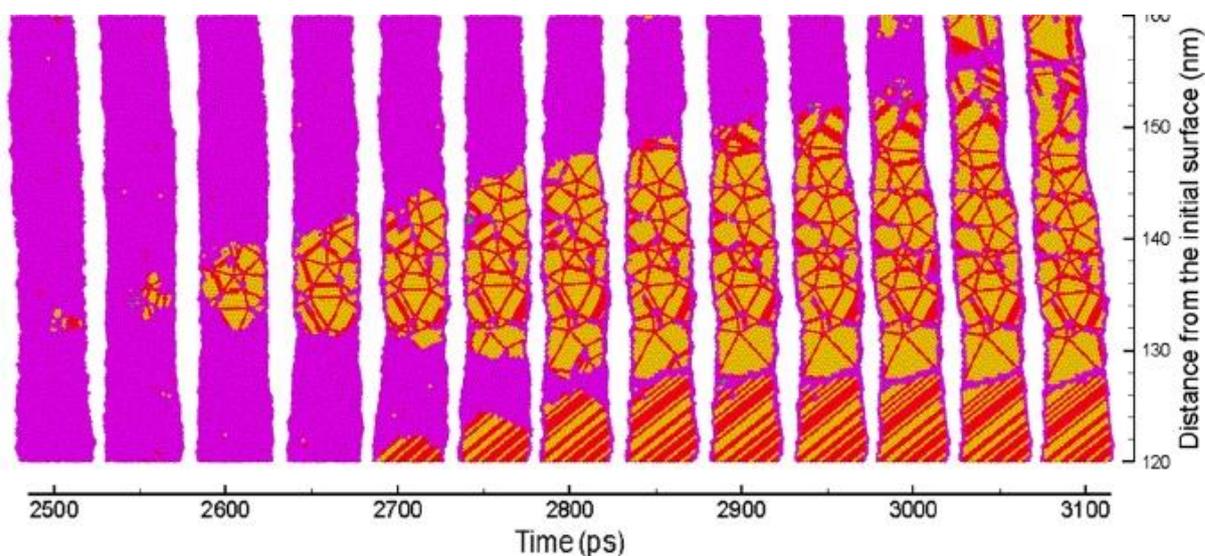


Рис. 4.1.2. Формирование кристаллитов с пятикратной симметрией в нитке затвердевающей жидкой фазы. Взято из работы [[3]], в которой это рисунок под номером 6b. Рисунок взят для сравнения с нашим рисунком 4.1.1, на котором тоже видны области с пятикратной симметрией, но для другого металла (на рис. 4.1.1 золото, на рис. 4.1.2 - серебро) и при совершенно других условиях образования (уединенная струя против нитей в пене).

Одновременно намного продвинулись экспериментаторы. Они представили нам обширный новый материал, собранный в разных режимах воздействия и на разных пленках [13]. Плюс были выполнены детальные измерения геометрических параметров посредством метода электронной дисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДРС) [13] (ранее авторы опытов публиковали в основном фотографии наноструктур на сканирующем электронном микроскопе). Наши теории и моделирование превосходно количественно подтвердились на опытах с ЭДРС [13]. Наше моделирование позволило наглядно представить протекающие процессы (см. фильмы, приложенные к статье [13]). Это очень существенное обстоятельство, правильные представления намного облегчают труд исследователей-экспериментаторов.

В настоящее время в экспериментальных группах, связанных с нашей заявкой, готовятся новые, намного более амбициозные эксперименты, см. п. 1.2. В частности, будут поставлены опыты по влиянию прозрачной жидкой фазы на результаты воздействия на мишень; будут изучены другие условия фокусировки (высокие NA, вихревой луч). Будут проведены опыты с использованием как мягкого рентгена (KPSI, 89.3 эВ), так и жесткого рентгена – длина волны порядка Ангстрема. Это означает, что актуальность исследований по продолжению проекта возросла.

Другие задачи, которые будут решены в рамках заявки на продление, также являются весьма актуальными сегодня с одной стороны, и тесно связанными с исполненным грантом РФ 14-19-01599 с другой стороны. Например, трехмерные уединенные микро-наноформирования имеют прямое отношение к задаче о сложнейшем пространственном [[2]] распылении капель, которая будет решена на следующем этапе. Распыление капель изучают для оптимизации машин для литографии, использующих жесткое УФ излучения (оловянная лампочка, см. п. 1.3 и [[1,2]]).

Управляемое создание трехмерных наноформирований востребовано в быстро растущей области приложений наноплазмоники. Наше предыдущее исследование [19], выполненное по гранту РФ, показало, как форма и размеры уединенного формирования влияют на

активность наноструктур, собранных из таких уединенных формирований. Речь идет об активности в смысле усиления рамановского сигнала и фотолюминесценции. В новой заявке мы продвинемся намного дальше. Взаимодействием падающего ЭМ излучения и плазмонного поля будут созданы рельефы на поверхности мишени. Процессы будут описаны с помощью комбинации средств электродинамики сплошных сред с одной стороны и гидродинамического/МД моделирования с другой.

Исключительно современными являются проблемы использования рентгеновских лазеров разных классов как для фабрикации наноструктур, так и для разнообразных (см. пп. 1.2, 1.3) диагностических целей.

Интересный класс задач связан с исследованиями выхода ударной волны, бегущей по конденсированной среде, на границу с вакуумом этой среды в случае, когда граница не является просто плоской поверхностью, а имеет трехмерные возмущения. Возмущения (шероховатости) отклоняют форму границы вверх и вниз от невозмущенной плоскости. Класс двумерных возмущений был изучен в работах [3,26], выполненных за 2.5 года работы по проекту РФФИ 14-19-01599. Предварительные расчеты показывают, что трехмерность вносит качественные отличия.

Важнейшим является также развитие алгоритмов и программных пакетов для описания стоящих перед нами физических задач. Они относятся к (i) двухтемпературной гидродинамике, которую предстоит усовершенствовать с учетом данных, полученных при работе над грантом по уравнению состояния [9], теплопроводности [12,20] и коэффициенту электрон-ионного обмена теплом [12,14]. (ii) Будут применены наработанные методики к созданию новых потенциалов межатомного взаимодействия (воды, взаимодействия воды с металлами). (iii) Будут развиты алгоритмы молекулярно-динамического моделирования для описания сопряжения разных веществ через контактную границу. Это позволит решать важные в прикладном и фундаментальном отношении проблемы лазерного воздействия с абляцией в жидкую фазу и многослойными объектами. (iv) Будут развиты алгоритмы, описывающие двухтемп эфф в неодном геом спШ

Именно в связи с вышеизложенным наш коллектив обращается в Российский научный фонд с заявкой о продлении гранта.

4.1. Substantiation of maintenance of topicality of studied scientific problems in frames of the 2014 Project

Laser problem matter merely increases in topicality for the last 2.5 year of accomplishment of RSCF project 14-19-01599. It is obvious that our research group have chosen a promising way at the year of 2014 when the project has been started. Indeed, for example, in direction of laser processing of micro- and nano-structures (cupolas, cones, jets) and their arrays the considerable development takes place in both experiment and theory.

Let's say a few words about history of this research area. The first works were performed in 2003, 2004 years in groups led by Boris Chichkov and Yoshiki Nakata, see references in our papers under this RSCF project [1,4,15-18] in the list presented in the section 1.3. Those groups continue their works all these years. Chichkov developed the laser induced forward transfer technology (LIFT) and laser printing technology (to print a living tissue, see <http://www.technosphaera.ru/news/1892>). Nakata was keen on production of dense arrays (where a distance between cupolas is about a cupola diameter) with the help of interference between

several beams. He contrasts the well-ordered laser-fabricated arrays of nano-elements with poorly ordered nano-structures produced by chemical technology.

What are our advances for 2014-2016 years? Basics of solitary nano-structure formation were revealed thanks to our works under the project. Not from some conjectures but with help of a clear physical model and corresponding computational simulation. The roles of fast melting, recoil of film from substrate, its fly and capillarity effects have been cleared, see works [1,4] cited in the papers supported by the project (the paper list is in the end of section 1.3), see also the final report on the project. The key role of thermal conductivity and nonequilibrium crystallization in formation of final geometry of structures was described [15-18] (we would remind you that in the previous views the frozen jets formation on the top of cupola was connected to converging radial waves and enhancement of wave amplitudes due to converging at the central axis, see information in introduction of [16]). We analyzed the crystal structures in the vicinity of fracture area of the frozen jet [24]. It was shown that as a result of fracture the very sharp tip with radius of a few nanometers is formed. It was found that domains with icosahedron atomic order are formed in the vicinity of the tip, as illustrated on Fig. 4.1.1., see also the final report.

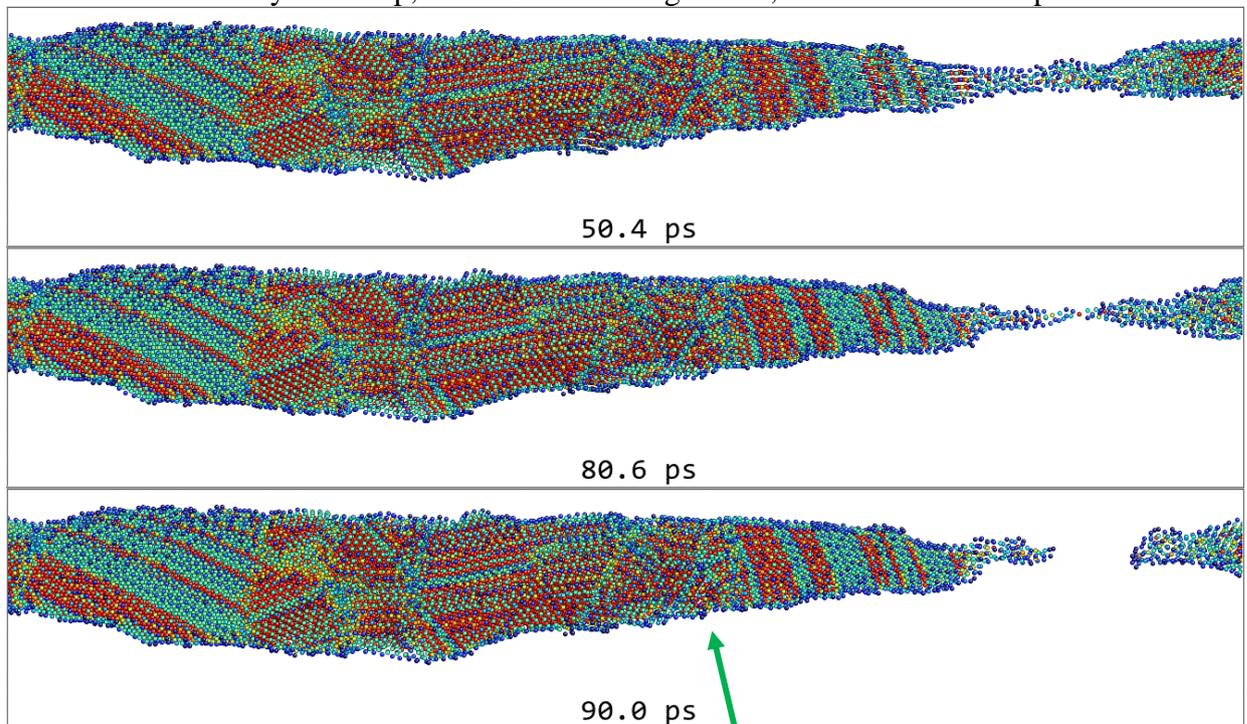


Рис. 4.1.1. Side view of spatial-time vicinity of fracture of jet neck, which is in the process of recrystallization. Red color indicates fcc (face center cubic) lattice, blue – hcp (hexagonal close packed), dark blue circles show atoms on surface. Flying nano-particle is on the right, the forming tip is on the left. Arrow shows one of the atomic structure with icosahedron symmetry. Picture is taken from [24], included in the final report. Plotted with program AtomEye.

In respect of nuclei growth in form of icosahedrons the solitary jets formed by expose at diffraction limit, which are studied in our group, are similar to multiple filaments of liquid phase in decaying nanofoam studied in the recent work [3], see literature to sec.1.3. The section of filament with many icosahedrons is shown on Fig. 4.1.2.

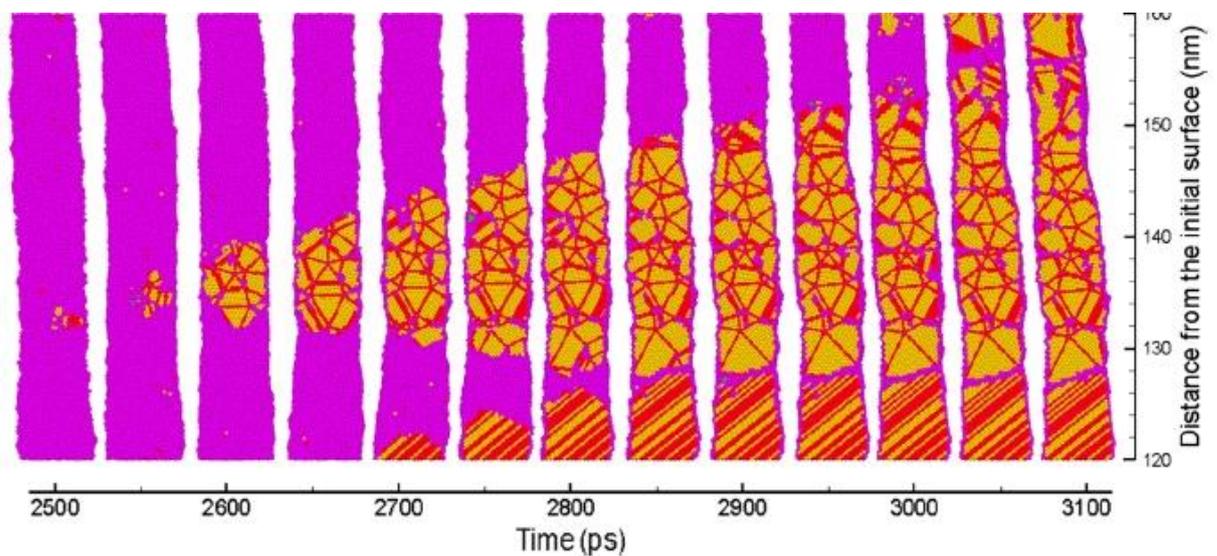


Рис. 4.1.2. Formation of crystallites with five-fold symmetry in filament of freezing liquid phase. Taken from [3], in which the figure has number 6b. It is taken to compare with our figure 4.1.1 in which the areas with five-fold symmetry are also visible, but for another metal (gold is on Fig. 4.1.1., silver – on Fig. 4.1.2.) and absolutely different conditions of formation (solitary jet versus filaments in foam).

Experimental works are advanced much too. They gave us the extended new results collected in different regimes of expose and for different films [13]. Plus the detailed measurements of geometrical characteristics were performed by electron dispersed X-ray spectroscopy (EDXS) [13] (before the authors published largely pictures of nanostructures obtained on scanning electron microscope). Our theories and simulations were perfectly confirmed in these experiments with EDXS [13]. Our simulation allows to present dramatically the running processes (see movies attached to [13]). It is an important circumstance, because the correct views make easier the work for experimentalists.

At present time the new highly ambitious experiments are prepared in the experimental groups connected with our proposal, see section 1.2. In particular, the experiment on effect of transparent liquid phase on results of action on a target will be performed. Also the other conditions of focusing (high NA, vortex beam) will be studied. Experiments with soft X-ray (KPSI, 89 eV), as well as the hard X-ray with wavelength of the order of Angstrom, will be carried out. It means that our research problems included in this proposal merely increases in topicality.

Other problems, which will be solved in frame of this extension of proposal, are also highly topical today on the one hand, and strongly connected with the RSCF grant 14-19-01599 on the other hand. For instance, three-dimensional solitary micro-nano-formations have direct connection to problem of very complex spatial fragmentation of droplets [2], which will be solved on the next stage. Fragmentation of droplets is studied for optimization of lithography machines using hard UV radiation (a tin lamp, see section 1.3 and [1,2]).

The guided fabrication of tree-dimensional nano-forms is required in rapidly expanding area of nanoplasmonics applications. Our previous research [19] performed under the RSCF grant, demonstrated that both form and sizes of solitary formation affect on activity of nano-structures assembled from such solitary formations. We are talking in sense of enhancement of Raman signal and photoluminescence. In this new extension of project we will advance much far. Interaction of incident EM radiation and plasmon field will result reliefs on target surface.

Processes will be described with the help of combination of tools of electrodynamics of continuous media on the one hand, and hydrodynamics and MD modeling on the other.

The problems of usage of X-ray laser of different classes for fabrication of nano-structures, as well as various diagnostic purposes (see sections 1.2, 1.3) , are exceptionally modern.

The interesting class of problems is connected with studies of entrance of shock wave, propagating in condensed phase, on a boundary of this media with vacuum in the case where the boundary is not simple flat surface but it has three-dimensional perturbations. Perturbations (roughness) deflect the shape of boundary up and down from non-perturbed plane. Class of two-dimensional perturbations was studied in [3,26], which were accomplished with 2.5 years of works under RSCF grant 14-19-01599. Our preliminary calculations show that three-dimensionality gives qualitative differences.

Development of algorithms and program packages for description of physical problems confronting us is of critical importance task. Among them (i) two-temperature hydrodynamics which will be improved with taking into account the data obtained in work on equation of state [9], thermal conductivity [12,20] and coefficient of electron-ion energy exchange [12,14]. (ii) The acquired techniques will be applied for development of new interatomic potentials (effective potential for water and its interaction with metals). (iii) Algorithms for MD simulation on the contact between different materials, including effective interatomic potentials, will be developed. It allows solving the problems important for applications and fundamental physics of laser-matter interaction of ablation into liquid phase and laminated objects. (iv) The new algorithms for SPH method used for describing two-temperature effects in non-uniform geometry will be developed.

For reasons stated above our group addresses to the Russian Science Foundation for extension of our current grant.

4.2. Новые задачи, которые предполагается решить в рамках Проекта 2017, их научная значимость, масштабность и новизна. Взаимосвязь Проекта 2017 с Проектом 2014, обоснование их научного единства

Все задачи, которые заявлены выше в пп. 1.2, 1.3 и 4.1 заявки на продление, являются новыми. Хотя, безусловно, они суть продолжение и развитие исследований, начатых при поддержке гранта РФФ 14-19-01599. Дополнительно обсудим степень новизны и, главное, значимость.

Основное содержание гранта РФФ 14-19-01599 было сосредоточено вокруг обобщения кинетики, термодинамики и гидродинамики плотных горячих сред, нагретых лазером, на трехмерную геометрию. В западной терминологии эти состояния называются «warm dense matter - WDM» и «high energy density - HED». Таким образом, речь идет о 3D WDM, 3D HED. В этом же русле будет выполнена заявка на продление. Плюс в заявке используются наработки, созданные с помощью проекта РФФ 14-19-01599. Поэтому научное единство представляется несомненным.

Пространственное обобщение (3D вместо 1D) весьма значимо, поскольку реальные ситуации всегда трехмерны. Одномерное приближение (движение строго по нормали к плоскости мишени) – это лишь первое приближение. В нем нельзя описать краевые эффекты при больших пятнах фокусировки на мишень и нельзя описать течения при острой фокусировке. Между тем задачи с острой фокусировкой или манипуляцией освещенностью и поляризацией (фазовые пластинки) выходят на первый план в технологиях LIFT/LIBT (laser induced forward/backward transfer), SERS (surface enhanced Raman scattering), флюоресценции уединенных образований в темном поле и в важных наноплазмонных приложениях.

Другие объекты с неустранимой трехмерностью – это мелкие частицы. Здесь возникает тематика с лазерным воздействием на микро- и наночастицы. Вокруг частиц сконцентрировано исключительно важное направление исследований. Оно покрывает области (А) лазерной фабрикации частиц, (В) управления функцией распределения по размерам в коллоидах, (С) мелкодисперсного дробления частиц-капель для литографических машин (Extreme ultraviolet lithography) и (D) пыления конденсированной фазы при выходе ударной волны на не плоскую границу с вакуумом (объемные возмущения на границе). Кроме того, сюда относятся (Е) вопросы вычисления следов интерференции падающей и плазмон-поляритонных (ППР) волн вокруг трехмерных объектов, например, частица на подложке.

Значимость и масштабность, таким образом, обрисованы. Перейдем к новизне и взаимосвязи с предыдущим этапом задач, которые будут решены.

Впервые (нам неизвестны работы с решением таких задач) будет решена проблема воздействия сложно распределенного и поляризованного лазерного излучения на мишени сложной пространственной структуры. Под сложным ЭМ полем понимается облучение через объективы $NA > 0.5$, фазовые пластинки и интерференция внешней ЭМ волны и ППР волн. Говоря «сложные мишени», мы имеем в виду пленочные и слоистые мишени и мишени, ограниченные в направлении, перпендикулярном пучку (например, малое кольцо, лежащее на плоскости подложки внутри фокального пятна).

Пространственные эффекты, вызванные распределением ЭМ поля и геометрией мишени, сочетающиеся с двухтемпературностью и трехмерной диссипацией вместе с пространственной динамической деформацией, делают проблему чрезвычайно трудной для ее теоретического (построение физической модели, осмысление результатов) и численного решения. При том, что в части случаев, которые будут рассмотрены в рамках заявки, размеры систем относятся к мезоскопическим размерам, то есть в наших условиях по числу вовлеченных атомов превышают 10^9 . Это создает сложности при молекулярно-динамическом (МД) моделировании. Эти осложнения будут преодолены с помощью применения методов скалирования, разработанных при выполнении гранта РФФ 14-19-01599; скалирование по капиллярному числу и по тепловому числу начальных данных для МД постановки, см. публикации [13,18,20] из списка к п. 1.3.

Другим мощным инструментом решения такого рода проблем является сочетание МД методов с SPH (smooth particles hydrodynamics) подходом. SPH подход снимает вопросы увеличенных размеров. Это эффективный код, решающий задачи с пространственными ударными волнами, контактными разрывами, неоднородной геометрией, образованием струй и фрагментацией конденсированной фазы. В рамках заявки на продление, многопроцессорная версия этого кода впервые будет приспособлена к решению задач о трехмерных эффектах при выходе ударной волны на поверхность и о распылении капель

для машин литографии. Такие капли имеют радиусы в десятки микрон [[1,2]]. Пределом по численным ресурсам при МД моделировании является капля с радиусом 100-150 нм. Прямое МД моделирование более крупных объектов пока невозможно даже с привлечением лучших многопроцессорных машин, которые имеются в мире.

Экспериментаторы, с которыми мы сотрудничаем, в своих опытах вплотную подходят к такому кругу задач. В опытах они видят сложное облако распыления, но не могут понять механизмы его формирования. Соответственно наши работы будут весьма кстати.

Будет проведен сравнительный анализ лазерного воздействия при разной длительности импульса. Будут получены новые результаты, относящиеся к микро-наноструктурированию наносекундными импульсами пленочных мишеней. Опыты в этой области имеются, но ясной физической модели, которая на количественном уровне объясняла опыты, нет.

Будут продолжены исследования термодинамических, прочностных и транспортных характеристик веществ, нагруженных мощным лазерным импульсом. Будут исследованы пространственные эффекты при выходе ударной волны на шероховатую поверхность (наши предыдущие работы [3,26] были ограничены случаем 2D возмущений).

Будет изучен круг важных вопросов по рентгеновским лазерам. Задачи будут решены при разной энергии фотона (от мягкого 100 эВ до жесткого 10-20 кэВ) и разной длительности импульса. В частности, сравнение абляции мягким рентгеном при длительности импульса 7 пс и 100 фс. Опыты и расчеты с воздействием мягким рентгеном были выполнены нами и экспериментаторами из KPSI ранее. В следующем году предстоят опыты с использованием импульсов длительностью 100 фс. Под эти эксперименты будет проведено численное моделирование.

Будут решены задачи с жестким рентгеновским воздействием на многослойные структуры (это важно для исследования повреждения многослойных зеркал).

Будут впервые разработаны численные методы построения дифракционных данных при прохождении и отражении ударной волны (УВ) от свободной поверхности. Такие рентгеновские данные строятся по данным о текущей упорядоченности атомов, извлекаемым из МД моделирования. Ранее рентгеновская диагностика процессов отражения и разрушения конденсированной среды при отражении УВ не рассматривалась (хотя для слежения за распространением УВ применялась). Прежде процессы разрушения изучались либо с помощью мишеней миллиметровой толщины и диагностик VISAR или ORVIS [[4]], либо с помощью pump-probe методик с ультракороткими оптическими лазерными импульсами [[5]]. При этом VISAR или ORVIS осуществляют слежение за движением границы с вакуумом после выхода на нее волн сжатия и разрежения. Дифракционные данные собираются в сложном pump-probe эксперименте с субнаносекундным оптическим лазерным генератором УВ (pump) в пленке толщиной несколько микрон и с фемтосекундным probe импульсом жесткого рентгена от лазера на свободных электронах (XFEL). При этом, разумеется, pump и probe импульсы синхронизованы во времени (это технически непростая задача).

4.2. New problems for 2017 year, their scientific importance, significance, and novelty. Links between this application and the project of 2014 year, their scientific unity

All problems described in Sections 1.2, 1.3, and 4.1 above are new. But of course all of them are prolongations and development of the studies started thanks to the RSCF grant 14-19-01599. Let us discuss the degrees of novelty and importance.

Main content of the RSCF grant 14-19-01599 is around generalizations onto 3D geometry the kinetics, thermodynamics, and hydrodynamics of dense hot media created by laser action. Those states are called «warm dense matter - WDM» and «high energy density - HED» - in our case this is two-temperature WDM and two-temperature HED. The same items are considered in the application for prolongation. We use achievements obtained thanks to the RSCF grant 14-19-01599 in the new application. Therefore the scientific unity of the grant and the application is unquestionable.

Spatial generalization (3D in place of 1D) is very valuable because in reality the situations are 3D. 1D approximation (motion strictly at the direction normal to the plane of a target) – is only the first order approximation. We cannot describe the edge effects when irradiated spot is large and central part of motion is 1D and we cannot describe flows created in the cases of tight focusing. But the problems with tight focusing and complicated polarization (phase plates) are now come to the list of the main problems for the technologies LIFT/LIBT (laser induced forward/backward transfer), SERS (surface enhanced Raman scattering), fluorescence of solitary structures in dark field and in important applications for nanoplasmonics.

Other objects with unavoidable 3D-lity are small particles. This is the direction considering micro- and nanoparticles. In modern science a lot of attention is paid to this important direction. It covers the directions of (A) laser generation of particles, (B) regulation of the size distribution function of particles in the colloidal solutions, (C) fragmentation of 10-100 microns liquid Sn droplets into much smaller droplets for the Extreme ultraviolet lithography, and (D) fragmentation of condensed phase during reflection of shock at a rear side boundary. Beside the listed problems there is the problem (E) concerning exact predictions of the interference traces of interaction of incident wave and plasmon-polariton modes around small 3D objects (such as, e.g., a particle at substrate). The traces are imprinted into solidified matter around the 3D obstacle.

Thus above we describe importance and scientific significance. Let us move to novelty and to the close links with the previous RSCF grant 14-19-01599.

For the first time the problem of action of laser pulse with complicated intensity and polarization distributions onto geometrically complicated 3D objects will be solved.

The combination of the 3D effects with two-temperature physics and strong spatial deformations of target does the problem very difficult for theoretical and numerical solution. Another difficulty is connected with size of objects. In a several tasks this is the mesoscopic objects including number of atoms more that 10^9 . It is difficult to run direct MD simulations in these cases. These difficulties will be overcome using the scaling methods developed during the RSCF grant 14-19-01599; see papers [13,18,20] in the reference list for Section 1.3.

Another very powerful approach to this problem is based on combination of the MD code and the SPH (smooth particles hydrodynamics) approach. The SPH code may be used for systems of any size. This is effective code solving the problems with spatially non-trivial shocks, contact jumps, 3D-lity, jetting, and decay of condensed phase into small fragments.

During forthcoming work the multiprocessor version of the SPH code will be for the first time modified for solving the problems concerning 3D effects during reflection of shock from a rear side and dispersion of a droplet for EUV lithography. These droplets have initial sizes equal to tens of microns [[1,2]], while the MD limit for droplets has radius 100-150 nm. Direct MD modeling of a ten micron droplet is impossible even for the best multiprocessor computers in the world.

Experimentalists, who ask us to solve this problem (droplets in EUV lithography) for them, have results of experiments with dispersion of droplets. They see complicated ejected 3D cloud after laser impact. But they cannot understand the underlying processes. Therefore our work will be very valuable for EUV lithography.

We will give comparative analysis of laser actions with different durations of pulse. We will obtain new results relative to laser structuring of a film target. There are experiments in this direction, but the clear theoretical model is absent.

We will continue studies of thermodynamic and material strength of targets loaded by a strong laser pulse. We will investigate the spatial effects during reflection of shock from a rough rear side. Our previous papers [3,26] were limited to the 2D case.

We will study problems relative to X-ray lasers. There are problems which must be solved for different X-ray laser parameters: different photon energies from soft to hard; and different durations. In particular, comparison of ablation by soft X-ray at different durations: 7 ps and 100 fs. Experiments and our simulations for ablation by soft 7 ps pulse were done by us and experimentalists from KPSI earlier. In the 2017 year experimentalists will do experiments with soft X-ray and duration 100 fs. Our simulations are aimed to predict and support these experiments.

We solve problems with hard X-ray acting onto multilayer structures (this is important for studies of damage of mirrors).

We will for the first time develop methods of calculation of diffraction data from the compression wave propagating in polycrystalline material and reflecting from a rear side free boundary (contact with vacuum). These data are plotted relative to the current ordering of atoms in the MD simulation. Before the X-ray diffraction probing was not used for tracing of reflection and fragmentation (but was used for tracing of propagation). Before the fragmentation processes was studied by VISAR and ORVIS interferometers [[4]], or by optical pump-probe methods with ultrashort laser pulses [[5]]. Diffraction data will be collected in the experiments with laser loading synchronized with X-ray diffraction imaging.

4.3. Предлагаемые методы и подходы решения поставленных задач

Заявка на продление и исполненный грант РФФИ 14-19-01599 тесно связаны как по физической проблематике, так и применяемым методам. Сюда относятся
(1) исследования по физике состояний с возбужденными электронами [9,10,12,14,20];
(2) двухтемпературная гидродинамика (одномерный лагранжев код: 2Т-1D-НД) [11,12,14,25], в который встраиваются данные по двухтемпературной физике из предыдущего пункта;
(3) отыскание межатомных потенциалов для последующего использования в молекулярно-динамическом (МД) коде;

(4) распараллеленный МД код, опирающийся на динамическое разбиение по ячейкам Вороного [1,3,4-7,11,13,15-18,22-26]. Это подвижное разбиение, следующее за движущимся веществом, что позволяет экономить вычислительные ресурсы в задачах со струями, разрушением, фрагментацией или вспениванием. В этом преимущество нашей методики перед хорошо известным кодом LAMMPS (Molecular Dynamics Simulator, lammmps.sandia.gov), в основе которого лежит разбиение, которое не меняется во времени. Поэтому загрузка процессоров в LAMMPS становится не оптимальной, когда в конденсированной среде появляются сильно разреженные объемы (пустоты) или увеличивается отношение площади свободной поверхности к объему, занятому плотной средой.

МД код при необходимости применяется вместе с программой, которая с помощью алгоритма Монте-Карло (МК) учитывает теплопроводность среды. Такая комбинированная версия МД-МК позволяет решать задачи с исключительно важным в тепловом и динамическом плане фазовым переходом плавление – рекристаллизация; этот фазовый переход резко меняет механические характеристики среды и сильно сказывается на движении, см., например, [15-18];

(5) SPH (smoothed particles hydrodynamics). Код позволяет аккуратно моделировать движения конденсированной среды с большими деформациями. Главное то, что этот код не имеет ограничений по числу атомов, в отличие от МД кода;

(6) двухтемпературный код в двумерной геометрии (2Т-2D). Данный код описывает перераспределение однородно или неоднородно поглощенной лазерной энергии по объемному образцу за счет теплопроводности. Вычисления осуществляются с учетом передачи энергии из горячих электронов ионам. Код описывает непрерывно и двухтемпературную, и однотемпературную стадии;

(7) Методики аналитических и численных расчетов электромагнитных (ЭМ) полей для задач с $NA > 0.5$ объективом, фазовой пластинкой, интерференцией между внешней ЭМ волной и плазмон-поляритонным (ППР) полем. ППР поле связано с неоднородностью мишени (наноантенна, шарик или купол на подложке).

Именно сочетание дополняющих друг друга методик позволит осуществить обширную программу работ по проекту на продление.

В рамках этого проекта все указанные коды и методики будут существенно развиты или разработаны впервые (например, код в пункте 6 пока не имеет мировых аналогов).

Будет продолжено обобщение кода (1) на большие времена, когда давление, связанное с динамическим напором, сильно уменьшается. И поэтому заметную роль начинает играть испарение и связанное с ним давление паров. Такое усовершенствование потребует замены сетки. По мере расширения объема области движения приходится наращивать лагранжеву сетку с одной стороны и уменьшать число узлов в ней за счет увеличения пространственного шага.

Будет создан эффективный потенциал взаимодействия точечных молекул воды с целью воспроизведения ее механических свойств при сжатии, а также эффективный потенциал взаимодействия воды и атомов золота для расчетов методом МД. Такая модификация необходима для анализа устойчивости контакта золото-вода в задаче об абляции металла в жидкость.

Важнейшей является задача разработки гибрида, в котором МД-МК код (4) применяется совместно с методиками (7). Именно это требуется для задач со сложно распределенным ЭМ полем и комплексными мишенями.

Аналогично код SPH (5) будет сильно видоизменен с целью одновременного описания и диссипации, связанной со сложным ЭМ полем, и последующего движения. Эти изменения необходимы для решения задачи о распылении капель в литографических машинах (Extreme ultraviolet lithography, EUV lithography).

Код (6) создается впервые. Он будет применен в задаче об инкубации амплитуды возмущений при формировании с помощью череды лазерных воздействий периодических поверхностных структур (laser induced periodic surface structures, LIPSS). Кроме того, будет изучена задача о влиянии конечного размера лазерного пучка на не одномерное тепловое поле в облучаемой мишени.

Для успеха проекта важное значение имеет разработка методик (7) в сочетании с кодами (4) и (5).

4.3. Proposed methods and approaches for solving the assigned problems

This proposal and completed grant RNF 14-19-01599 are closely related in physical problems as well as the applied methods. It applies to

(1) study of material states with excited electrons [9,10,12,14,20];

(2) two-temperature hydrodynamics, implemented in one-dimensional Lagrangian code 2T-1D-HD [11,12,14,25], in which the properties of two-temperature states obtained in the above point are utilized;

(3) development of inter-atomic potentials for using in molecular-dynamics (MD) code;

(4) parallel computational method for MD code based on dynamic domain decomposition on Voronoi cells [1,3,4-7,11,13,15-18,22-26]. Because this is a dynamical decomposition with automatic load balancing algorithm, it can follow material flow resulting in highly efficient utilization of available computational resources in simulations with jets, cracks, fragmentation, and foaming. Such adaptive decomposition is superior to the well-known LAMMPS code (Molecular Dynamics Simulator, lammmps.sandia.gov), which is based on static decomposition of simulation box. As a result, the load balance between computational cores can become not optimal in LAMMPS, if material distribution become is very nonuniform and some voids appear leading to increase ratio of area of free boundary surface to the volume of bulk material.

If necessary, MD code utilizes the Monte-Carlo (MC) module for modeling high electron thermal conductivity. Such combined MD-MC program allow us to solve the problems including phase transition of melting-recrystallization having important role in material motion and heat propagation. Such transition affects mechanical characteristics of materials, e.g. see [15-18];

(5) smoothed particles hydrodynamics (SPH) code. It allows us to simulate material motion with large deformations accurately. Because it is hydrodynamics program it has no limitations in size of sample in contrast to MD.

(6) two-temperature hydrocode in two-dimensional geometry (2T-2D). This code can describe redistribution of uniformly or nonuniformly absorbed laser energy within a target via heat conductivity. Computations are performed with taking into account the energy transfer from hot electrons to cold ions. The code describes smoothly both the two-temperature and single temperature stages;

(7) methods for analytical and numerical calculations of electromagnetic (EM) fields in the problems with lens $NA > 0.5$, phase plate, interference between external EM wave and plasmon-polariton (PP) field. PP field is connected to heterogeneity of target (nano-antenna, sphere or cupola on substrate).

It is precisely this combination of complementary methods listed above that will allow us realize the extended program of research in this project.

The mentioned codes and methods will be extended much or developed for the first time (for example the code described above in the point (6) has no world's analogs. The code (1) will be developed farther for longer time, when pressure, linked with dynamic pressure, decreases much.

Then, evaporation and vapor pressure begin to play a notable role. Such improvement will require change of numerical mesh. With extension of volume involved in motion it is necessary to enlarge Lagrangian mesh with one side and decrease the number of knots from another at the expense of increase of spatial step.

To reproduce the mechanical response of water to compression the effective interatomic potential for point-like water molecules, as well as effective potential for water-gold interaction, will be developed for MD simulation. Such potentials are required for stability analysis of contact surface between water and gold in a problem of metal ablation into liquid.

The most important problem is development of a hybrid code, in which MD-MC code (4) is utilized together with the method from (7). It is required for problems where a complex target is in an EM field having complicated distribution.

In a similar manner, SPH code (5) will be greatly modified with an aim to describe simultaneously the dissipation, linked to complicated EM field, and the following motion. Such changes are required for solution of problem about fragmentation of droplets in the extreme ultraviolet (EUV) lithography machines.

The code listed in (6) is developed for the first time. It will be applied for a problem about incubation of perturbations in formation of periodical surface structures with help a sequence of laser exposures (laser induced periodic surface structures, LIPSS). Beside this, a problem of effect of finite laser spot on one-dimensional heat field within a exposed target will be addressed.

Development of methods listed in (7) in combination with the codes of (4) and (5) are critical for the success of this project.

4.4. Общий план работы на весь срок выполнения Проекта 2017 (по годам) и ожидаемые результаты реализации проекта в целом (объемом не менее 2 стр.)

План работы на 2017 г.

Всего в заявке на продление 7 направлений: А, В, ..., см. п. 1.3 заявки. Они взаимосвязаны, но имеют и существенные независимые составляющие и по физике, и по соответствующим экспериментам. Например, задача об остросфокусированном воздействии (пятно облучения порядка микрона) стоит и для оптических, и для рентгеновских лазеров. Но объединить их в одно направление, очевидно, нельзя.

Оценивая по реальному наполнению и предстоящим трудностям, надо сказать, что по каждому направлению работа будет продолжаться два года. Хотя по некоторым, мы надеемся, основной результат будет получен и отправлен в печать уже 2017 г. А на следующий год останутся доделки и дополнительные публикации.

Приведем перечень направлений в плане работы. Дается суммарная характеристика, см. также изложение в п. 1.3.

[А] Оптические лазеры. Манипуляции интенсивностью:

высокие значения числовой апертуры $NA > 0.5$;
фазовые пластинки;
электромагнитное поле, возникающее вследствие интерференции лазерной электромагнитной (ЭМ) волны с плазмон-поляритонными (ППР) модами.
Слова о манипуляции интенсивностью по пятну облучения означают, что пятно облучения мало (порядка одной или нескольких оптических длин волн), в пятне распределение поглощенной энергии существенно неоднородно, и можно управлять этой неоднородностью. Масштаб неоднородности порядка длины волны. Сложное поле действует на сложную мишень. Требуется определить финальную застывшую структуру с выраженными нанодетальми, которая возникает после протекания тепловых и динамических, запущенных воздействием, процессов. Тепловые процессы сопровождаются фазовыми переходами первого рода, которые сильно отражаются на движении вещества. Изучается, как детали нанометрового масштаба зависят от характеристик облучающего фотонного поля и исходной структуры мишени. Сложными являются мишени с толстой пленкой, многослойные мишени, мишени в виде субмикронного шарика или субмикронного купола на плоской подложке; толстой называется пленка, толщина которой превышает толщину слоя прогрева d_T . Здесь неприменимо одномерное приближение, что сразу выводит задачу из разряда решенных на сегодня задач.
Близкая по духу задача дифракции лазерной ЭМ волны на частице субволнового размера, подсчета неоднородной по поверхности металлического шарика диссипации (радиус больше толщины скин-слоя) и последующей тепловой и механической реакции вынесены в отдельный раздел: см. раздел D ниже.

Будет решена задача о острогофокусированном воздействии на пленочную мишень наносекундного импульса.

Для того, чтобы не было недоразумений, поясним. 3D структуры возникают и при воздействии на однородную плоскую мишень широким фокальным пятном (10-100 мкм и более), т.е. в «одномерной» по **начальным** данным ситуации, которая противопоставляется выше случаям сложное поле/сложная мишень с **исходной** трехмерностью. Имеется много экспериментальных работ, посвященных исследованиям этой ситуации. Первыми были экспериментальные работы [[6]] Анатолия Воробьева и Гуо из Рочестера, см. список дополнительной литературы в п. 1.3. Явление имеет много приложений: вариация смачиваемости поверхности (гидрофобные вещества превращаются в гидрофильные и наоборот), рукотворное изменение оптических и химических характеристик. Происхождение таких «спонтанно» 3D структур было впервые выяснено в наших работах [[7]], см. также [[8,9]]. Наши результаты были подтверждены позже в исследованиях сильных групп: из США [[3,10]] и Урала [[11]]. Спонтанная трехмерность произрастает из случайных тепловых флуктуаций в растянутом расплаве на некоторой глубине под поверхностью. Такие флуктуации в точках их наибольшей амплитуды приводят к зарождению нанопузырьков паровой фазы (нуклеация). Эволюция после нуклеации прослежена в указанных выше работах [[7-9]]. Подчеркнем, что аналогичные хаотические 3D структуры формируются и после рентгеновского воздействия [[9]]. Это исключает сколько-нибудь доминирующую роль поверхностных плазмонов в их образовании.

Отметим также, что куполообразные вспучивания (бампы) тонких пленок были детально разобраны за 2.5 года выполнения проекта РНФ 14-19-01599, см. [1,4,6,7,13,15-18,24,25]; как говорилось, тонкими мы называем пленки с толщиной d_f меньше толщины d_T слоя прогрева; в таких пленках прогрев по толщине происходит задолго до того, как звук пробегает пленку; это обстоятельство упрощает движение по направлению нормали к

пленке. До наших работ ни количественного описания динамики, ни качественного понимания не существовало, см. вводные замечания в работе [16].

Сложные мишени в виде частиц субволновых размеров и дифракцией ЭМ поля выделены в отдельный раздел ниже.

[B] Много внимания в 2017 г. будет уделено рентгеновским лазерам и связям с экспериментами на японских лазерах мягкого рентгена с фотоном 89.3 эВ и лазере на свободных электронах SACLA (RIKEN/HARIMA X-ray Free Electron Laser – SACLA, xfel.riken.jp), который в предстоящих опытах будет работать в двух режимах: жесткий ультрафиолет (20 эВ) и жесткий рентген (7.7 кэВ).

Будет решена задача о последствиях воздействия субнаносекундного (600 пс) оптического лазерного импульса на пленку 3-5 мкм железа или тантала и диагностики результатов воздействия с помощью ультракороткого (единицы фс) жесткого (10-20 кэВ) лазерного импульса XFEL (X-ray Free Electron Laser). Диагностируется процесс распространения волны сжатия по пленке, опрокидывания волны сжатия и отражения этой волны от границы пленка-вакуум. Диагностика осуществляется с помощью схемы pump-probe, в которой probe импульсом является импульс XFEL. Этот импульс предоставляет нам «мгновенную» (относительно масштаба времени эволюции волновой картины) дифракционную картину происходящего. Решение осуществляется с помощью применения физических моделей вместе с гидродинамическим и молекулярно-динамическим (МД) кодами. МД код будет дополнен специально разработанной программой расчета дифракционной линии на динамически деформированном поликристалле.

На два года рассчитано решение задачи о воздействии рентгеновского излучения на многослойное зеркало, толщины слоев в котором соответствуют длине волны рентгеновского излучения.

Будет начато решение трудной задачи о моделировании диспергирования капель олова с добавкой иридия. Такое диспергирование капель расплава необходимо для создания плазмы олова [[1,2]] (оловянная лампочка – сердце EUV lithography машин). Диспергирование осуществляется оптическим лазерным импульсом. На нынешнем этапе имеются только данные опытов. Они подтверждают, да, диспергирование имеет место, см. [[2]]. Нами в рамках работы по заявке на продление гранта РФФИ 14-19-01599 будут выяснены механизмы, лежащие в основе данного явления. Это необходимо для поиска наиболее оптимальных режимов работы лазерного распылителя и всей литографической машины в целом. О путях решения проблемы см. пункт E ниже.

Будут исследованы быстропротекающие процессы, инициированные оптическим лазерным ударом (pump) по пленке из золота на кремниевой или стеклянной подложке. В эксперименте исследование осуществляется новаторскими методами. В таком новом подходе в качестве probe импульса применяется лазер на мягком рентгене (13.9 нм, 89.3 эВ). Ранее либо probe импульс излучался из оптического лазера (для построения оптического изображения), или это был жесткий рентгеновский импульс для получения картины дифракции. В нашем случае мягкий рентгеновский probe импульс применяется для построения «мгновенного» изображения облученной области мишени в рентгеновской оптике. Этот подход имеет преимущества перед оптическим probe импульсом. Из-за малой длины ЭМ волны кольца Ньютона видны при на 2 порядка меньших раскрытиях зазора между откольным куполом и дном формирующегося кратера. Это позволяет заглянуть на исключительно раннюю стадию развития процесса. За 2017 г. нами будет

создан комплекс программ для расшифровки данных, полученных с помощью такой диагностики. Схема установки приведена в статье [27].

Будут изучены вопросы перемещения и разделения веществ при воздействии острогофокусированного импульса жесткого (10-20 кэВ) рентгена на 2-х и более слойные покрытия из чередующихся разных веществ. Для решения данных вопросов будут созданы и откалиброваны соответствующие физические модели и соответственно расширен пакет наших компьютерных программ. По опыту работы по исследованию динамики однослойной пленки [13] нам известно, что лазерный удар вызывает сильное перераспределение вещества по пленке.

[С] В 2017 г. будут закончены исследования проблемы о роли электронного давления в динамических процессах в поверхностном слое облученной мишени. С одной стороны эти исследования важны сами по себе, с другой – они требуются для расшифровки экспериментов, проводимых в KPSI. В них лазер на мягком рентгене применяется для наблюдения за эволюцией области облучения, созданной ультракоротким воздействием оптического лазера. В этом отношении данная проблема связана с задачами построения рентгеновских оптических изображений области облучения, см. предыдущий пункт плана работ.

[D,E] Будет решена задача о структуре диссипативной зоны в частицах субволновых размеров под действием лазерного импульса. В случаях, когда размер частицы больше толщины скин слоя и больше толщины слоя прогрева d_T ультракоротким воздействием, распределение поглощенной энергии по поверхности частицы играет решающую роль в последующих тепловых и гидродинамических процессах. С учетом реального распределения энергии будет определена дальнейшая судьба частицы.

Для частиц с радиусом меньшим, чем глубина прогрева d_T , решение ЭМ части задачи сводится к определению сечения поглощения энергии; величина d_T на порядок меньше длины ЭМ волны в оптическом диапазоне. Задача о сечении уже решена в литературе. Для частиц, меньших d_T , распределение поглощенного тепла примерно однородно по частице. В этом случае, как и в случае $d_T < r < \lambda$, будет проведено гидродинамическое и МД моделирование термомеханических эффектов; здесь r – радиус частицы. Гидродинамическое моделирование учитывает всю шкалу двухтемпературных явлений. МД моделирование строится с учетом данных двухтемпературной гидродинамики. Параллельно будет решаться задача о производстве частиц при лазерном воздействии на твердую мишень через прозрачную жидкость.

Будут начаты исследования по описанию дробления относительно крупных частиц (размерами больше оптической длины волны) лазерным импульсом. Как говорилось выше, данный круг вопросов выполняется в интересах оптимизации работы плазменного источника для литографических машин. В случае крупных частиц для описания поверхности со слоем прогрева будет применено приближение геометрической оптики. Крупномасштабная (порядка радиуса) неоднородность распределения поглощенной энергии и малость отношения d_T / r затрудняет моделирование. Кроме того, требуется специализированное скалирование параметров, для того, чтобы методами МД описать ситуацию. Это скалирование будет разработано в рамках проекта.

Очень важно, что для решения проблемы будет применено SPH (smooth particle hydrodynamics) моделирование. Соответствующий код разрабатывается в многопроцессорном варианте [3,26], что намного усиливает возможности кода. Предстоит создать версию для описания задач распыления капель лазером.

Кроме того, с помощью SPH кода будет продолжено решение задач «пыления» [3,26], но теперь в 3D геометрии; задачами пыления называются задачи о выходе ударной волны на неровную поверхность границы конденсированной среды с вакуумом.

[F,G] Будут разработаны межмолекулярный потенциал воды и перекрестный потенциал, учитывающий взаимодействие атомов золота и молекул воды. Перекрестный потенциал требуется для описания динамического взаимодействия расплава золота и воды в закритических состояниях возле границы их соприкосновения в задаче об абляции золота через прозрачную воду ультракоротким лазерным импульсом.

Будут созданы межатомные потенциалы олова и золота с искусственно пониженным коэффициентом поверхностного натяжения. При этом все остальные параметры соответствуют табличным данным. Данные потенциалы требуются для масштабирования задачи по капиллярному числу (скейлинг). Масштабирование необходимо, чтобы обойти ограничения на число атомов и длительность расчета (число шагов по времени). Ограничения связаны с пределами на доступные численные ресурсы. Будут усовершенствованы приемы масштабирования для применения в МД-МК (МД и Монте-Карло) коде.

План работы на 2018 г.

Ряд задач заявки являются трудными. Необходим второй год на их выполнение.

[A] Оптические лазеры. В списке вопросов манипуляций ЭМ полем в 2018 г. останутся задачи с фазовыми пластинками и с светом падающей волны вместе с ППР модами. Особенно трудной является задача с ППР модами и мишенями вида частица или купол на пленке. Гибридное описание ЭМ поля и термомеханики сложной мишени требует решения большого количества разных задач. Их решение и подготовка публикаций будет продолжена в 2018 г. Очень важным остается взаимодействие с экспериментаторами, которые проверяют наши выводы в опытах.

[B] Будут продолжены исследования по рентгеновским воздействиям и по использованию мягкого рентгена для построения рентгеновских изображений. В 2018 г. весь этот цикл работ будет полностью завершен.

[C] Этот пункт относится к вопросу о роли давления сильно нагретых ультракоротким импульсом электронов в динамических процессах. Данный пункт должен быть завершен в 2017 г. На 2018 г. останутся работы, связанные с подготовкой публикаций.

[D,E] Будут закончены задачи об ЭМ воздействии и последующей череде термомеханических событий в частицах трех классов: (1) $r < d_T$, (2) $d_T < r < \lambda$ и (3) $r > \lambda$. Важность этих задач и средства решения обсуждались выше.

[F,G] Будет закончено описание динамического взаимодействия золота и воды при абляции золота через прозрачную воду ультракоротким лазерным импульсом. Как сказано выше, описание опирается на новые потенциалы взаимодействия частиц и усовершенствованные приемы масштабирования.

Ожидаемые результаты в целом, т.е. за два года

[A] Будут описаны ситуации, в которых сложное оптическое ЭМ поле воздействует на комплексные мишени. При этом пятно облучения мало (единицы мкм), а мишени разные по геометрии. Перечень мишеней приведен в пункте А плана работ на 2017 г. и в п. 1.3 первой формы заявки на продление. Важно, что описание будет доведено финальной морфологии замороженных структур. Это позволит напрямую сопоставлять численно – теоретические результаты с опытами.

Конкретно будут представлены данные (1) относительно финальной морфологии структур при воздействии объективом с $NA > 0.5$ на толстые мишени, (2) морфологии структур при действии через фазовые пластинки на пленочные и многослойные мишени, (3) о результатах интерференции падающей волны и ППР мод и о отпечатывании этой интерференции в замороженных структурах, (4) будет исследована задача о острогофокусированном воздействии на пленочную мишень наносекундного импульса.

[B] Будет решена задача о воздействии мощного (генерирует сжатия в сотни ГПа) субнаносекундного оптического лазерного импульса на пленку 3-5 мкм железа или тантала и диагностики результатов воздействия с помощью ультракороткого (единицы фс) жесткого (10-20 кэВ) лазерного импульса XFEL (X-ray Free Electron Laser). Это решение включает в себя как описание собственно металла, так и описание результатов дифракционной диагностики. Данные по диагностике будут сопоставлены с опытами наших соавторов.

Будет решена проблема о деградации многослойных зеркал под действием рентгеновского излучения.

С помощью описания диагностики коротким (7 пс) импульсом мягкого рентгена (89.3 эВ) и привлечения нерасшифрованных данных опытов KPSI будут исследованы быстропротекающие процессы, инициированные оптическим лазерным ударом (pump) по пленке из золота на подложке. Для описания диагностики нами будет построена оптическая модель системы, строящей рентгеновские изображения в реальном опыте.

Будут изучены вопросы перемещения и разделения веществ при воздействии острогофокусированного импульса жесткого (10-20 кэВ) рентгена на 2-х и более слойные покрытия из чередующихся разных веществ.

[C] Будут получены данные о роли электронного давления в динамических процессах в поверхностном слое облученной мишени. С одной стороны эти исследования важны сами по себе, с другой – они требуются для расшифровки экспериментов, проводимых в KPSI. В них лазер на мягком рентгене применяется для наблюдения за эволюцией области облучения, созданной ультракоротким воздействием оптического лазера. В этом отношении данная проблема связана с задачами построения рентгеновских оптических изображений области облучения, см. предыдущий пункт плана работ.

[D,E] Будут закончены задачи об ЭМ воздействии и последующей череде термомеханических событий в частицах трех классов: (1) $r < d_T$, (2) $d_T < r < \lambda$ и (3) $r > \lambda$.

Будет решена задача «пыления» [3,26] о выходе ударной волны на неровную границу в 3D геометрии

[F,G] Будут разработаны межмолекулярный потенциал воды и перекрестный потенциал, учитывающий взаимодействие атомов золота и молекул воды.

Будут созданы межатомные потенциалы олова и золота с искусственно пониженным коэффициентом поверхностного натяжения. При этом все остальные параметры соответствуют табличным данным. Данные потенциалы требуются для масштабирования задачи по капиллярному числу (скейлинг).

4.5. Обоснование достижимости решения поставленных задач и возможности получения запланированных результатов. Оценка уровня ожидаемых результатов

Заявка подается на продление гранта РФФ 14-19-01599. Она тесно связана с этим грантом, который, по нашему мнению, успешно выполнен (26 публикаций). Будут развиты методики, которые применялись. За время выполнения гранта накоплен опыт преодоления проблем. Главное сплотился коллектив, мы знаем возможности друг друга. У нас много молодежи вместе с опытными исследователями. За время работы над грантом сложилась тесная кооперация с группами экспериментаторами. Они обращаются к нам со своими проблемами. Решение такого рода конкретных насущных проблем намного ускоряет процесс научных исследований. Все это вселяет уверенность в том, что все запланированные результаты будут получены.

[A] «Будут описаны ситуации, в которых сложное оптическое ЭМ поле воздействует на комплексные мишени.»

Отметим, что до работ по гранту РФФ 14-19-01599 в мире не существовало теоретического понимания и, тем более, результатов решения задач по остророфокусированным лазерным воздействиям на пленочные мишени. Хотя эксперимент имелся, начиная с 2003-2004 гг., см. справку по истории вопроса в п. 4.1. Благодаря гранту, были проведены исследования, и проблема была решена полностью от начала воздействия и возбуждения электронной подсистемы до детального описания кристаллизовавшихся структур. Было понято, как качественное поведение, механизмы, так и дано количественное описание.

Эти успехи делают обоснованными наши претензии на то, что поставленные амбициозные проблемы со сложным ЭМ полем и комплексными мишенями будут решены, опять же от начала (поглощение, нагрев электронов) и до конца (кристаллизация вещества, находящегося в движении). Такие постановки весьма актуальны в связи с задачами плазмоники, LIFT, усиления сигнала (SERS, фотолюминисценция), но решения их в том гибридном подходе (и поле, и результат воздействия вплоть до впечатывания структур), который предлагается в заявке, в мировой литературе не имеется.

[B] Очень интересными в фундаментальном плане и в перспективах развития являются проблемы с комбинацией оптического и рентгеновского лазерных излучений. Здесь мы

пользуемся привилегией контакта с экспериментаторами, которые непосредственно занимаются осуществлением таких сложных постановок, см. п. 1.1 формы 1. Эти постановки намного повышают уровень продолжения проекта даже по сравнению с грантом РФФ 14-19-01599. Опять же уровень здесь высокий, соответствует лучшим исследованиям в мире. Причем теоретических и численных разработок по таким опытам на сегодня нет (новизна).

Рассмотрим, например, задачу о воздействии мощного (генерирует сжатия в сотни ГПа) субнаносекундного оптического лазерного импульса на пленку 3-5 мкм железа или тантала и дифракционной диагностики результатов воздействия с помощью ультракороткого (единицы фс) жесткого (10-20 кэВ) лазерного импульса XFEL (X-ray Free Electron Laser). Дифракционная диагностика ударных волн (УВ) жестким рентгеном проводилась, но здесь мы добавляем детальное численное моделирование гидродинамики с помощью гидрокода и МД кода вместе с численным расчетом картин дифракции. Кроме того, впервые динамика отражения УВ и разрушение конденсированной фазы за счет растяжения и нуклеации изучается с помощью дифракции. Хотя очень много работ имеется, в которых для исследования разрушения применяется слежение за тыльной границей с помощью методик VISAR, ORVIS, см. п. 4.2. Это говорит о важности, новизне и уровне проблемы и подходов к ее решению.

Совершенно новой и важной является проблема рентгеновского воздействия на многослойные зеркала на длине волны, для отражения которой эти зеркала созданы. Наш опыт решения задач рентгеновской оптики вместе со знаниями по физике конденсированного состояния с возбужденной электронной подсистемой и средствами моделирования даст нам плодотворно закончить это исследование.

С опорой на предыдущие наши результаты будет решена трудная задача о построении рентгеновских изображений (новая методика), отслеживающих эволюцию области воздействия оптического лазерного импульса (pump). В предыдущих наших исследованиях и pump, и probe импульсы были оптическими (поэтому в предшествующей фразе написано «новая методика»), см. Inogamov et al., JETP, v. 107, 1, 2008. Теперь предстоит заменить оптический probe на рентгеновский.

Новейшие задачи, поставленные в заявке, касаются абляции сложных мишеней воздействием остросфокусированного импульса жесткого (10-20 кэВ) рентгена. Воздействие жесткого рентгена, конечно, изучалось, но никогда исследование не доходило до описания гидродинамики течения с фазовыми переходами в пространственно неоднородных (многослойность) мишенях.

[С] О том, что электронное давление имеется, исследователи осведомлены. Но в нашей заявке впервые речь идет о количественных данных и детальном сопоставлении с опытами, которые специально спроектированы для изучения ранней стадии после воздействия. На этой стадии важны двухтемпературные эффекты и давление горячих электронов.

[D,E] Задачи об ЭМ воздействии на частицы разных размеров, конечно же, решались, начиная с работы Густава Ми столетие назад. Но впервые речь идет об численном описании интенсивного ЭМ воздействия, которое приводит к плавлению и разрушению частиц. Такой вычислительный пакет программ будет востребован в мире.

[F,G] Межатомные и межмолекулярные потенциалы создаются рядом ученых. Работы в этом направлении являются престижными и цитируемыми. В нашей заявке речь идет о

потенциалах, специально приспособленных для описания экстремальных состояний. Тогда, как правило, у других авторов эти потенциалы пригодны лишь в небольшой окрестности нормального состояния. Член коллектива заявки В.В. Жаховский имеет громадный опыт в этом направлении.

4.5. English

This is the request for prolongation of the grant RSCF 14-19-01599. The request has close connections to the grant which on our opinion was successfully finished (new knowledge was created, 26 papers were published). During prolongation we will further develop methods and codes. Our experience accumulated during working on the grant will help us. The main advantage is solidarity of our team developed during the working. We know each other and our skills. We have a large group of young scientists. We have a close relations with the strong experimental groups. They ask us to help them. Thus we are involved in solving of the really interesting and important problems. These contacts accelerate our investigations. Therefore we are sure that all desired problems will be solved.

[A] «We will study situations when complicated EM field acts onto complex targets.»

Let us mention that before our works on grant RSCF 14-19-01599 the understanding and descriptions of the tight focused laser impact were absent in the world. In spite of 10 years of accumulation of experimental data beginning from 2003-2004 years, see discussion about history in Section 4.1. Thanks to the grant we have studied the problem and have solved the problem from beginning (absorption and exciting of electrons) up to the end (full freezing and formation of crystallized structures).

This success does reasonable our claims that we will indeed solve ambitious problem with complicated EM field and complex targets from beginning up to the end. These problems are very important in connections with plasmonics applications, LIFT printing (laser induced forward transfer), and signal amplification (SERS, photoluminescence). This will be the first in the world solution using the proposed hybrid approach (combining electrodynamics and material physics) which gives us description of the material imprinting of EM field into matter (the traces of EM field remains in solidified material).

[B] The combinations of optical and X-ray lasers are very promising for fundamental sciences and for perspective technologies. Here we use our good contacts with Japan experimentalists, who personally are involved in this activity, see Section 1.1. These problems strongly increase a scientific level and significance of the project. The level is high, corresponding to the best studies in the world.

Let us consider for example the problem of action of powerful (generates pressures of hundred GPa) subnanosecond optical laser pulse onto a 3-5 micron thick film made from iron or tantalum and diffraction probing of the current situation by ultrashort (few fs) hard (10-20 keV) XFEL (X-ray Free Electron Laser) laser pulse. Diffraction probing of shock waves was developed before by other groups. But here we add numerical simulations by hydrocode and MD code together with numerical calculations of diffraction patterns. Moreover for the first time the dynamics of reflection of shock from the rear side boundary and spallation inside solid are studied by diffraction investigations. In spite of large amount of papers were people use VISAR and ORVIS

interferometers for tracing the reflection and fragmentation, see Section 4.2. All this says about importance, novelty, and high level of the proposed study.

Absolutely new and important is the proposed solution for the problem concerning damage of the multilayer mirrors by a X-ray pulse at the wavelength for reflection of which this particular mirror has been fabricated. Our skill related to solution of tasks of X-ray optics together with knowledge about the condensed state physics and simulation facilities guarantees that this study will be successfully finished.

We will base on our previous results (pump and probe – are both optical) when we will solve the problem concerning the real time X-ray imaging (by X-ray probe) of evolution of the region irradiated by the pump. In our previous studies (see Inogamov et al., JETP, v. 107, 1, 2008) both pulses were optical. Now we will change optical probe to the X-ray probe.

Up to date problems considered in the application for prolongation concern ablation of complex targets by the tightly focused hard (10-20 keV) X-ray laser pulse. Of course, action of hard X-ray was studied before, but never the studies have been aimed to description of flows with first order phase transitions in the spatially inhomogeneous (multilayer) targets.

[C] Scientists know about significance of electron pressure. But in our application we for the first time say about quantitative description and detailed comparison with experiment specially designed to study the early stage when the two-temperature effects and electron pressure are important.

[D,E] EM (electromagnetic) action onto small condensed particles of course has been studied beginning from Gustav Mie's works century ago. But for the first time we say about numerical description of an intensive EM action which causes melting and fragmentation of particle. This computer package will be worth for other scientists.

[F,G] Interatomic and intermolecular potentials are created by known scientists. The works in this direction are prestigious and citable because potentials are necessary for MD simulations. In our application we say about potentials specially created for description of the states under extreme conditions, while the potentials of other authors are valid only in vicinity of normal conditions. Zhakhovsky V.V. a member of our application has huge experience in this direction.

4.6. Детальный план работы на первый год выполнения проекта с указанием содержания работы каждого основного исполнителя (в том числе указываются запланированные командировки по проекту)

Коллектив представляет собой связанную команду, ядро которой имеет опыт совместной работы по проекту РНФ 14-19-01599. Молодежная секция тесно вовлечена в работу. Относительно молодых участников, которые были в составе при выполнении проекта РНФ, можно сказать, что благодаря проекту, благодаря важным научным проблемам, быстро возрастает их профессиональная квалификация. Из вчерашних студентов они превратились в матерых одержимых научных работников, самостоятельно пишущих статьи и выступающих на международных конференциях.

Детальный план работ на 2017 г. коллектива в целом выписан в пункте 4.4 формы 4.

Распределение обязанностей среди основных исполнителей

Анисимов Сергей Иванович. Общее руководство проектом, оперативная оценка текущего результата, обоснование маневров, предпринимаемых для достижения цели. Составление отчета по проекту (в случае его поддержки) за 2017 г. Осмысление результатов, подготовка материалов и написание статей.

Иногамов Наиль Алимович. На нем лежит разработка конкретных физических моделей для всех задач, которые будут решены за время осуществления проекта. Он создаст полуаналитические численные схемы расчетов. Будет курировать постановку и ход создания алгоритмов и ход моделирования. Решит задачу о сложном ЭМ поле, действующем на геометрически сложный объект (не однородное полупространство с плоской границей); эта задача решается им во взаимодействии с остальными участниками проекта. Решит задачи об описании экспериментов с комбинацией синхронизованных оптического лазера и рентгеновского лазера. Решит задачу о роли давления возбужденных электронов в динамических явлениях. Решит задачи о воздействии лазерного излучения на частицу конденсированной фазы. Создаст модели масштабирования для расширения возможностей МД-МК (молекулярная динамика вместе с Монте-Карло) кода. Подготовка документации, отчетов, статей.

Жаховский Василий Викторович. Крупнейший специалист в области физических моделей и всех аспектов проблем программирования. Создатель эффективного производительного многопроцессорного кода молекулярно-динамического (МД) моделирования, основанного на динамическом разбиении расчетной области с помощью многогранников Вороного. Этот код лежит в основе подходов для решения запланированных задач. Создатель варианта кода Монте-Карло, нацеленного на решение тепловых задач совместно с МД кодом. С его участием разработана многопроцессорная версия SPH (smooth particles hydrodynamics), которая очень понадобится в расчетах распыления капель. Решит задачу о сложном ЭМ поле, действующем на геометрически сложный объект (не однородное полупространство с плоской границей); эта задача решается им во взаимодействии с остальными участниками проекта. Решит задачи об описании экспериментов с комбинацией синхронизованных оптического лазера и рентгеновского лазера. Решит задачу о роли давления возбужденных электронов в динамических явлениях. Решит задачи о воздействии лазерного излучения на частицу конденсированной фазы. Создаст межатомные и межмолекулярные потенциалы для МД кода. Подготовка документации, отчетов, статей.

Петров Юрий Васильевич. Крупный специалист проекта по вопросам конденсированных сред с возбужденными электронами. Для успеха проекта большое значение имеют выполняемые им расчеты термодинамических и транспортных свойств систем с высокой плотностью энергии. На нем также лежат расчеты оптических и рентгеновских ЭМ полей. Петров Ю.В. решит задачу об описании экспериментов с комбинацией синхронизованных оптического лазера и рентгеновского лазера. Решит задачу о роли давления возбужденных электронов в динамических явлениях. Решит задачу о разрушении многослойных рентгеновских зеркал. Подготовка документации, отчетов, статей.

Краткая характеристика и распределение обязанностей среди участников проекта

Хохлов Виктор Александрович. Крупный специалист по гидродинамическому программированию. Им создан код для описания двухтемпературной гидродинамики. В рамках проекта в 2017 г. им будет произведена модификация кода для решения двухслойных задач и для решения многослойных задач. Решит задачи о движении

многослойных мишеней под действием заданного ЭМ поля. Изучит вопросы контакта горячих металлов с жидкой фазой. Подготовка документации, отчетов, статей.

Трибельский Михаил Исаакович. Крупный специалист по расчетам дифракции на субволновых объектах. Будет вести соответствующие полуаналитические расчеты. Будет предоставлять описания ЭМ полей в виде, удобном для применения в наших гидро- и МД кодах.

Фаенов Анатолий Яковлевич. Крупный специалист в области рентгеновской спектроскопии. Известен своими работами в области опытов с применением рентгеновских лазеров. Ответственен за связь с экспериментом, за сверку расчетно-теоретических результатов с данными японских опытов на лазере KPSI 89.3 эВ и на XFEL/RIKEN машине.

Молодежная секция

Шепелев Вадим Владимирович. Специалист по гидродинамическому программированию. Его вариант двухтемпературного кода будет им приспособлен для решения задач в 2D геометрии.

Мигдал Кирилл Петрович. Специалист по численным аспектам теории конденсированных сред. Свободно владеет DFT (density functional theory) и QMD (quantum molecular dynamics) пакетами программ в их многопроцессорных версиях. Отвечает за модели и расчеты термодинамических и транспортных свойств систем с высокой плотностью энергии

Ильницкий Денис Константинович. Virtuoz программирования одномерных и двумерных задач в гидродинамической постановке со сложной физикой (двухтемпературность, упруго-пластика). Отвечает за блок гидродинамических задач.

Григорьев Сергей Юрьевич. Расчеты SPH и МД кодами лазерных задач.

Дьячков Сергей Александрович. Расчеты SPH и МД кодами лазерных задач и задач пыления при выходе УВ на поверхность.

Егорова Мария Сергеевна. Совершенствование SPH кода и расчеты SPH кодом.

Мурзов Семен Александрович. Расчеты МД кодом. Графическая часть работы – иллюстрации результатов МД расчетов (пакет AtomEye).

Петрищев Дмитрий Юрьевич. Расчеты SPH и МД кодами лазерных задач.

Уманская Софья Филипповна. Эксперимент со сложными полями и мишенями, связь с ФИАН, ИТМО, ИАПУ по вопросам эксперимента.

4.6. English

Our team is a well connected team with known separation of work among the team members according to their skills. The main part has an experience of mutual work during the RSCF 14-19-01599 project. The young scientist's part of the team is closely involved into studies. About them we can say that the work for the project strongly help them to increase their skills. From students they transfer into well-known scientists writing papers for the prestigious journals and participating with oral reports on international conferences.

The detailed plan of actions is presented in Section 4.4 of the form 4.

Personal responsibility of the main members

Anisimov S.I. General Management. Estimates of current situation, suggestions for optimal work. Preparation of reports and papers.

Inogamov N.A. Preparation of physical models, scaling approaches to begin studies formulated in the application. He will develop semi-analytic schemes to understand and check results of massive programming. He will trace all current runs and their results. He will solve the problem with the complicated EM field and complex targets. Will solve the problem concerning synchronized action of optical and X-ray lasers. He will solve the problem of electron pressure and its dynamical manifestations. He will solve problem about laser action onto condensed particle. He will create scaling models for the MD-MK (molecular dynamics and Monte-Karlo) code to increase range of applicability. Preparation of reports and papers.

Zhakhovsky V.V. He is very well known scientist. He will develop and modify physical models and all codes, especially multiprocessors MD code and multiprocessors SPH code. He will solve the problem with the complicated EM field and complex targets. Will solve the problem concerning synchronized action of optical and X-ray lasers. He will solve the problem of electron pressure and its dynamical manifestations. He will solve problem about laser action onto condensed particle. He will create interatomic and intermolecular potentials for the MD-MK code. Preparation of reports and papers.

Petrov Yu.V. Well known scientist working with physics of condensed matter in the states with highly excited electrons. The success of the proposed project is based on his data on thermodynamics and transport properties of high energy density states. Also he will create soft and calculate optical and X-ray EM fields. Petrov Yu.V. will solve the problem concerning synchronized action of optical and X-ray lasers. He will solve the problem of electron pressure and its dynamical manifestations. He will solve the problem concerning damage of multilayer mirrors for reflection of a monochromatic X-ray wave. Preparation of reports and papers.

Short description of responsibilities among members of project

Khokhlov V.A. He is well known thanks to his soft for hydrodynamic simulations. He will modify his codes to describe thermal processes and dynamics of the multilayer targets. He will solve problem concerning dynamics of the multilayer targets under laser action. He will solve the problem about a contact between hot metal and liquid. Preparation of reports and papers.

Tribelsky M.I. Well-known scientist in the field of diffraction of laser light on the subwavelength particles. He will perform semi-analytic calculations and supply our hydro- and MD codes with the acting EM fields.

Faenov A.Ya. Well known scientist thanks to his important works concerning X-ray spectroscopy and X-ray lasers. He will connect us with Japan experiments on X-ray lasers (KPSI 89.3 eV and XFEL/RIKEN) and will check comparisons of the simulation results and experiments.

Our young members

Shepelev V.V. He will run hydrodynamics codes. He will develop 2D version of the two-temperature code.

Migdal K.P. Known for his works on simulation of condensed matter. He will run the DFT (density functional theory) and QMD (quantum molecular dynamics) codes and together with Petrov Yu.V. will supply our calculations with data concerning the thermodynamic and transport properties of high energy density states.

Ilnitsky D.K. He is scientist in the field of 1D and 2D hydrodynamics with complicated physics: two-temperature states, elastic-plastic phenomena, dislocation models. He will perform hydrodynamic simulations.

Grigor'ev S.Yu. Calculations by the SPH and MD codes of the laser problems.

Dyachkov S.A. Calculations by the SPH and MD codes of the laser problems and the problems concerning jetting during reflection of a shock from the rear side boundary.

Egorova M.S. Improvements in the SPH and simulations using the SPH code.

Murzov S.A. MD simulations of the laser problems. Using graphical packages (e.g., Atom Eye) to plot results of simulations.

Petrishchev D.Yu. Calculations by the SPH and MD codes of the laser problems.

Umanskaya S.F. She will take part in the experiments with complicate fields and targets. She will support our connections with experiments in FIAN, ITMO and the Far East Institutes.

4.7. Ожидаемые в конце первого года конкретные научные результаты (форма изложения должна дать возможность провести экспертизу результатов и оценить степень выполнения заявленного в проекте плана работы)

2017 г. очень важен для выполнения заявки. Именно в этот год произойдет перестройка на новые задачи, будут созданы новые или модифицированные алгоритмы. Далее будет происходить накопление данных, сравнение с опытами, публикация результатов.

[А] Оптические лазеры. Будут решены задачи со сложным полем, действующим на сложные мишени (задачи 1-3):

- (1)) высокие значения числовой апертуры $NA > 0.5$ и толстая пленка на подложке;
- (2)) фазовые пластинки, действие на пленки и многослойные покрытия радиально поляризованного излучения;
- (3)) электромагнитное поле, возникающее вследствие интерференции лазерной электромагнитной (ЭМ) волны с плазмон-поляритонными (ППР) модами, и воздействие на мишень с шариком или бугорком на пленке.
- (4)) Будет решена задача об остросфокусированном воздействии на пленочную мишень наносекундного импульса.

[В] Будет решена задача о последствиях воздействия субнаносекундного (600 пс) оптического лазерного импульса на пленку 3-5 мкм железа или тантала и диагностики результатов воздействия с помощью ультракороткого (единицы фс) жесткого (10-20 кэВ) лазерного импульса XFEL (X-ray Free Electron Laser). Диагностируется процесс распространения волны сжатия по пленке, опрокидывания волны сжатия и отражения этой волны от границы пленка-вакуум. Диагностика осуществляется с помощью схемы pump-probe, в которой probe импульсом является импульс XFEL. Этот импульс предоставляет нам «мгновенную» (относительно масштаба времени эволюции волновой картины) дифракционную картину происходящего. Решение осуществляется с помощью применения физических моделей вместе с гидродинамическим и молекулярно-динамическим (МД) кодами. МД код будет дополнен специально разработанной программой расчета дифракционной линии на динамически деформированном поликристалле.

На два года рассчитано решение задачи о воздействии рентгеновского излучения на многослойное зеркало, толщины слоев в котором соответствуют длине волны излучения рентгеновского лазера.

Будет начато решение трудной задачи о моделировании диспергирования капель олова с добавкой иридия. Такое диспергирование капель расплава необходимо для создания плазмы олова [[1,2]] (оловянная лампочка – сердце EUV lithography машин). Диспергирование осуществляется оптическим лазерным импульсом. На нынешнем этапе имеются только данные опытов. Они подтверждают, да, диспергирование имеет место, см. [[2]]. Нами в рамках работы по заявке на продление гранта РФФИ 14-19-01599 за 2017 г. будут выяснены механизмы, лежащие в основе данного явления.

Будут исследованы быстротекающие процессы, инициированные оптическим лазерным ударом (pump) по пленке из золота на кремниевой или стеклянной подложке. В эксперименте исследование осуществляется новаторскими методами. В таком новом подходе в качестве probe импульса применяется лазер на мягком рентгене (13.9 нм, 89.3 эВ). Ранее либо probe импульс излучался из оптического лазера (для построения оптического изображения), или это был жесткий рентгеновский импульс для получения картины дифракции. В нашем случае мягкий рентгеновский probe импульс применяется для построения «мгновенного» изображения облученной области мишени в рентгеновской оптике. Этот подход имеет преимущества перед оптическим probe импульсом. Из-за малой длины ЭМ волны кольца Ньютона видны при на 2 порядка меньших раскрытиях зазора между откольным куполом и дном формирующегося кратера. Это позволяет заглянуть на исключительно раннюю стадию развития процесса. За 2017 г. нами будет создан комплекс программ для расшифровки данных, полученных с помощью такой диагностики. Схема установки приведена в статье [27].

Будут изучены вопросы перемещения и разделения веществ при воздействии острогофокусированного импульса жесткого (10-20 кэВ) рентгена на 2-х и более слойные покрытия из чередующихся разных веществ. Для решения данных вопросов будут созданы и откалиброваны соответствующие физические модели и соответственно расширен пакет наших компьютерных программ.

[С] В 2017 г. будут закончены исследования проблемы о роли электронного давления в динамических процессах в поверхностном слое облученной мишени. С одной стороны эти исследования важны сами по себе, с другой – они требуются для расшифровки экспериментов, проводимых в KPSI. В них лазер на мягком рентгене применяется для наблюдения за эволюцией области облучения, созданной ультракоротким воздействием оптического лазера. В этом отношении данная проблема связана с задачами построения рентгеновских оптических изображений области облучения, см. предыдущий пункт плана работ.

[D,E] Будет решена задача о структуре диссипативной зоны в частицах субволновых размеров под действием лазерного импульса. В случаях, когда размер частицы больше толщины скин слоя и больше толщины слоя прогрева d_T ультракоротким воздействием, распределение поглощенной энергии по поверхности частицы играет решающую роль в последующих тепловых и гидродинамических процессах. С учетом реального распределения энергии будет определена дальнейшая судьба частицы.

Для частиц с радиусом меньшим, чем глубина прогрева d_T , решение ЭМ части задачи сводится к определению сечения поглощения энергии; величина d_T на порядок меньше длины ЭМ волны в оптическом диапазоне. Задача о сечении уже решена в литературе. Для частиц, меньших d_T , распределение поглощенного тепла примерно однородно по частице. В этом случае, как и в случае $d_T < r < \lambda$, будет проведено гидродинамическое и МД моделирование термомеханических эффектов; здесь r – радиус частицы. Гидродинамическое моделирование учитывает всю шкалу двухтемпературных явлений. МД моделирование строится с учетом данных двухтемпературной гидродинамики. Параллельно будет решаться задача о производстве частиц при лазерном воздействии на твердую мишень через прозрачную жидкость.

Будут начаты исследования по описанию дробления относительно крупных частиц (размерами больше оптической длины волны) лазерным импульсом. Как говорилось выше, данный круг вопросов выполняется в интересах оптимизации работы плазменного источника для литографических машин. В случае крупных частиц для описания поверхности со слоем прогрева будет применено приближение геометрической оптики. Крупномасштабная (порядка радиуса) неоднородность распределения поглощенной энергии и малость отношения d_T / r затрудняет моделирование. Кроме того, требуется специализированное скалирование параметров, для того, чтобы методами МД описать ситуацию. Это скалирование будет разработано в рамках проекта.

SPH (smooth particle hydrodynamics) код в многопроцессорном варианте будет модифицирован под решение задач о лазерном воздействии на частицы.

На базе SPH кода будет продолжено решение задач «пыления» [3,26], но теперь в 3D геометрии; задачами пыления называются задачи о выходе ударной волны на неровную поверхность границы конденсированной среды с вакуумом.

[F,G] Будут разработаны межмолекулярный потенциал воды и перекрестный потенциал, учитывающий взаимодействие атомов золота и молекул воды. Перекрестный потенциал требуется для описания динамического взаимодействия расплава золота и воды в закритических состояниях возле границы их соприкосновения в задаче об абляции золота через прозрачную воду ультракоротким лазерным импульсом.

Будут созданы межатомные потенциалы олова и золота с искусственно пониженным коэффициентом поверхностного натяжения. При этом все остальные параметры соответствуют табличным данным. Данные потенциалы требуются для масштабирования задачи по капиллярному числу (скейлинг). Масштабирование необходимо, чтобы обойти ограничения на число атомов и длительность расчета (число шагов по времени). Ограничения связаны с пределами на доступные численные ресурсы. Будут усовершенствованы приемы масштабирования для применения в МД-МК (МД и Монте-Карло) коде.

4.7. English translation

The next year is very important for successes of the application for prolongation. Namely this year is necessary to change for new problems, creation of new soft, and to modify our previously used soft. After that during the 2017 year we will accumulate data, compare with experiments, and prepare publications of obtained results.

[A] Optical lasers. We will solve problems with complex EM (electromagnetic) fields acting on the complex targets (tasks 1-3):

- (1) high aperture $NA > 0.5$ and thick film on substrate (see Chapter 4.4 for definition of thick films);
- (2) phase plates, radially polarized radiation passing the phase plate acts onto film or multilayer target;
- (3) EM field resulting from interference of incident wave and plasmon-polariton modes acts onto target made from nanosphere on a plane substrate or onto cupola like bump on a film.
- (4) We will solve the problem of nanosecond pulse tightly focused onto film target.

[B] The problem concerning action of subnanosecond (600 ps) pulse onto a freestanding iron or tantalum film (3-5 microns) and probing of motion will be solved. The pump pulse is optical. The probe is hard ultrashort (few fs) X-ray pulse (10-20 keV) from XFEL/RIKEN (X-ray Free Electron Laser). The probing will follow propagation of compression wave, its breaking and formation of a shock, reflection from a rear side of a freestanding film. We will create a soft to compare MD results with results of diffraction probing.

Two years are necessary to solve a problem about action of X-ray onto multilayer mirror. Thicknesses of layers correspond to wavelength of an acting X-ray laser.

In 2017 year we will begin to solve the difficult problem concerning laser dispersion of tin (Sn) droplets (some iridium Ir is added to Sn to decrease melting temperature). The dispersion into much smaller droplets than that falling from the nozzle is necessary for creation of tin plasma. Tin plasma is the heart of the source of extreme UV for lithography; see also the Section [D] below.

We will study fast processes initiated by optical laser impact (the pump pulse) onto gold film on silica or Si substrate. In experiments new approach is used [27]. In this approach the probing following evolution after pump is based on the flashes (duration 7 ps) of the soft X-ray laser (89.3 eV). Previously or optical pulse was used for probing, or hard X-ray pulse was used for diffraction probing. In our case the soft X-ray pulse is used for creation of “instantaneous” (duration 7 ps) images of evolution of the irradiated (by pump) spot. This approach has advantages relative to usual optical probing. Indeed, wavelength 13.9 nm is two orders of magnitude shorter. Thus the Newton rings and shifts of interferometric fringes appear much earlier. In 2017 year we will create soft for interpretation of experimental images.

The problems of relocation of mass under action of tightly focused hard X-ray laser pulse will be solved. Relocations take place in a film or in a multilayer target.

[C] In 2017 we will finish studies of significance of electron pressure in dynamical processes in a surface layer of an irradiated target. These studies are important from fundamental point of view for physics of condensed matter with strongly excited electron subsystem. From the other side these studies are valuable because they are necessary for understanding of the experiments hold in KPSI described above in Section [B]. In the experiments the soft X-ray laser is used for probing of early stages of evolution of a target after the pump laser impact. The flow created by pump will be simulated; its soft X-ray images will be calculated using our soft for X-ray optics. The results will be compared with experimental data.

[D,E] We will solve problem about an absorption zone in the subwavelength particles irradiated by a laser pulse. In the cases when the size of a particle is larger than skin-depth and thickness of a heat affected zone d_T the distribution of absorbed energy over surface of a particle plays decisive role in the following thermal and mechanical processes. The real fate of a particle will be defined including the energy distribution.

For particles smaller than d_T (the d_T is order of magnitude smaller than optical wavelengths λ) the solution of EM problem is the definition of absorption cross section (which may be very different from geometrical cross section). This problem is solved in literature. If size of a particle r is less than d_T , than absorbed heat is homogeneously distributed across the particle. In this case as in the case $d_T < r < \lambda$, we will run hydrodynamics and molecular dynamics (MD) programs to understand the thermomechanical effects. Also the problem concerning of generation of particles in liquid will be considered. Hydrodynamic soft includes full two-temperature physics. In the MD runs we use data from the hydrodynamic soft.

We will consider the problem about dispersive demolishing of relatively large droplets (they are larger than optical wavelength λ) by laser action. As was said this is important for optimization of plasma source for the lithography device. The description based on geometrical optics is enough to calculate distribution of laser absorbed energy over particle surface. Large scale inhomogeneity of absorbed energy and small values of the ratio d_T / r do simulations more difficult. We will develop and use scaling to describe situation using MD code.

The SPH (smooth particle hydrodynamics) code in its newly developed by us multiprocessors version will be modified for solution of problems concerning action of a laser pulse onto particles.

The SPH code will be used for continuation of our successful studies of the jetting problem [3,26], but now in 3D geometry. The jetting problem is connected with description of instabilities caused by reflection of shock from the inhomogeneous rear side vacuum boundary.

[F,G] We will develop the intermolecular potential of water and the potential describing interaction between molecules of water and gold atoms. This is necessary for solving a task about expansion of laser heated gold into water.

We will develop interatomic potentials for tin and gold with artificially decreased coefficients of surface tension. All other parameters correspond to known parameters of Sn and Au. These potentials will be used in the scaling approach to MD simulations. The scaling helps us to overcome the limitations on number of atoms used in the MD run; limitations are connected with finite computer resources. We will improve scaling for hybrid using of combination of MD and Monte-Carlo code. This combination allows us to describe complicated hydrodynamics of molten matter and solid together with conductive heating and cooling and together with the first order phase transitions. E.g., melting/solidification transition sharply changes mechanical properties of condensed matter and thus strongly influences evolution.