

Коллектив сотрудников гранта РФФ 14-19-01599 с глубоким прискорбием сообщает о кончине важнейшего участника коллектива

Анатолия Яковлевича Фаенова,

доктора технических наук, автора более 400 статей, трех монографий, индекс цитирования 7200, индекс Хирша 39.

Анатолий Яковлевич скончался 3-го ноября 2017 г. в госпитале в г. Осака.

До последних месяцев Анатолий Яковлевич поддерживал рабочую связь с коллективом. За этот год с его участием подготовлены три важные статьи, вошедшие в отчет:

Albertazzi, N. Ozaki, V. Zhakhovsky, A. Faenov et al., Dynamic fracture of tantalum under extreme tensile stress, Sci. Adv. (2017)

Faenov et al., Rarefaction after fast laser heating of a thin metal film on a glass mount, AIP Conference Proceedings (2017)

Faenov, A. et al., Soft x-ray laser ablation of metals and dielectrics, Proceedings of SPIE (2017)

Анатолий Яковлевич был крупнейшим специалистом по рентгеновским воздействиям, спектроскопии и рентгеновским лазерам, а главное отличным человеком, добрым товарищем. Никогда не скупился на советы, видел дальнюю перспективу работы.

Заявленный в проекте план работы на год

Формируется в соответствии с заявкой на участие в конкурсе.

Коллектив представляет собой связанную команду, ядро которой имеет опыт совместной работы по проекту РФФ 14-19-01599. Молодежная секция тесно вовлечена в работу. Относительно молодых участников, которые были в составе при выполнении проекта РФФ, 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 синхронизированных 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.

Заявленные научные результаты на конец года

Формируется в соответствии с заявкой на участие в конкурсе.

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 РФФ 14-19-01599 за 2017 г. будут выяснены механизмы, лежащие в основе данного явления.

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 остророфокусированного 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.

[C] 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.

1.3. Сведения о фактическом выполнении плана работы на год (фактически проделанная работа, до 10 стр.)

Будем двигаться по плану на 2017 г. пункт за пунктом. Пункт [А]:

[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.

За 2017 г. удалось получить много новых результатов в соответствии с пунктом [А].

A1. (Это пункт 1 в разделе А) Большая совместная работа была выполнена с группой экспериментаторов из (i) австралийских центров микрофотоники и нанофабрикации, (ii) группы дальневосточных научных организаций и (iii) ФИАНа, ИТМО СПб. В теоретической и численной работе по гранту участвовали сотрудники ВНИИА им. Н.Л. Духова и нашего Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау, головного по проекту. Работа нацелена на управляемое создание оптимальных поверхностных структур субволновых размеров [1] (1.7-3 - публикация 3 в списке публикаций за год по результатам проекта, приложенных к отчету (имеются pdf), пункт 1.7), для чего требуется крупномасштабное численное моделирование. В таких структурах искусственно создается необходимая эффективная диэлектрическая проницаемость. Как показывают наши предыдущие работы и работы других авторов, это позволяет контролировать потоки электромагнитной энергии на наномасштабах, см., например, [1-доп].

Субволновые структуры создаются лазерной печатью на пленках с помощью ультракоротких лазерных импульсов, см. рис. 1, взятый из работы [1]. Такая печать является перспективной, гибкой, относительно дешевой и экологичной технологией

создания больших массивов субволновых структур посредством трансляционной и абляционной модификации пленок на подложках. Управление морфологией элементов массивов осуществляется путем настройки энергии лазерного импульса и диаметра пятна нагрева на пленке. Для уменьшения диаметра применяются объективы с большой числовой апертурой.

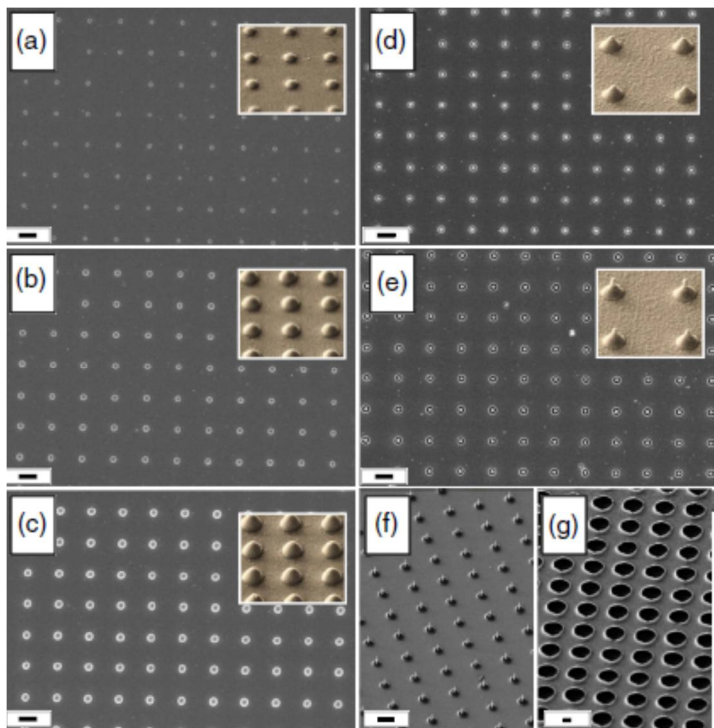


Рис. 1 ([1], рис.1). Массивы субволновых структур. Морфология структурного образования (см. врезки) контролируется путем вариации энергии лазерного импульса и путем настройки остроты фокусировки с помощью объективов с высокой числовой апертурой NA. Последовательность (a-g) фотографий электронным микроскопом (SEM) соответствует нарастанию энергии импульса; NA = 0.5 (Mitutoyo M Plan Apo NIR HR). Масштабная риска составляет 1 микрон. На врезках показаны индивидуальные морфологии структур.

Сверхбыстрое (длительность импульса 230 фс) выделение лазерной энергии в пленках металлов индуцирует быстрое плавление и движение расплава, в результате которого происходит сложное перераспределение вещества пленки на наномасштабах. Это перераспределение, как показывает наше моделирование [1], фиксируется «навечно» после рекристаллизации горячего расплава. Плавление-переток-кристаллизация формируют морфологию структур на рис. 1. Морфологические нанохарактеристики структур (диаметр, кривизна купола, джет в вершине, капля на джете и др.) сильно влияют на оптический отклик при плазмонном зондировании. Это позволяет применять полученные массивы структур в нелинейных оптических приложениях [1-доп].

В работе [1] мы детально сопоставили результаты физической модели и крупномасштабного моделирования с одной стороны и измерения, выполненные с помощью двух оригинальных экспериментальных методик, с другой стороны. Таким образом, доказана адекватность моделирования. Одна экспериментальная методика состояла в изучении внутренней структуры образований путем их рассеяния сфокусированным ионным пучком (FIB, Focused Ion Beam). Действуя по другой

методике, структура изучалась с помощью рентгеновской спектроскопии (EDX, energy dispersive x-ray fluorescence). При нашем моделировании учитывались все физические процессы, связанные с поглощением лазерной энергии, электрон-ионным энергетическим обменом, акустической релаксацией и гидродинамическим движением [1]. Был применен комбинированный теоретический подход, основанный на разделении относительно медленного гидродинамического движения пленки и быстрых физических процессов, определяющих сепарацию пленки от подложки. Мы сочетали двухтемпературные расчеты (на ранней стадии электроны намного горячее ионов), молекулярно-динамическое моделирование и полуаналитическую модель тонких оболочек. Такой расширенный подход нужен для детального моделирования отклика ближнего поля, он открывает путь к полностью автоматизированному, неразрушающему контролю высокопроизводительного лазерного производства. Рассмотренное физическое и численное моделирование обеспечивает точное прогнозирование масштабов и морфологии массивов субволновых структур.

Проанализировано влияние толщины пленки на динамику при лазерном воздействии различной длительности от десятков фемтосекунд до субнаносекундного диапазона [2] (1.7-5). Решение этой проблемы существенно для технологий лазерного переноса вещества (LIFT/LIBT – laser induced forward/backward transfer, лазерная печать). Самые разные вещества (металлы, диэлектрики, полупроводники, керамики, полимеры, биологические частицы) могут быть перенесены с донора на принимающую подложку (ресивер) с помощью LIFT/LIBT. Привлекательность этих технологий связана с их многосторонностью и безмасковым характером. Для разных приложений переносимые капли должны быть разных размеров. Для плазмоники нужны мелкие капли нанометрового – субмикронного размеров [2-доп,3-доп,4-доп]. Тогда как для создания квантовых точек или пирамидальных образований требуются капли микронного и больше диапазона [5-доп—10-доп]. Такие капли формируются в случае толстых пленок.

Анализ толстых пленок, их режимов сепарации от подложки, намного сложнее, чем в случае тонких пленок. Имеется пространственный масштаб равный глубине прогрева лазером. Тонкими являются пленки, толщина которых мала по сравнению с этим масштабом. Наоборот, в случае толстой пленки ее толщина существенно превосходит указанный масштаб, см. классификацию в [2]. Динамика тонких пленок детально изучена в наших работах по гранту РФ [1,3,4] (1.7-3,10,19), см. рисунки 2 и 3.

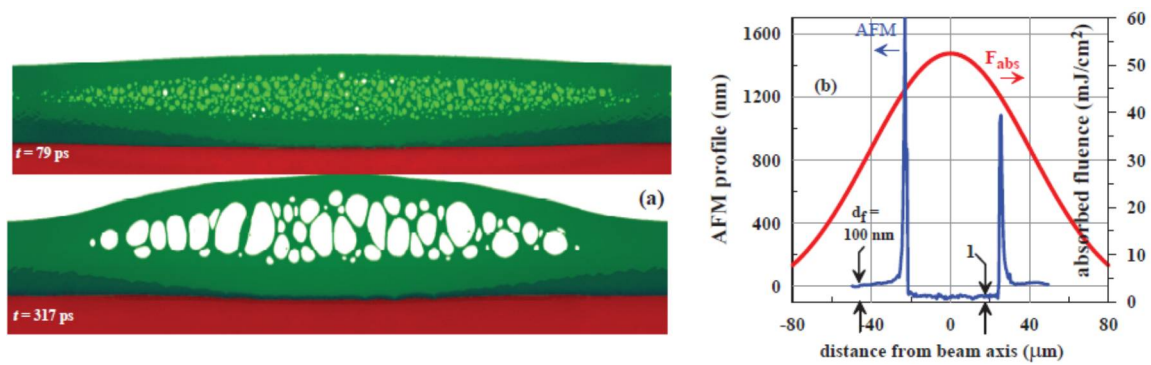


Рис. 2 ([5], рис. 3). (a) Моделирование внутреннего разрыва пленки вследствие ее быстрого нагрева ультракоротким лазерным импульсом [3]. Светло-зеленым цветом выделен расплав золота. Темно-зеленый цвет относится к кристаллу. Вещество подложки (стекло) показано красным цветом. (b) Экспериментальные данные. Красная кривая – распределение поглощенного флюенса по диаметру пятна нагрева. Это распределение было использовано в расчете, показанном слева. Синяя кривая – данные AFM (atomic force microscope) профилирования. На поздних временах «крышка» сверху над полостью, заполненной пеной на рисунке (a), отрывается и улетает на «бесконечность». Во время отрыва «крышки» происходит процесс рекристаллизации. Поэтому по краям кольца отрыва остаются замороженные остатки крышки – высокие пики слева и справа на рис. (b).

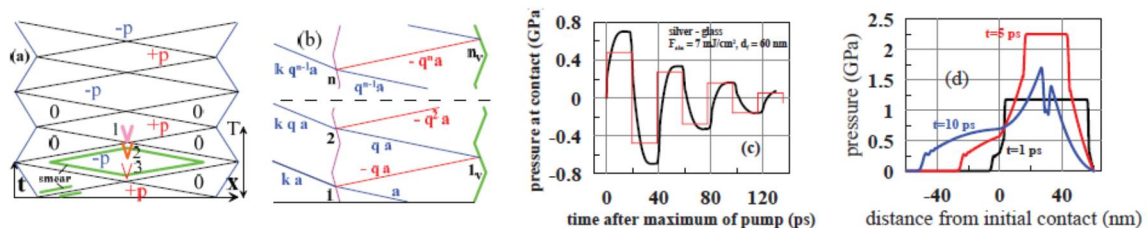


Рис. 3. Динамика тонких пленок согласно работе [4]. (a, b, c) Осцилляция пленок на временах больших по сравнению с звуковым масштабом времени $t_s = d_f/c_s$, где d_f и c_s – толщина пленки и скорость звука. (a) Свободновисящая пленка (две свободные границы). В этом случае осцилляции не затухают (если пренебречь вязкостью). (b, c) – пленка в контакте с подложкой. В этом случае амплитуда осцилляций постепенно уменьшается (затухание) из-за излучения звуковых волн в подложку. В рассматриваемом случае акустический импеданс подложки меньше импеданса пленки. (d) Показано, как происходит расширение пленки в сторону вакуума (справа от точки 50 нм – начальная толщина пленки) и в сторону подложки (слева от точки $x=0$ – начального положения контакта между пленкой и подложкой). Важно, что расширение происходит после быстрого нагрева. Время нагрева пленки насквозь меньше акустического масштаба времени t_s . В случае толстых пленок нет этого сверхзвукового прогрева насквозь.

В нашей работе [2] (1.7-5) разъяснено, какие события имеют место в случае воздействия на толстую пленку, см. рис. 4. Анализ этих событий позволяет понять, что происходит в опытах [7-доп – 9-доп], в которых авторы приводят только данные экспериментов и качественные рассуждения.

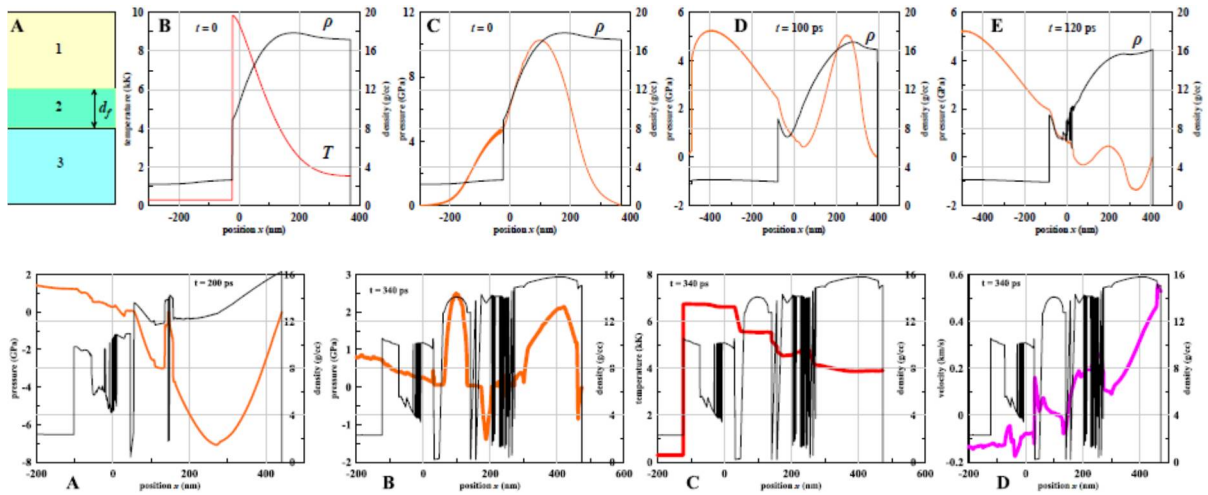


Рис. 4 ([2], рис. 1.2). Численное моделирование воздействия лазерного импульса длительностью 50 пс на пленку золота толщиной 380 нм [2]. Пленка нанесена на стекло, см. рис. А. На рис. А среда 1 – вакуум, среда 2 – толстая пленка золота (толщина больше толщины слоя прогрева), среда 3 – стеклянная подложка, которая занимает всё нижнее полупространство. Лазер проходит через стекло снизу и поглощается в скин-слое золота. В данной геометрии стекло препятствует расширению нагретого золота. Соответственно давления существенно выше, чем те, которые были бы в случае вакуумной среды 3. Слой золота был предварительно расплавлен предыдущим импульсом, см. постановку опытов в статьях [8-доп, 9доп]. В расчете, показанном на рисунке начальная температура золота равна 1.5 кК.

Время отсчитывается от максимума интенсивности импульса. Поэтому в момент $t=0$, показанный на рис. В и С, половина энергии уже поглощена золотом. Поглощением в стекле и изменением коэффициента поглощения пренебрегаем, поскольку интенсивность импульса умеренная. Полная поглощенная энергия в расчете составляла 338 мДж/см². Это большая энергия. Действительно, порог абляции в случае ультракороткого импульса составляет примерно 100 мДж/см² [11-доп – 13-доп]. При поглощении 100 мДж/см² температура в слое прогрева подымается до 2-2.5 кК. В расчете, показанном на этом рисунке, энергия существенно больше, тогда как толщина слоя прогрева примерно такая же (~100 нм), как в случае с объемной мишенью. Следовательно, температуры в слое прогрева намного выше, чем 2-2.5 кК, см. рис. В.

Давления в волне сжатия в золоте и стекле на момент $t=0$ представлены на рис. С. Как видим, волна сжатия еще не дошла до тыльной границы золота (граница пленка-вакуум между средами 1 и 2 на рис. А). Давление на контакте меньше максимума давления в золоте из-за малости акустического импеданса стекла по сравнению с импедансом золота, см. рис. С.

На рис. D и E показан процесс отражения волны сжатия от тыльной границы. Появление местного максимума плотности золота на контакте на рисунках D и E означает, что происходит торможение контакта за счет сопротивления стекла расширению золота. Вследствие расширения золота во внутреннем слое правее минимума давления на рис. D в горячем расплаве (из-за высоких температур прочность золота по отношению к растяжению мала, см. рис. В) начинается кавитация. Давление падает ниже давления в критической точке золота, образуется двухфазная смесь.

Нижний ряд. А. $t = 200$ пс. Растяжение еще продолжается. Оно вызывает новые разрывы, теперь вне горячего слоя толщиной порядка 100 нм возле контакта со стеклом. В. $t = 340$ пс. Разрывы прекращаются. После этого давление падает до малых значений. С. Разрывы сплошности заполнены пеной. Теплопроводность пены низкая. Внутри сплошных слоев теплопроводность намного выше. Поэтому распределение температуры принимает ступенчатый вид. В среднем слое температура составляет 4.5-5.5 кК. D. Показано поле скоростей. Это очень важный график. На правом краю скорости велики: от 100 до 600 м/с. Этот слой невозможно удержать поверхностным натяжением, вещество слоя улетает на бесконечность. Главным является средний слой, который движется с малыми скоростями порядка 10 м/с. Он удерживается капиллярными силами. В результате образуются купола и джеты, которые наблюдались в работах [8-доп, 9-доп]. Эти структуры аналогичны тем, которые изучались в работах [1, 2-доп]. Таким образом, наши расчеты дают возможность понять, что происходит при воздействии длинных по времени импульсов (50 пс) в случае толстых пленок.

A2. В рамках работы над проектом выполнена работа по моделированию воздействия рентгеновского оптического вихря на многослойную мишень [5] (1.7-11+12). Понято явление формирования центрального заострения в окрестности центра, т.е. в области, где интенсивность воздействия близка к нулю [5]. У рентгеновского вихря интенсивность в центре равна нулю. Далее при удалении по радиусу от центра эта интенсивность сначала возрастает, а потом начинает убывать. Т.е. распределение интенсивности имеет форму бублика. До этой работы воздействие световыми вихрями изучалось только с применением лазеров инфракрасного и оптического диапазонов.

Работа выполнялась в связи с экспериментаторами из Японии [5]. Лазерный импульс жесткого (7.71 кэВ) рентгена излучался из XFEL – x-ray free electron laser SACLA [14-доп]. Это фемтосекундный импульс с длительностью 10 фс. Длина волны 1.6 Ангстрема на четыре порядка уменьшает лимитированный дифракцией размер минимального пятна фокусировки (в наших экспериментах этот предел не достигается, размер пятна порядка мкм). Использовалась спиральная фазовая пластинка Френеля, которая создает нулевое поле и фазовую аномалию в центре сфокусированного рентгеновского пучка. Рассматривались как однослойные, так и многослойные мишени. В многослойном случае крупномасштабное численное моделирование было проведено для чередующихся слоев золота и хрома (всего пять слоев), напыленных на кремниевую подложку.

Воздействие импульса с распределением интенсивности в виде бублика приводит к формированию тороидальной оболочки из расплавленных металлов. Решающим (для формирования заострения в центре) оказывается действие капиллярного натяжения во внутреннем кольце тороида. Оно приводит к стягиванию внутреннего кольца к оси, превращению его в трубку и сжатию трубки в центральную колонкообразную затвердевшую структуру [5].

В работах [6-8] (1.7-6,2,8) по проекту было изучено формирование чрезвычайно острых острий (игл) при фокусировке в ограниченное дифракцией малое пятно на пленке. Иглы имеют радиус скругления в вершине в единицы нанометров. Такие иглы могут применяться, например, как концентраторы электрического поля на вершине. Найдено, что в окрестности заострения возникают необычные кристаллические формы с 5-кратной симметрией (икосаэдр) [6,7]. Процесс затвердевания струи, формирующейся на вершине нанобампа, и разрыва струи в твердом состоянии с образованием резкого заострения показан на рис. A2.1.

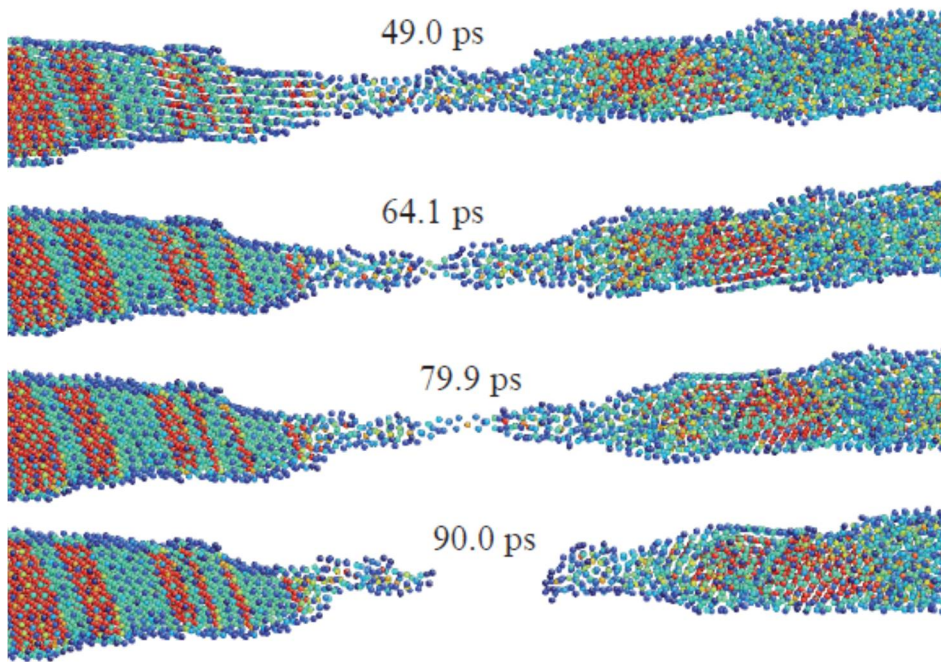


Рис. А2.1 ([7], рис. 17).

Процесс разрыва затвердевшего участка струи на вершине нанобампа и формирование острого заострения [6,7].

А3. Важной целью проекта РНФ 14-19-01599 (запланированной на два года исполнения проекта) является моделирование задач со сложным электромагнитным (ЭМ) полем, *решаемых совместно* с решением задачи о теплофизическом и динамическом отклике мишени на данное воздействие. Теплофизика означает, что рассматриваются двухтемпературные явления (электроны горячее ионов, выравнивание температур), плюс плавление, плюс испарение, плюс рекристаллизация. Динамика заключается в перетоках вещества мишени с учетом инерции, капиллярных сил и давления паров, см. один из случаев «сложное поле/трехмерные термомеханические явления» выше в пункте А1 [1-4] – там сложное поле создается высокоапертурным объективом, фокусирующим ЭМ излучение в исключительно малое фокальное пятно с распределением интенсивности, которое контролируется объективом и эффектами дифракции. В [8] дифракционно лимитируемое ЭМ поле действует на свободновисящую пленку. В разделе А3 сложное поле создается за счет интерференции плазмон-поляритонной (ППР) моды и падающей ЭМ волны.

Здесь мы продвигаем вперед физику взаимодействия излучения с веществом (ФВИВ) по сравнению с тем, что было раньше (i, ii, iii).

- (i) Ранее разными авторами рассматривалась одномерная (1D) постановка, при которой имелось однородно распределенное по плоскости мишени поле, см., например, [3,4].

- (ii) На следующем этапе развития ФВИВ, совместно (т.е. поле/термомеханика в 3D геометрии) изучается задача о пятне [1,2,8] раздел А1 или о кольце нагрева [5] раздел А2.
- (iii) В разделе А3 речь идет о совместно (3D-поле/3D-термомеханика) решаемой проблеме воздействия интерференционного ЭМ поля. Это *новая* проблема. Требуется рассчитать диссипацию в скин-слое суммарного поля от плазмонной моды и внешней ЭМ волны. Такая диссипация неоднородна по плоскости (интерференционные полосы). Важно то, что полосы «пропечатываются» в рельефе мишени за счет термомеханических эффектов вследствие процессов плавления-перемещения-затвердевания. Насколько нам известно, в такой постановке (ЭМ полосы и термомеханика) проблема ранее не рассматривалась ввиду ее сложности.

Проблема является весьма актуальной для современной плазмоники. Большой интерес представляют устройства генерации ППР волн. Мы в проекте рассматриваем голографию, как механизм генерации. Для этого требуется создать периодическую структуру на поверхности (голограмму). Тогда, освещая эту структуру падающей плоской ЭМ волной EMW, можно возбудить бегущую поверхностную ППР волну (PPW), см. рис. 5. При этом падающая волна EMW на рис. 5 становится опорной волной в голографии, а бегущая ППР волна PPW на рис. 5 является восстановленным изображением.

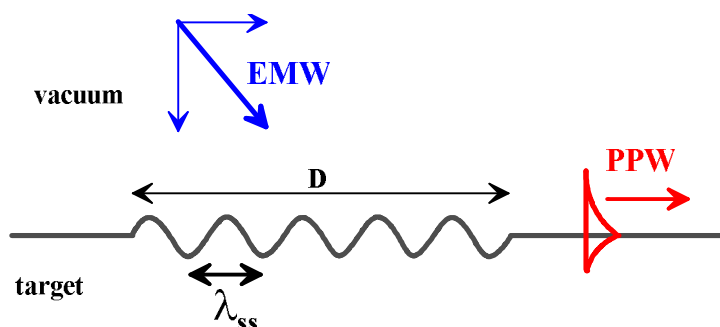


Рис. 5. Излучение поверхностной плазмонной волны PPW из голограммы (периодическая дорожка длины D с длиной шага λ_{ss}) под действием опорной волны EMW.

Спрашивается, (а) как *создать* необходимую периодическую структуру на рис.5, чтобы выполнялось фазовое согласование между опорной волной и ППР модой, и (б) как добиться, чтобы эта структура имела требуемый пространственный период λ_{ss} ?

Мы рассматриваем два варианта «печатания» голограмм.

В первом варианте лазерный импульс расщепляется на два. Один проходит через стеклянный клин и освещает под резонансным углом тонкую пленку, нанесенную на торец клина. При этом в пленке возбуждается поверхностная плазмонная волна. Система из клина, пленки и резонанса называется конфигурацией Кречмана [15-доп, 16-доп]; возбуждение акустических осцилляций в пленке в геометрии Кречмана изучалось в работе [17-доп]. Второй импульс освещает пленку со стороны вакуума.

Т.о. ППР мода и внешняя ЭМ волна имеют одинаковую частоту переменности во времени. Их интерференция показана на рис. 6.

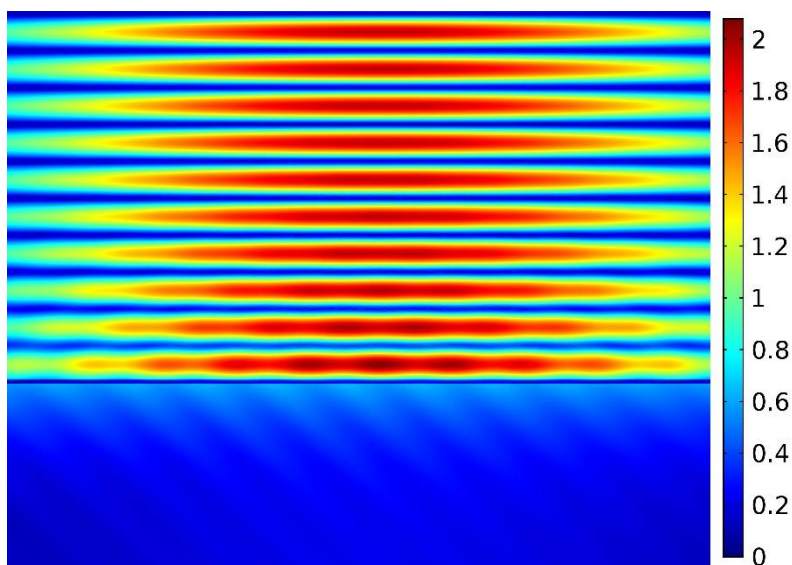
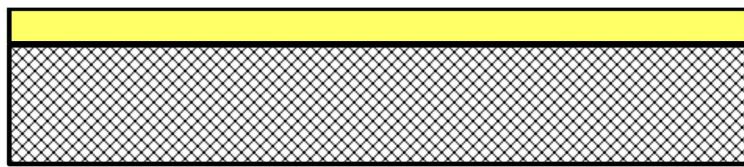


Рис. 6. Пространственное

распределение интенсивности усредненного по периоду осцилляции суммарного поля ЭМ полей падающей плоской, отраженной плоской и бегущей вдоль поверхности пленки плазмонной волны. Пленка имеет вид тонкой темной полоски под падающей на пленку волны и отраженной от пленки волны. Учитывается, что падающий пучок имеет конечную протяженность вдоль пленки (расстояние D на рис. 5). В результате сложения волн возникает стоячая ЭМ волна на поверхности, имеющая значительную разницу амплитуд (десятки процентов) между максимумом и минимумом стоячей волны (видность интерференционной картины).

На рис. 6 показаны внешняя плоская ЭМ волна, падающая на тонкую пленку по нормали к пленке, и плазмонная мода. Глубина модуляции в стоячей волне достигает десятков процентов; как сказано, стоячая волна суть сумма падающей и плазмонной волн. Длина волны стоячих осцилляций определяется длиной волны плазмона (примерно 500 нм). Пленка имеет толщину в 2-3 раза больше толщины скин-слоя, последняя составляет 10-15 нм. Модуляция амплитуды стоячей волны приводит к модуляции диссипации световой энергии в скин-слое. Таким образом, возникает модуляция нагрева пленки с амплитудой в десятки процентов на длине волны модуляции λ_{ss} вдоль пятна нагрева размером D , см. рис. 5.

Такой квазипериодический нагрев (длина волны λ_{ss} , пятно D) индуцирует квазипериодический термомеханический отклик, представленный на рис. 7 и 8.



пленка на подложке ДО и POSLE модулированного воздействия

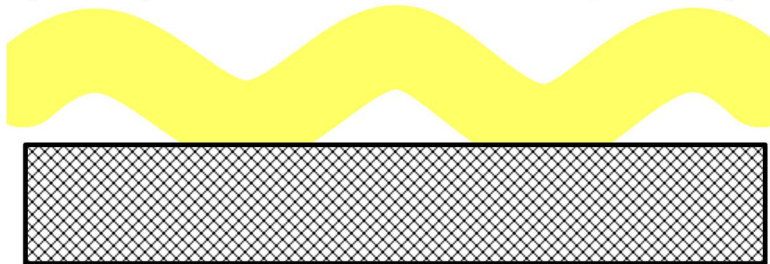


Рис. 7.

На рис. 7 пленка до воздействия, показанного на рис. 6, напылена на диэлектрическую подложку. Модулированное ЭМ воздействие модулирует нагрев и механический отскок пленки от подложки; для пятна воздействия такие процессы, как нагрев и отскок изучались в работах [1,2]. В результате пленка приобретает гофрировку, показанную на нижней панели рис. 7.

золотая пленка ДО воздействия



золотая пленка POSLE воздействия



Рис. 8.

На рис. 7 пленка нанесена на подложку (есть границы с вакуумом и с подложкой). На рис. 8 показан случай свободновисящей (две границы с вакуумом) пленки. Гофрировка ЭМ воздействия индуцирует появление периодической системы внутренних полостей в свободновисящей пленке (они показаны в виде оранжевых эллипсов на нижней панели); полости можно сформировать и в пленке на подложке. Образование полостей в пленке изучалось в работах: [18-доп] (единичная полость в ультратонкой пленке), [19-доп] (система полостей в поверхностном слое объемной мишени; формируются вблизи порога абляции), [2,8] (уединенная полость внутри свободновисящей пленки. Полость может быть велика – отношение высоты полости по нормали к пленке больше продольного размера вдоль пленки [2,8]).

Причем амплитуда гофрировки после перетекания вещества и заморозки гофр на рис. 7 и полостей на рис. 8 может быть большой [2,8] (1.7-5,8). Наличие большой амплитуды у замерзшей стоячей волн имеет важное значение. Чем больше амплитуда, тем эффективнее работа голограммы. До амплитуд порядка длины волны λ_{ss} , эффективность генерации ППР мод примерно пропорциональна отношению амплитуды гофр к длине волны гофр λ_{ss} .

Во втором варианте лазерный импульс воздействует на уединенную структуру на металлической пленке [20-доп], см. рис. 9. Эта структура создается предварительно остросфокусированным импульсом на пленке (примеры таких уединенных поверхностных структур приведены в [1]).

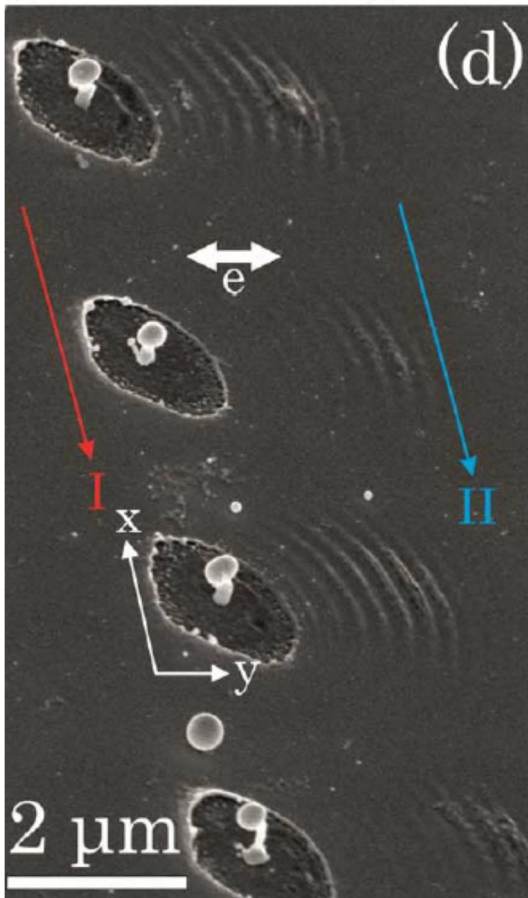
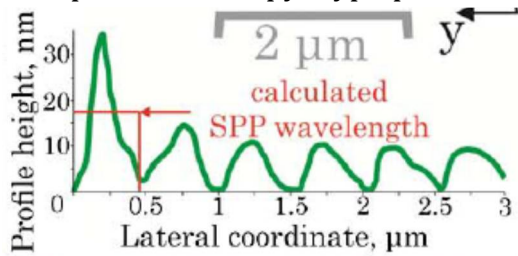


Рис. 9. Взято из работы [20-доп]. Красной стрелкой I обозначена цепочка центров первых выстрелов. Эта цепочка создает первичный нанобамп с центром там, где находится наноджет с каплей. Стрелкой II показана цепочка вторичных выстрелов, центр которых несколько смещен в сторону относительно центра нанобампа от соответствующего первого выстрела. Выстрел II, во-первых, освещает пятно рядом с нанобампом, и, во-вторых, создает плазмонное колебание на нанобампе, которое распространяется от нанобампа. Из-за интерференции ППР волны от нанобампа с падающей ЭМ волной возникает стоячая волна ЭМ поля возле поверхности. Термомеханическое воздействие стоячей волны оставляет систему гребней (гофр) на поверхности. Как именно это происходит (пропечатывание) удалось выяснить благодаря нашим расчетам. Сверху показано вычисленное поле на поверхности.

Первым выстрелом создается структура в виде купола, конуса или купола с джетом на вершине. Второй выстрел генерирует плазмонную волну, которая бежит от купола. Во время действия импульса эта волна интерферирует с падающей ЭМ

волной. Возникает стоячая волна, гофры которой пропечатываются на поверхности пленки наподобие волн на поверхности воды от брошенного камня, см. рис. 9.

Нами проведено моделирование, которое определяет длину волны плазмонной моды (около 400 нм) и глубину модуляции максимум/минимум стоячей волны (десятки процентов). Эти данные похожи на те, которые соответствуют первому варианту. Далее выполнено теплофизическое/гидродинамическое моделирование с помощью метода тонких пленок (см. [21-доп]) и крупномасштабной молекулярной динамики (МД). Ранее ни метод тонких пленок, ни МД не применялись для задач с периодической гофрировкой.

Благодаря решениям с тонкой пленкой [21-доп], нам удалось подготовить данные для оптимального МД расчета. Это важно, поскольку вслепую перебирать МД постановки слишком накладно по ресурсам и времени. Пример расчета с тонкой пленкой показан на рис. 10.

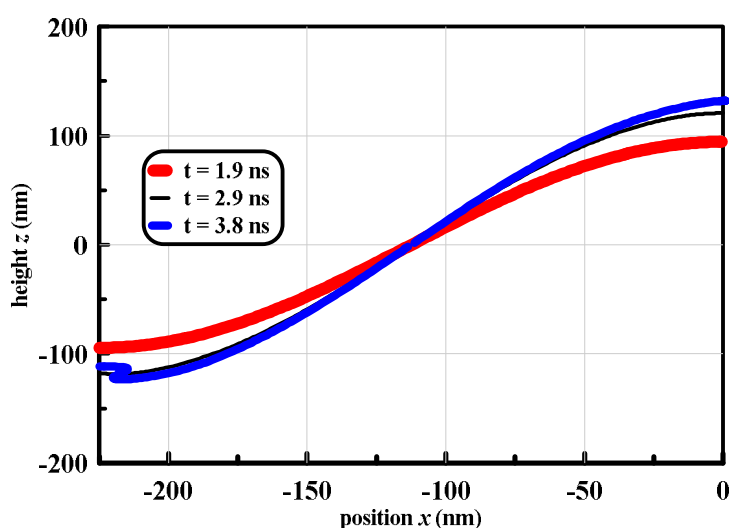


Рис. 10. Развитие возмущения на пленке.

В начальный момент пленка плоская. На ней задается периодическое распределение начальной скорости [21-доп], которое следует из распределения поглощенного флюенса вдоль пленки. На рисунке показана половина пространственного периода 500 нм. Моменты времени относятся к стадии замедления и остановки движения пленки под влиянием капиллярных сил. В момент 3.8 нс начинается зарождение джета.

Распределение поглощенного тепла с модуляцией из-за действия стоячей волны приводит к модуляции скорости отскока пленки от подложки. Длительность вторичного лазерного импульса (короче пикосекунды), создающего гофрировку, намного меньше длительности формирования гофрировки (единицы и десятки наносекунд). За это время температура выравнивается по пространственному периоду гофрировки и обычно остается выше температуры кристаллизации золота (расчёты проведены для пленки из золота). Заморозка гофр связана с отводом тепла за масштаб гофрировки D , см. рис. 5 выше – на нем определены масштабы гофрировки. В МД соответствующий процесс моделируется за счет охлаждения всей пленки на периоде 500 нм расчета. Охлаждение осуществляется с помощью термостата, уменьшающего в нужном заранее вычисленном темпе (решение тепловой задачи) скорости атомов поперечные плоскости рисунка 10. Соответствующая методика описывает оба варианта формирования голограмм.

На рис. 11 показан типичный вариант МД расчета.

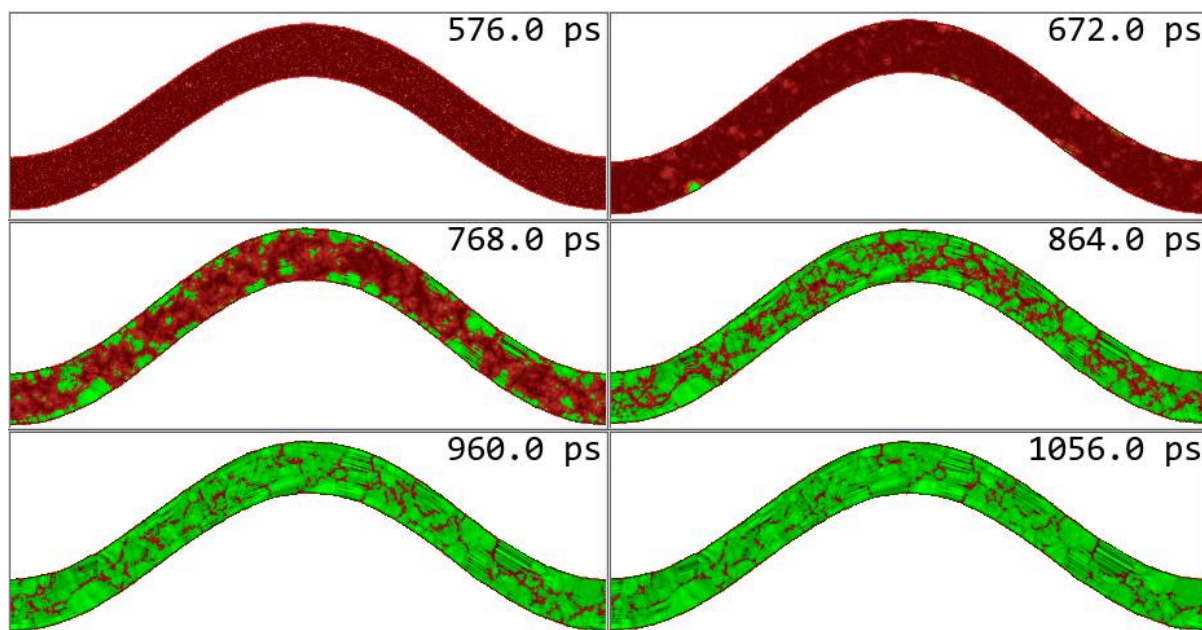


Рис. 11. Развитие гофрировки на стадии капиллярного торможения пленки и ее рекристаллизации. Красный цвет относится к жидкой фазе, зеленый – к кристаллу. Крупномасштабный МД расчет. Кристаллизация начинается в сильно переохлажденном расплаве золота. Видим, как постепенно на поверхности и в толще пленки формируются мельчайшие кристаллиты твердой фазы.

Работы, выполненные по разделу А3, готовятся к публикации.

А4. Расчеты воздействия длинных (нс) импульсов.

За отчетный год подготовлена программа в приближении тонкой пленки [21-доп] для решения задач с наносекундными импульсами. В версии [21-доп] учитывалась инерция пленки и поверхностное натяжение. Теперь добавлена, во-первых, программа с теплопроводностью. Она в простом приближении описывает растекание тепла по пленке. В настоящий момент в программе с теплопроводностью (ПТ-блок) не учитывается изменение формы пленки при движении. Тепло растекается по плоской двумерной пленке; потерями на испарение и отводом тепла в подложку пренебрегаем, это справедливо в случае подложек с низкими значениями коэффициента теплопроводности. ПТ-блок нужен нам для оценки темпа остывания пленки.

Во-вторых, мы учитываем зависимость давления насыщенного пара металла пленки от температуры. На каждом временном шаге берем из ПТ-блока наибольшую температуру по пленке – в вершине нанобампа – и находим по этой температуре давление насыщенного пара под куполом нанобампа. Пренебрегаем давлением пара с внешней стороны пленки.

Проведена серия вычислений в таком приближении. Типичный результат в безразмерных переменных представлен на рис. 12.

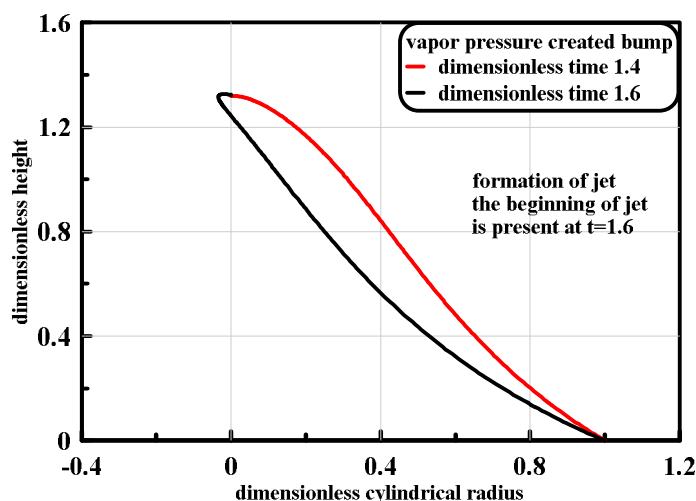


Рис. 12. Динамика пленки, отделенной от

подложки за счет давления насыщенного пара. Первоначально паровая прослойка возникает в области контакта между пленкой и подложкой. Далее пар ускоряет пленку и на ней образуется купол. Удивительно, но внешне картина оказывается схожей со случаем ультракоротких импульсов, когда отделение пленки и ее полет по инерции связаны с короткой стадией механического отталкивания пленки от подложки. Далее пленка при наносекундном воздействии постепенно остывает из-за теплоотвода на периферию, давление пара резко зависит от температуры. Поэтому давление, из-за которого растет купол, становится динамически несущественным. На первый план выходит капиллярное торможение. На рисунке показана стадия остановки увеличения высоты купола из-за сил поверхностного натяжения. После остановки в вершине купола начинает развиваться джет. Всё это хорошо коррелирует с данными опытов. На рисунке показано развитие купола и джета на нем в цилиндрических координатах.

Отметим, что теоретических работ по наносекундным импульсам, действующим на пленки пока, насколько нам известно, не имеется; экспериментальных работ много. Предстоит отработать постановку задачи для МД моделирования и подготовить первую статью. Результаты будут направлены в печать.

[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 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.

Перечень работ, выполненных по пункту [В].

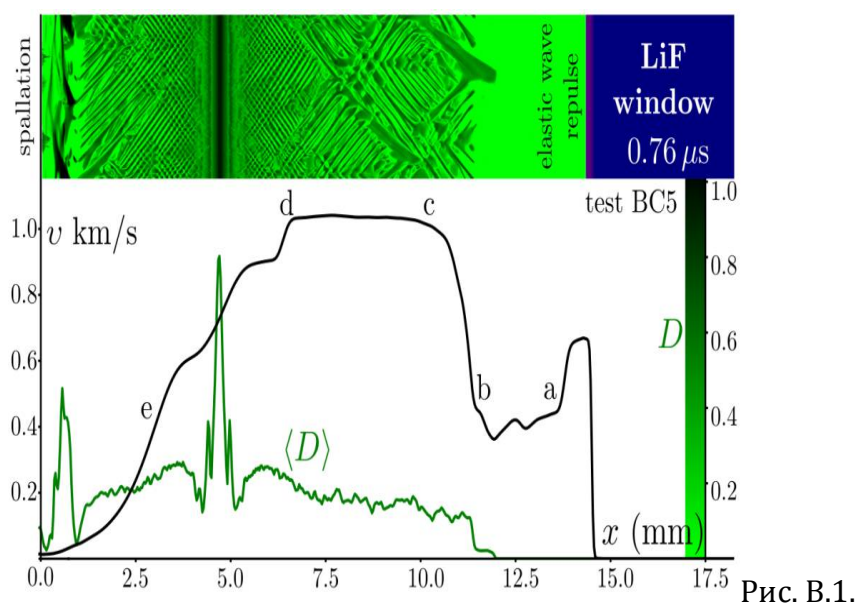
Будет решена задача о последствиях воздействия субнаносекундного (600 пс) оптического лазерного импульса на пленку 3-5 мкм железа или тантала и диагностики результатов воздействия с помощью ультракороткого (единицы фс) жесткого (10-20 кэВ) лазерного импульса XFEL (X-ray Free Electron Laser). Диагностируется 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 поставляет 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.

Понимание явления разрушения материала при чрезвычайно высоких скоростях деформации является ключевым вопросом для широкого круга научных исследований, начиная от прикладных наук и технологических разработок до фундаментальной науки, таких как взаимодействие лазерного вещества и геология. Несмотря на его интересность, его исследование опирается на тонкое многомасштабное описание между атомным масштабом и макроскопическими процессами, которые пока достижимы только при крупномасштабном атомном моделировании. Прямой сверхбыстрый мониторинг динамического разрушения (расщепления) в реальном масштабе времени в масштабе атомной решетки с пикосекундным временным разрешением оказался недоступен экспериментальным методам. Показано, что связь между импульсом мощного оптического лазерного греющего импульса и импульсом фемтосекундного рентгеновского зонда, генерируемым рентгеновским лазером на свободных электронах, позволяет выявить динамику решетки в танталовой фольге при сверхвысокой скорости деформации $\sim 2 \times 10^8$ до $3,5 \times 10^8 \text{ с}^{-1}$. Максимальное падение плотности от 8 до 10%, связанное с началом расщепления при прочности на отрыв $\sim 17 \text{ ГПа}$, непосредственно измерялось с помощью рентгеновской дифракции. Экспериментальные результаты эволюции плотности хорошо согласуются с крупномасштабным атомистическим моделированием распространения ударной волны и разрушения образца.

Запланированное полностью выполнено. Результаты опубликованы в статье [9] (1.7-1).

Выполнен важный цикл исследований в области лазерной генерации ударных волн вместе с исследованиями по распространению УВ [10-12] (1.7-4,16,13). Очень интересные результаты получены в работах [10,11]. Они относятся к моделированию распространения УВ в прочных керамиках наподобие карбида бора и др. Показано, что методика SPH в нашей многопроцессорной реализации позволяет с высокой точностью описывать мультиэтапный процесс разрушения керамик. Результаты хорошо согласуются с измерениями, а также с одномерными численными расчетами. Но в отличие от таких расчетов, мы видим внутреннюю структуру волн разрушения, см. рис. В.1.

В работе [12] проанализировано нагружение жидкой среды металлическими шарами. Через такую смесь проходит сильная УВ. Она деформирует шары и увлекает их в направлении своего движения.



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

Вопрос о многослойных зеркалах рассмотрен в работе [5] (1.7-11+12), выполненной в рамках проекта РФФ.

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 РФФ 14-19-01599 за 2017 г. будут выяснены механизмы, лежащие в основе данного явления.

В этом абзаце ссылки 1 и 2 суть:

[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. Versoloto, *Plasma Propulsion of a Metallic Micro-droplet and its Deformation upon Laser Impact*, arXiv:1604.00214v1 [physics.plasm-ph] 1 Apr 2016

Это практически важная и теоретическая сложная задача. За отчетный период подготовлены SPH программы для ее решения (SPH – smooth particle hydrodynamics). Начато численное моделирование. Используется разработанная нами мощная многопроцессорная версия SPH-кода [22-доп,23-доп,24-доп]. Это позволяет на высокопроизводительных кластерах доводить число SPH частиц до миллиарда. С таким числом частиц можно описывать в деталях сложные трехмерные процессы.

Проблемы связаны именно с геометрической сложностью задачи. Скин-слой жидкой оловянной капли, подаваемой из дозатора, составляет около 20 нм. Зона прогрева после воздействия ультракороткого импульса на каплю имеет толщину около 100 нм, когда волна сжатия покидает слой прогрева. При этом радиус капли 50 мкм – на три порядка превышает толщину волны сжатия. Чтобы решить такую задачу «насквозь», то есть со стартом с самого начала и полагая хотя бы 10 SPH-частиц на слой, необходимо 1000 миллиардов частиц – $(10^4)^3$. Из-за поляризации излучения лазерного импульса, дробящего каплю на мельчайшие фрагменты, имеются заметные 3D эффекты.

Чтобы обойти эти проблем, используется осесимметричное приближение. Расчет ведется поэтапно. С мелкими частицами проходим стадию начального лазерного энерговыклада и достижения треугольной ударной волны (УВ, волна сжатия быстро трансформируется в такую УВ) продвижения вглубь сферической капли на 4 мкм (этап 1). Затем финальные данные этапа 1 огрубляются и используются уже как начальные данные этапа 2. К настоящему времени эти расчеты не окончены.

Выполнены предварительные расчеты, представленные ниже.

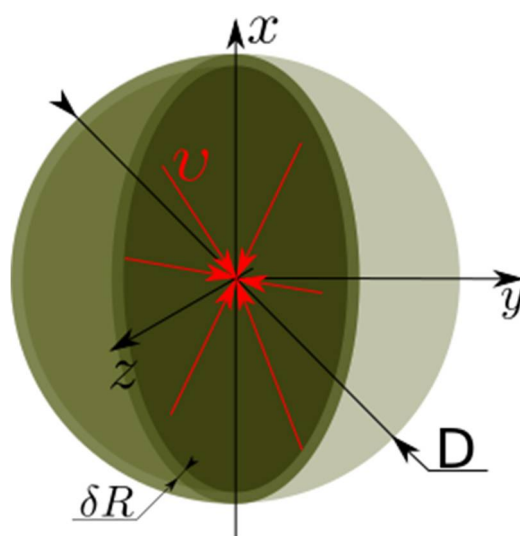


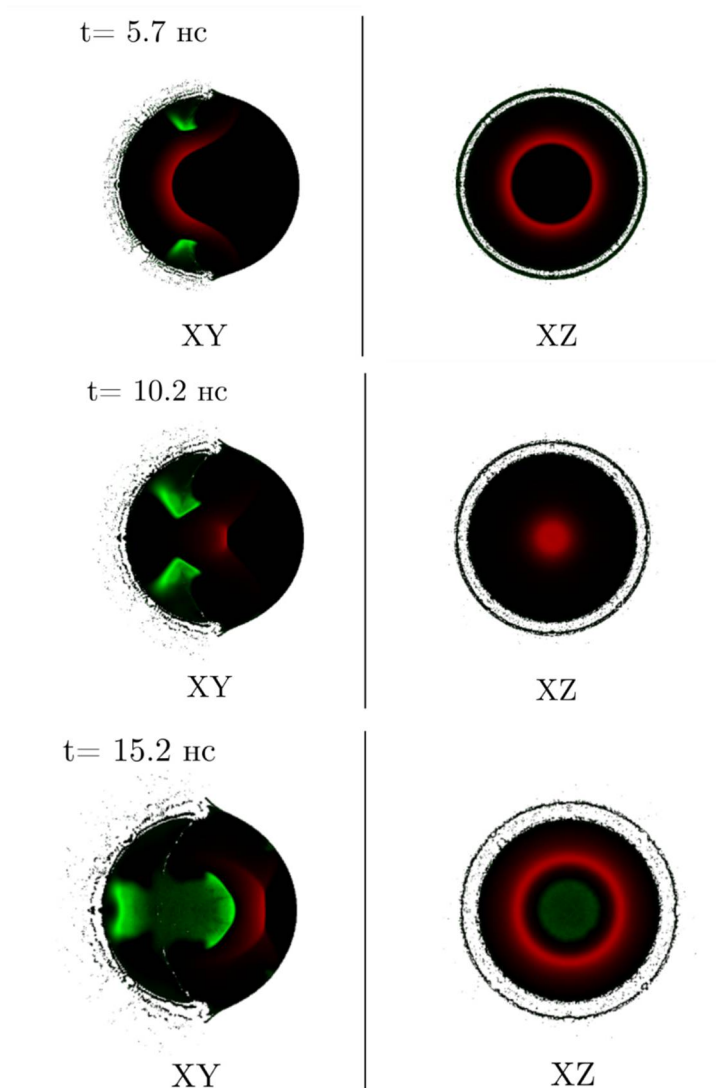
Рис. 13. Постановка задачи лазерной абляции капли олова диаметром $D = 100$ мкм. Эмуляция волны сжатия от поглощенного в поверхностном слое лазерного импульса задается путём придания левой полусферической оболочке $z > 0$ (толщина оболочки $\delta R = 1$ мкм) скорости $v = 5$ км/с по направлению к центру капли. Ниже приведены боковое и поперечное сечения капли. Боковое сечение проходит через ось z . Поперечное сечение находится в плоскости x,y . Ось z направлена навстречу волновому вектору плоской ЭМ волны, облучающей каплю.

Моделирование абляции капли олова проводилось в следующей постановке. Задавалась сфера из 40 млн SPH-частиц диаметром 100 мкм. Со стороны левой полусферы в тонком слое толщиной 1 мкм частицам придавалась скорость 5 км/с по направлению к центру капли. Это приводит к формированию ударного импульса, аналогичного лазерному воздействию. Уравнение состояния олова задавалось в форме Ми-Грюнаизена (с линейной зависимостью скорости ударной волны от массовой скорости $u_s = c + au_p$) с параметрами, приведенными в табл. 1

Нормальная плотность ρ_0 (кг/м ³)	7289
Параметр Грюнаизена γ	1.7
Парметр c (км/с)	2.59
Параметр a	1.49
Откольная прочность σ (ГПа)	1

Таблица 1. Параметры олова, используемые при моделировании.

На двумерных картах давления в плоскостях XY и XZ ниже изображена пошаговая эволюция процесса распространения ударной волны по капле олова (зеленый цвет – отрицательное давление, красный – положительное).



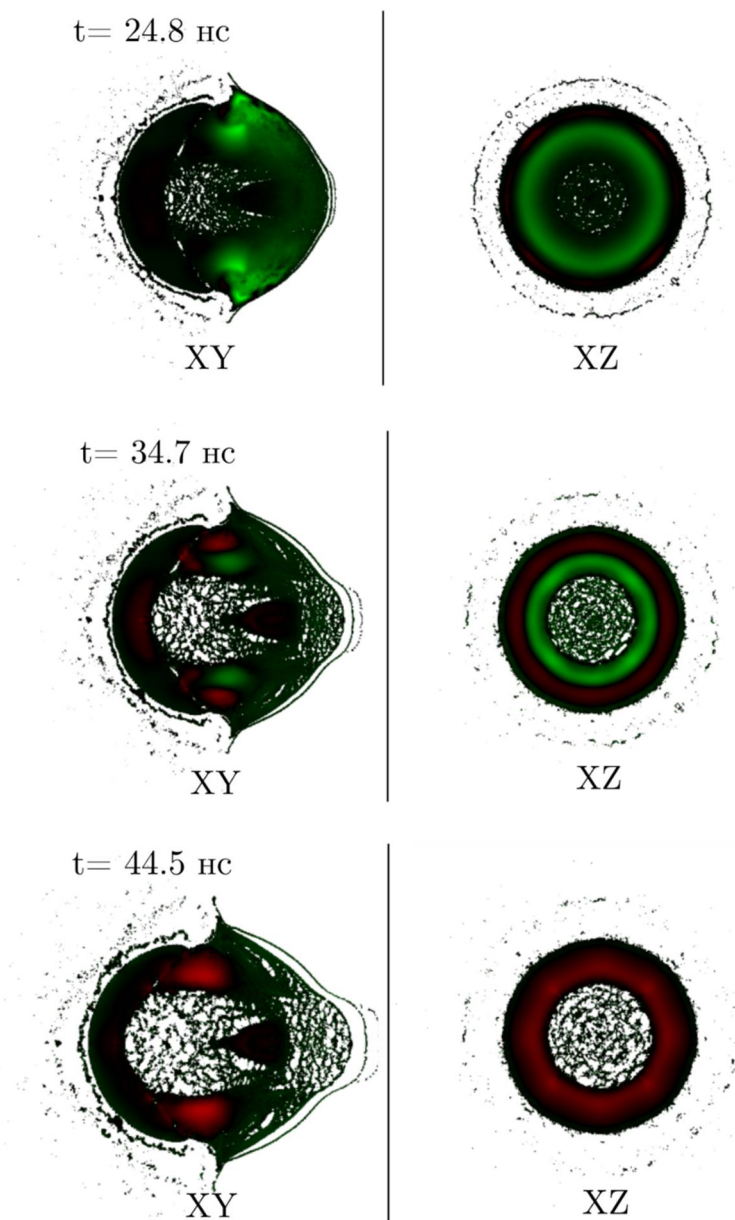


Рис. 14. Эволюция УВ при распространении в капле. Слева вид сбоку, справа – вид вдоль оси симметрии. Задача решается в полной 3D постановке. УВ сходится к центру $t = 5.7$ нс. Начинается фрагментация тонкого слоя, который прилегал к полусфере лазерного воздействия. $t = 10.2$ нс – УВ сошлась к центру, см. кадр справа. $t = 15.2$ нс – УВ прошла центр, начинает расходиться по радиальным направлениям на пути к задней полусфере. За ней следует волна разрежения, в которой возникают мощные растягивающие напряжения. $t = 24.8$ нс – УВ дошла до задней поверхности и отразилась от нее. В расширение вступает олово задней полусферы. Формируется полость в центральной области. $t = 34.7$ нс полость вокруг центра сильно расширяется. Начинается разлет вправо задней полусферы. Облака разлета вправо и влево оказываются существенно разными. $t = 44.5$ нс переход в инерционный режим разлета.

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].

Уточнена специально для данного случая программа одномерных двухтемпературных гидродинамических вычислений (1D-2T-HD). Создана программа построения рентгеновских изображений. Данная программа позволяет строить изображения на ПЗС матрице как интерферометрической картины, так и картины с кольцами Ньютона. Примеры представлены на рисунках 15 и 16.

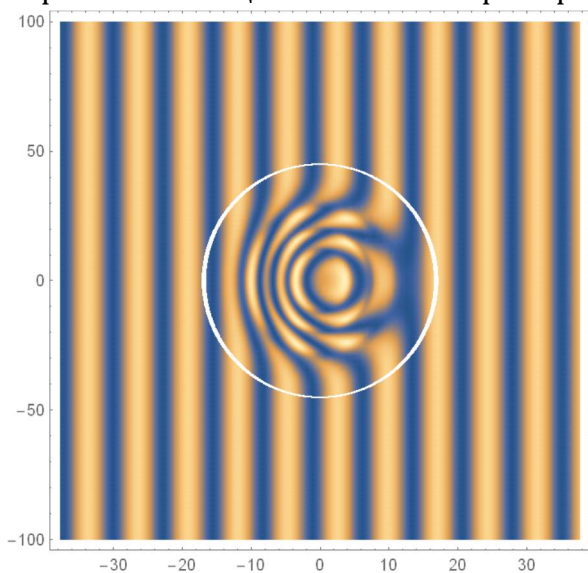


Рис. 15. Смещение интерференционных полос на куполе, созданном лазерным воздействием. Белый кружок – это основание купола. Изображение построено для конфигурации рентгеновской оптики с многослойными зеркалами молибден/кремний. Рентгеновский лазер с длиной волны 13.9 нм.

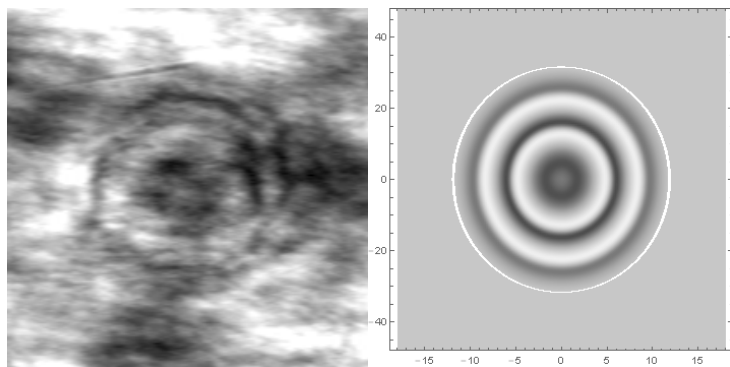


Рис. 16. Сравнение экспериментального изображения колец Ньютона и изображения, которое строится нашей программой.

По полученным данным и сравнениям с опытами готовится публикация.

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.

В работе [1.7-11+12] 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. См. также раздел А2 выше.

Выполнен эксперимент и его теоретическое сопровождение по созданию наноструктур на поверхности многослойной пленки из слоев хрома и золота при облучении такой

многослойной пленки оптическим вихрем рентгеновского диапазона, плотно сжатым в двумерном пространстве координат и во временной области путем сильной фокусировки импульса рентгеновского лазера на свободных электронах. Для создания рентгеновского вихря использовалась френелевская зонная пластинка, создающая малую интенсивность в центре сфокусированного пучка. В качестве составных частей многослойной пластинки были выбраны два элемента (золото и хром), имеющие разные пороги абляции. Это дало дополнительную возможность исследовать перераспределение компонентов мишени в процессе лазерной абляции. Выполнение экспериментов сопровождалось молекулярно-динамическим моделированием воздействия излучения на многослойную пленку. В результате экспериментов в лазерном пятне на мишени при энергии фотона лазера 7.71 кэВ в центре оптического вихря было при обнаружено возникновение острых игл с типичными шириной и высотой 300 и 600 нм (рис. 17). Наблюдаемая ширина превышает предел дифракции, но полученные наноструктуры являются наименьшими из всех, когда-либо зарегистрированных при абляции под действием интенсивного излучения лазеров на свободных электронах. Обнаружено, что элементный состав нано-игл значительно отличается от исходного состава многослойной пленки Cr / Au (рис. 18). Все эти результаты хорошо объяснены выполненным нами молекулярно-динамическим моделированием (рис. 19).

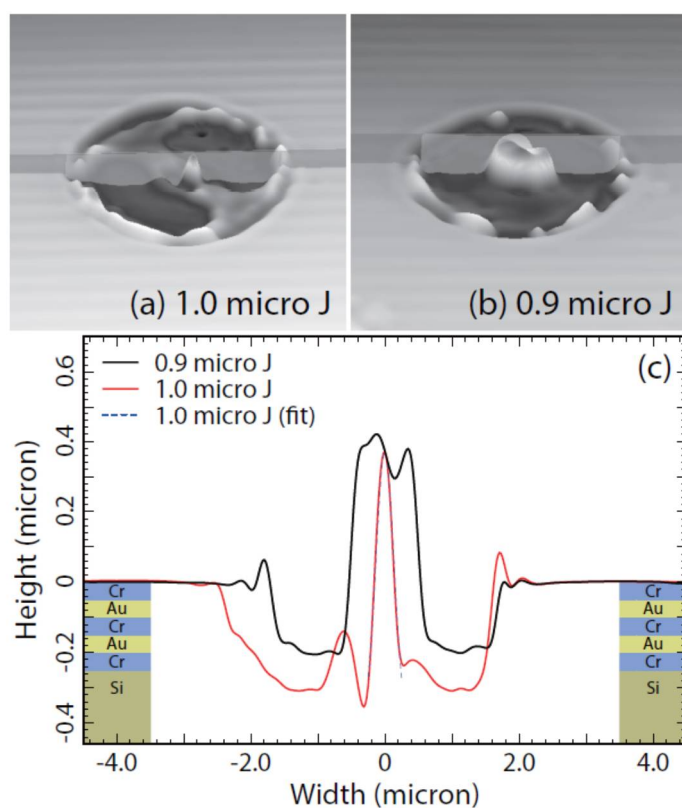


Рис. 17. Результат действия на многослойную пленку Cr/Au острогофокусированного вихря рентгеновского лазера на свободных электронах с энергиями лазерного импульса (а) 1.0 мкДж и (б) 0.9 мкДж. (с) - геометрия структуры в радиальном направлении. Образуются иглы с типичной шириной 300 нм., глубина кратера в пленке в случае (а) достигает толщины всех 5 слоев пленки, а в случае (б) соответствует толщине верхних 4 слоев. Высоты игл в случаях (а) и (б) составляют около 600 нм от основания кратера.

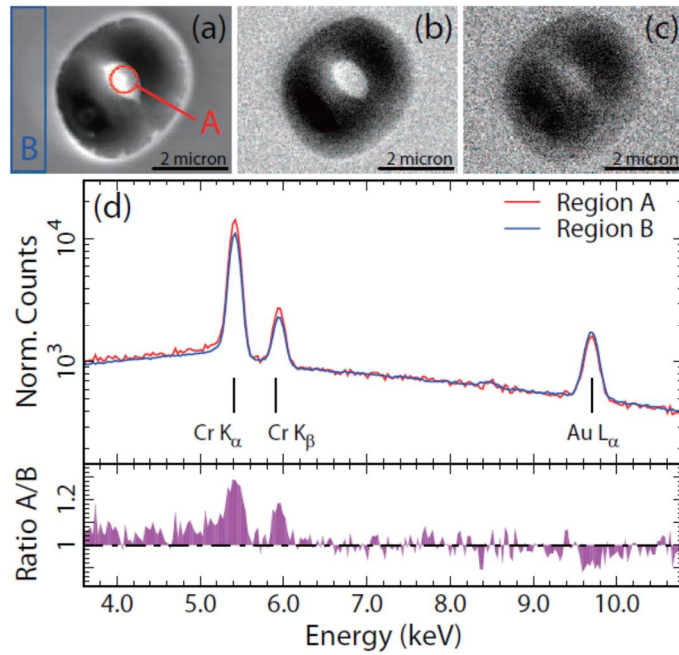


Рис. 18. (а) изображение наноструктуры при энергии лазерного импульса 0,9 мкДж. (b) изображение по линии $K_{\alpha,2}$ хрома и (c) по линии $L_{\alpha,2}$ золота. (d) На верхней панели показаны энергетические спектры из областей (A) и (B) в (a). Нижняя панель показывает соотношение между интенсивностями линий в (A) и (B), что указывает на накопление Cr и уменьшение доли Au в области иглы (A).

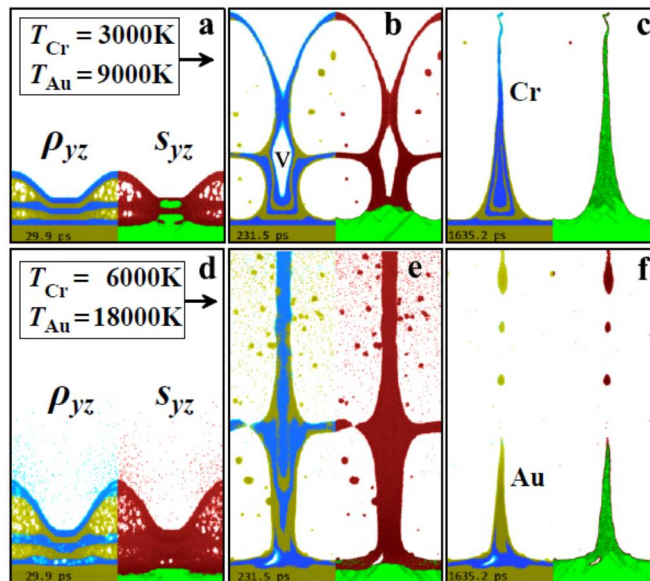


Рис.19. Результаты молекулярно-динамического моделирования при энергии лазерного импульса в фокусе 1 и 2 мкДж. Самая высокая температура внутри слоев Cr и Au 3000 и 9000 K (при 1 мкДж) (a, b, c) и 6000 и 18 000 K (при 2 мкДж) (d, e, f) соответственно. На каждой панели показывается плотность ρ_{yz} для Au (желтый) и Cr (синий) в тонкий срезе в центре и параметр S_{yz} , индикатор фазы - жидкой(красный) и твердой - (зеленый). y и z – горизонтальная и вертикальная координаты соответственно. (a,d), (b, e) и (c, f) показывают распределения при временах $t = 29.9$ пс, $t = 231.5$ пс и $t = 1635.2$ пс, соответственно. Основным химическим элементом внутри иглы резко изменяется от Cr в случае (c) до Au в случае (f).

Подготовлена статья [5] (1.7-11+12), см. также раздел A2 выше.

[C] 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.

Работа по пункту [C] тесно связана с подготовкой кода 1D-2T-HD, который учитывает наши последние данные по электронному вкладу, и с программами построения рентгеновских изображений, см. предыдущий раздел. Данные по электронному вкладу в теплоемкость и давление находятся с помощью квантово-механических вычислений состояний двухтемпературной конденсированной среды. Такие состояния возникают при воздействии ультракороткого лазерного импульса. Для вычислений нами применяются DFT (Density Functional Theory) коды VASP, Elk и др.

[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.

[D] В рамках гранта РНФ выполнена и принята в печать в PRL работа [13] (1.7-14+15) о взаимодействии поляризованного света с малыми частицами. Аккуратное решение проблемы о взаимодействии света с частицами состоит из двух одинаково важных частей. Во-первых, необходимо вычислить сечение взаимодействия, поскольку оно определяет величину поглощенной энергии и ее распределение по частице. Работа [13] как раз посвящена исследованию поглощения излучения различной мультипольности малыми частицами в зависимости от их размеров, формы и комплексной диэлектрической проницаемости материала частицы. Во-вторых, требуется промоделировать теплофизический и гидродинамический отклик частицы на лазерное воздействие. Результаты работ по первой части проблемы, выполненные за 2017 год в рамках гранта РНФ 14-19-01599, представлены в статьях [13,14] (1.7-14+15,17). Параллельно в течение года строилось решение второй части проблемы ([E]). Оно описано выше в разделе В, см. рис. 13 и 14.

[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.

Пункты F и G

[F] 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.

Важнейшим является вопрос о механизмах формирования наночастиц при лазерной абляции металлической мишени в жидкость. Лазерный метод получения чистых (по сравнению с химическими методами) кристаллических наночастиц (НЧ) востребован в технологиях. В то же время понимания того, как протекают процессы образования НЧ, до сих пор нет. Недавно (2017 год) появился весьма подробный (454 ссылки, 59 иллюстраций) обзор китайских авторов по данной теме [25-доп] (open access). В этом обзоре отлично проиллюстрированы приложения в технологиях, плазмонике, сенсорах и биомедицине.

Здесь для нас важно то, что данный обширнейший обзор показывает положение дел в мировой науке в направлении осмысления ситуации, в смысле развития теории, моделирования и понимания. Из 59 рисунков и 454 цитирований лишь один рисунок 11 и ссылка 120 имеют отношение к моделированию процессов на самой главной ранней стадии (работа 120 выполнена в простейшей постановке для ультратонкой пленки 20 нм. Мы рассматриваем [15,16] (1.7-6,9) гораздо более важную для приложений ситуацию с объемной мишенью). На ранней стадии мы стартуем с условий: металл-жидкость. Причем контактирующие вещества разделены границей, развалить которую для формирования НЧ очень не просто. Всё остальное в статье [25-доп] – это про поздние стадии, про формирование, расширение и последовательные схлопывания кавитационного пузырька, про уравнение Релея-Рябушинского-Плессета и т.п. Данные разделы относятся к достаточно разработанной области науки, примыкающей к сонолюминесценции. В этой области науки исследователи проводят эксперименты и получают данные наподобие эволюций, показанных на рис. 7 и 8 статьи [25-доп]. А осмысление сводится к рис. 6 статьи [25-доп], который носит исключительно качественный и грубый характер.

В опытах исследователи видят пузырьки. Но это поздние стадии – субмикросекунды и позже. Между тем дробление на НЧ или конденсация в НЧ и захват НЧ в жидкость происходят на стадии субнаносекунд, которой исследователи не в состоянии обнаружить в опытах и до сих пор плохо понимают. Наша работа нацелена именно на преодоление данного разрыва в понимании. Спрашивается, как отрываются и

попадают в жидкость НЧ. Как они оказываются внутри парового (пары жидкости) пузырька.

Работа ведется, начиная с 2015 г., и состоит из ряда этапов. На первых этапах был разработан межатомный потенциал воды, см. рис. 17. На этапе 2017 года этот потенциал был усовершенствован для конкретных расчетов абляции золота в воду. Добавлен потенциал взаимодействия золото-вода отталкивательного характера, поскольку поверхностное натяжение золота намного превышает поверхностное натяжение воды. Потенциал золото-золото был создан в нашей группе и опубликован в статье Жаховского и др. 2009 года [26-доп]. ЕАМ потенциал Au [26-доп] апробирован в наших предыдущих работах, а также применяется другими авторами в их собственных вычислениях.

С указанными потенциалами выполнены расчеты абляции золото/вода с помощью крупномасштабной молекулярной динамики (МД) в комбинации с описанием механизма теплопроводности с помощью блока Монте-Карло (МК). Результаты моделирования описаны в двух статьях [15,16]. Одна статья принята для публикации [15] (1.7-6), другая [16] (1.7-9) направлена в журнал Matter and Radiation at Extremes - Journal - Elsevier. Результаты МД-МК подхода дополнены расчетами с помощью двухтемпературного гидродинамического (2Т-ГД) кода [15,16]. В 2Т-ГД применяются двухтемпературная физика, широкодиапазонное уравнение состояния золота и аппроксимация адиабаты воды.

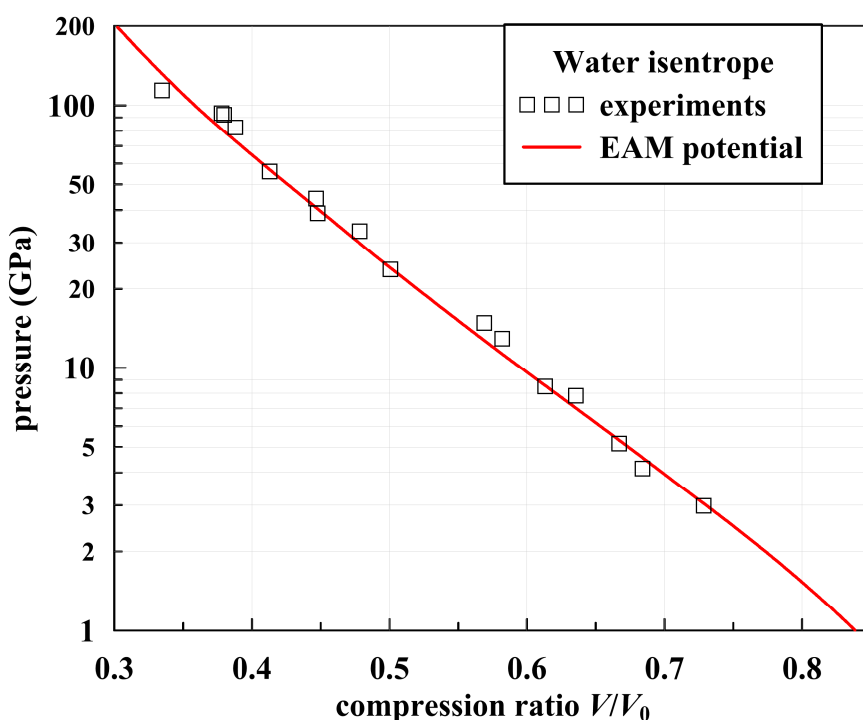


Рис. 17. Сопоставление

экспериментальных данных по воде и давления на холодной адиабате воды согласно межатомному потенциалу воды, разработанному в рамках гранта РФФ.

[G] 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.

За отчетный период удалось создать потенциалы межатомного взаимодействия олова с существенно разными значениями коэффициента поверхностного натяжения. Как говорилось, они требуются для скейлинга требований к объему молекулярно-динамических (МД) вычислений в сторону снижения этих требований. Поясним вкратце, см. подробности о приемах скейлинга при МД моделировании в работах [1,27-доп,2-доп]. Имеются безразмерные числа и теория подобия по ним.

Важным является капиллярное число. Подсчитаем радиус частицы в капиллярных масштабах. В эксперименте берем радиус частицы и коэффициент поверхностного натяжения, потом подсчитываем радиус частицы в капиллярных масштабах. В МД симуляции для уменьшения размера применяем межатомный потенциал с уменьшенным коэффициентом натяжения. Тогда эквивалентный в смысле теории подобия размер частицы в МД получается меньше, чем в эксперименте. Причем в 3D геометрии отношение входит в кубе. За счет этого обеспечивается выигрыш в параметрах расчета.

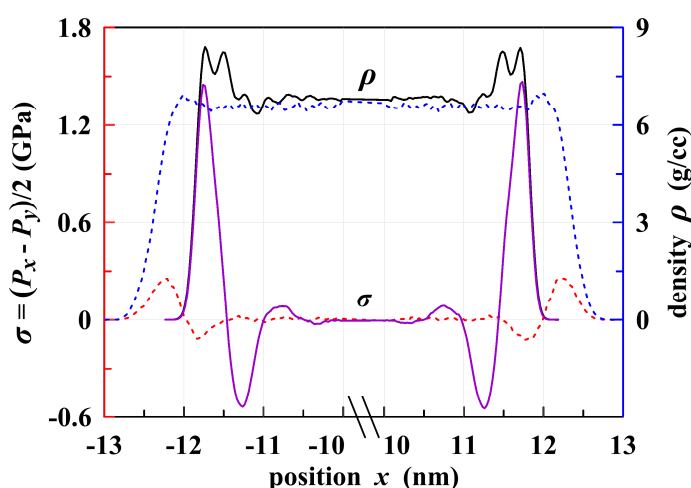


Рис. 18. Методика подсчета коэффициента поверхностного натяжения согласно приложению работы [21-доп]. Здесь представлен случай олова, см. текст.

Для исследования влияния поверхностного натяжения на кавитацию и фрагментацию мы разработали два межатомных потенциала для жидкого олова, которые имеют разные поверхностные натяжения. Олово, моделируемое с использованием потенциала EAM1, профили плотности и напряжения сдвига в пленке которого показаны сплошными линиями на рисунке 18, имеет поверхностное натяжение 0.59 J/m^2 , что очень близко к экспериментальной величине 0.525 J/m^2 . Олово EAM2, профили которого показаны штриховыми линиями, имеет поверхностное натяжение 0.133 J/m^2 , что почти в 4 раза меньше. Вследствие слегка более высокого теплового расширения олово EAM2 имеет слегка меньшую плотность жидкости в точке плавления.

Несмотря на то, что потенциалы имеют разные поверхностные свойства, их парные, зарядовые функции, энергии погружения различны – тем не менее, они демонстрируют идентичную реакцию на деформацию, как указывают холодные

кривые давления на рис. 19. Такая механическая идентичность EAM1 и EAM2 неувидительна, так как она закладывалась в процедуру подгонки. Это позволяет наблюдать различия в процессе фрагментации при одинаковых размерах, ударных нагрузках и волнах растяжения.

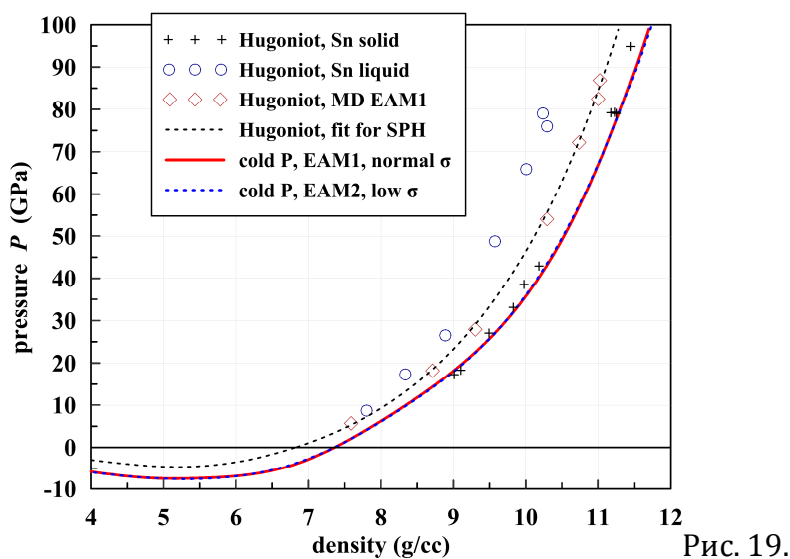


Рис. 19.

Литература (работы за отчетный период, выполненные в рамках гранта РФФ 14-19-01599)

[1] Wang, X. W.; Kuchmizhak, A. A.; Li, X.; Juodkazis, S.; Vitrik, O. B.; Kulchin, Y. N.; Zhakhovsky, V. V.; Danilov, P. A.; Ionin, A. A.; Kudryashov, S. I.; Rudenko, A. A. & Inogamov, N. A. *Laser-induced Translative Hydrodynamic Mass Snapshots: non-invasive characterization and predictive modeling via mapping at nanoscale*. Physical Review Applied, 2017, **8**, 044016 - 1--17

[2] N Inogamov, V Zhakhovsky, V Khokhlov, *Warm dense matter in extremely small volume-hydrodynamics of nanofilms triggered by laser irradiation at diffraction limit*, the paper will be published as the *20th Biennial APS Conference on Shock Compression of Condensed Matter (SCCM17)* by AIP Publishing. (open access). Work was presented at: The 20th Biennial International Conference of the APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter (SCCM-2017), St. Louis at the Arch, July 9-14, 2017. Abstract F9.00039, see Bulletin of the American Physical Society, 2017.

[3] (open access) 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. (2017) **1793**, 070012; doi: 10.1063/1.4971600

[4] (open access) V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, D. K. Ilnitsky, K. P. Migdal, and V. V. Shepelev, *Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation*, AIP Conf. Proc. (2017) **1793**, 100038; doi: 10.1063/1.4971663

[5] Yoshiki Kohmura, Vasily Zhakhovsky, Dai Takei, Yoshio Suzuki, Akihisa Takeuchi, Ichiro Inoue, Yuichi Inubushi, Nail Inogamov, Tetsuya Ishikawa, Makina Yabashi, *Nano-structuring of multi-layer material by single X-ray vortex pulse with femtosecond duration*, Appl. Phys. Lett.,

Yoshiki Kohmura, Vasily Zhakhovsky, Dai Takei, Yoshio Suzuki, Akihisa Takeuchi, Ichiro Inoue, Yuichi Inubushi, Nail Inogamov, Tetsuya Ishikawa, Makina Yabashi, *Supplementary material for the document entitled: Nano-structuring of multi-layer material by single x-ray vortex pulse with femtosecond duration*, Appl. Phys. Lett. (sent to journal).

[6] Inogamov, N. A., Zhakhovsky, V. V. *Simulations of Short Pulse Laser-Matter Interaction in Case of Tight Focusing onto Thin Film*, Lobachevskii Journal of Mathematics, (2017), **38**, No. 5, 914—920. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, *SIMULATIONS OF SHORT PULSE LASER-MATTER INTERACTION*, arXiv:1701.04576v1 [physics.optics] (2017).

[7] Анисимов, С. И.; Жаховский, В. В.; Иногамов, Н. А.; Мурзов, С. А., Хохлов, В. А. *О формировании и кристаллизации жидкой струи, возникающей при воздействии на пленку остросфокусированным лазерным пучком*, Квантовая Электроника, (2017), **47**(6), 509-521

[8] (accepted) Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. (Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V.; Khokhlov, V. A. *Laser ablation caused by geometrically constrained illumination and inventive target design*, J. Phys.: Conf. Ser., (2017 г.) (open access)

[9] B. Albertazzi, N. Ozaki, V. Zhakhovsky, A. Faenov, H. Habara, M. Harmand, N. Hartley, D. Ilnitsky, N. Inogamov, Y. Inubushi, T. Ishikawa, T. Katayama, T. Koyama, M. Koenig, A. Krygier, T. Matsuoka, S. Matsuyama, E. McBride, K. P. Migdal, G. Morard, H. Ohashi, T. Okuchi, T. Pikuz, N. Purevjav, O. Sakata, Y. Sano, T. Sato, T. Sekine, Y. Seto, K. Takahashi, K. Tanaka, Y. Tange, T. Togashi, K. Tono, Y. Umeda, T. Vinci, M. Yabashi, T. Yabuuchi, K. Yamauchi, H. Yumoto, R. Kodama, *Dynamic fracture of tantalum under extreme tensile stress*, Sci. Adv. (2017) **3**, e1602705.

[10] S.A. Dyachkov, S.A. Medin, M.S. Egorova, V.V. Zhakhovsky, A.N. Parshikov, *Boron carbide: SPH simulation of shock-wave experiments with the JHB-based failure model*, 2017 Submitted to Journal of Applied Physics

[11] S.A. Dyachkov, A.N. Parshikov, V.V. Zhakhovsky, *SPH simulation of boron carbide under shock compression with different failure models*, Journal of Physics: Conference Series (2017) v. **815**, 012012

[12] (принята в печать) М.С.Егорова, С.А.Мурзов, В.В.Жаховский, А.Н.Паршиков, *Прохождение ударной волны через взвесь металлических частиц в жидкости*, Физико-химическая кинетика в газовой динамике (2017 г.)

[13] (принята в печать) Miroshnichenko, A. E., Tribelsky, M. I., *The ultimate absorption in light scattering by a finite obstacle*, Physical Review Letters,

Miroshnichenko, A. E., Tribelsky, M. I., *The ultimate absorption in light scattering by a finite obstacle*, *Supplemental Material*, Physical Review Letters, (2017 г.)

[14] (направлена в журнал) S.E. Svyakhovskiy, V.V. Ternovski, and M.I. Tribelsky, *Transient effects in resonant light scattering by particles: Anapole as a storage for "frozen light"?* Physical Review Letters

[15] (принята в печать) Inogamov, N.; Zhakhovsky, V. & Khokhlov, V., *Laser Ablation of Metal into Liquid: near Critical Point Phenomena and Hydrodynamic Instability*, Conference Proceedings of the 20th Biennial Conference of the APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter. Bulletin of the American Physical Society (2018 г.)

[16] N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovsky, K.V. Khishchenko, and S.I. Anisimov, *Ablation of gold into water*, Matter and Radiation at Extremes (sent to journal).

Дополнительная литература

- [1-доп] (open access) A. A. Kuchmizhak et al., *Plasmon-mediated Enhancement of Rhodamine 6G Spontaneous Emission on Laser-spalled Nanotextures*, Physics Procedia (December 2017) **86**:66-71
- [2-доп] (open access) Inogamov et al. *Solitary Nanostructures Produced by Ultrashort Laser Pulse*, Nanoscale Research Letters (2016) **11**:177. DOI 10.1186/s11671-016-1381-1
- [3-доп] (open access) Urs Zywiets et al., *Laser printing of silicon nanoparticles with resonant optical electric and magnetic responses*, NATURE COMMUNICATIONS (2014) | 5:3402 | DOI: 10.1038/ncomms4402
- [4-доп] V. Sametoglu et al., *Production of 70-nm cr dots by laser-induced forward transfer*, Optics Express (2013) **21**, 18525-31.
- [5-доп] R. Pohl et al., *Imaging of the Ejection Process of Nanosecond Laser-induced forward Transfer of Gold*, JLMN-Journal of Laser Micro/Nanoengineering (2015) Vol. **10**, No. 2
- [6-доп] M. Zenou, A. Sa'Ar, and Z. Kotler, *Laser jetting of femto-liter metal droplets for high resolution 3D printed structures*, Scientific Reports (2015) **5**, 17265.
- [7-доп] C.W. Visser et al., *Toward 3d printing of pure metals by laser-induced forward transfer*, Advanced Materials (2015) **27**, 4087-4092.
- [8-доп] (open access) Qingfeng Li et al., *Generating liquid nanojets from copper by dual laser irradiation for ultra-high resolution printing*, Optics Express (October 2017) **25**, No. 20, 24164-72.
- [9-доп] Qingfeng Li et al., *Laser-induced nano-jetting behaviors of liquid metals*, Applied Physics A (October 2017) **123** (11), 718. DOI10.1007/s00339-017-1308-4 2017.
- [10-доп] (open access) J.P. Padilla-Martinez et al., *Controllable direction of liquid jets generated by thermocavitation within a droplet*, Applied Optics (September 2017) Vol. **56**, No. 25, 7167-7173.
- [11-доп] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, S.I. Ashitkov, Yu.V. Petrov, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, K. Nishihara, V.E. Fortov, J. Experim. Theor. Phys. (JETP) (2008) **107**, No. 1, pp. 1-19.
- [12-доп] B.J. Demaske, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, I.I. Oleynik, Phys. Rev. B (2010) **82**, 064113.
- [13-доп] G.E. Norman, S.V. Starikov, and V.V. Stegailov, J. Experim. Theor. Phys. (JETP) (2012) **114**, No. 5, pp. 792-800.
- [14-доп] Ishikawa, T. et al., *A compact X-ray free-electron laser emitting in the sub-angstrom region*, Nat. Photon. (2012) **6**, 540-544.
- [15-доп] Kretschmann, E.; Raether, H. *Radiative Decay of Non Radiative Surface Plasmons Excited by Light*, Z. Naturforsch. (1968) **23a**, 2135–2136.
- [16-доп] V.V. Temnov, *Ultrafast acousto-magneto-plasmonics*, Nat. Phot. (2012) Vol. 6, 728-736. DOI: 10.1038/NPHOTON.2012.220
- [17-доп] Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, K.V. Khishchenko, and S.I. Anisimov, *Reflectance of thin silver film on the glass substrate at the interaction with femtosecond laser pulses*, J. Phys.: Conf. Ser. (2016) **774**, 012099. doi:10.1088/1742-6596/774/1/012099
- [18-доп] A.K. Upadhyay, N.A. Inogamov, B. Rethfeld, H.M. Urbassek, *Ablation by ultrashort laser pulses: Atomistic and thermodynamic analysis of the processes at the ablation threshold*, Phys. Rev. B (2008) **78**, 045437 [10 pages].
- [19-доп] 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. (2012) v. **95**(4), 176-181.

[20-доп] A.A. Kuchmizhak, A.A. Ionin, S.I. Kudryashov, S.V. Makarov, A.A. Rudenko, Yu.N. Kulchin, O.B. Vitrik, and T.V. Efimov, Flash-imprinting of intense femtosecond surface plasmons for advanced nanoantenna fabrication, *Opt. Lett.* (2015) Vol. 40, No. 8, 1687-1690.

[21-доп] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, and V.A. Khokhlov, *Jet Formation in Spallation of Metal Film from Substrate under Action of Femtosecond Laser Pulse*, *Journal of Experimental and Theoretical Physics (JETP)* (2015) **120**(1), 15-48.

[22-доп] M.S. Egorova, S.A. Dyachkov, A.N. Parshikov, V.V. Zhakhovsky, *Parallel SPH modeling using dynamic domain decomposition and load balancing displacement of Voronoi subdomains*, Preprint submitted to *Journal of Computational Physics*, October 2017.

[23-доп] Dyachkov, S.A.; Egorova, M.S.; Murzov, S.A.; Parshikov, A.N.; Zhakhovsky V.V., *Auto-balancing algorithm for parallel SPH simulation of materials in extremes*, *Lobachevskii Journal of Mathematics* (September 2017), Vol. **38**, Issue: 5 Pages: 893-897. DOI: 10.1134/s1995080217050092

[24-доп] M.S. Egorova, S.A. Dyachkov, A.N. Parshikov, V.V. Zhakhovsky, *Parallel SPH modeling using dynamic domain decomposition and load balancing displacement of Voronoi subdomains*, *Computer Physics Communication* (in preparation)

[25-доп] (open access) J. Xiao, P. Liu, C.X. Wang, G.W. Yang, *External field-assisted laser ablation in liquid: An efficient strategy for nanocrystal synthesis and nanostructure assembly*, *Progress in Materials Science* (2017) v. **87**, 140-220. <http://dx.doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.02.004>

[26-доп] V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, S.I. Ashitkov, K. Nishihara, *Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials*, *Appl. Surf. Sci.* (2009) v. **255**(24), 9592-9596.

[27-доп] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, *Laser-induced spalling of thin metal film from silica substrate followed by inflation of microbump*, *Applied Physics A: Material Science and Processing* (2016) v. **122**, 432 (9 pages). DOI 10.1007/s00339-016-9942-9

Все планируемые на год работы выполнены полностью:

да

1.4. Сведения о достигнутых конкретных научных результатах в отчетном году

(до 5 стр.)

A1. (Это пункт 1 в разделе А плана) Выполнена большая работа совместно с группой экспериментаторов из (i) австралийских центров микрофотоники и нанофабрикации, (ii) группы дальневосточных научных организаций и (iii) ФИАНа, ИТМО Спб. при теоретических и численных исследованиях по гранту сотрудников ВНИИА им. Н.Л. Духова и нашего Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау, головного по проекту. В работе [1.7-3] (публикация 3 в списке публикаций за год по результатам проекта, приложенных к отчету (имеются pdf), пункт 1.7), нацеленной на управляемое создание оптимальных поверхностных структур субволновых размеров с искусственно созданной нужной диэлектрической проницаемостью, проделано крупномасштабное численное моделирование. Моделированием

показано, что сверхбыстрое (длительность импульса 230 фс) выделение лазерной энергии в пленках металлов индуцирует быстрое плавление и движение расплава, влекущее сложное перераспределение вещества пленки на наномасштабах, сохраняющееся после рекристаллизации горячего расплава. Плавление-переток-кристаллизация формируют морфологию структур на рис. 1 в [1.7-3] и приложенном п. 1.6 файле. Морфологические нанохарактеристики структур (диаметр, кривизна купола, застывшая струя в вершине, капля на струе и др.) сильно влияют на оптический отклик при плазмонном зондировании. Это позволяет применять полученные массивы структур в нелинейных оптических приложениях [1-доп]. При моделировании учитывались все физические процессы, связанные с поглощением лазерной энергии, электрон-ионным энергетическим обменом, акустической релаксацией и гидродинамическим движением [1.7-3]. Был применен комбинированный теоретический подход, основанный на разделении относительно медленного гидродинамического движения пленки и быстрых физических процессов, определяющих сепарацию пленки от подложки. Мы сочетали двухтемпературные расчеты (на ранней стадии электроны намного горячее ионов), молекулярно-динамическое моделирование и полуаналитическую модель тонких оболочек.

Проведен всесторонний анализ влияния толщины пленки на динамику при лазерном воздействии различной длительности от десятков фемтосекунд до субнаносекундного диапазона [1.7-5]. Решение этой проблемы существенно для технологий лазерного переноса вещества (LIFT/LIBT – laser induced forward/backward transfer, лазерная печать). Имеется пространственный масштаб, равный глубине прогрева лазером. В тонких пленках толщина мала по сравнению с этим масштабом. Наоборот, толщина толстой пленки существенно его превосходит. В работах по гранту РФФИ [1.7-3,10,19] детально изучена динамика тонких металлических пленок, однородно прогреваемых лазерным импульсом, как свободно висящих и испытывающих незатухающие акустические колебания при малых поглощенных флюенсах, так и пленок на подложке, в которых эти колебания затухают из-за возбуждения звуковых волн в подложке, и испытывающих отрыв части пленки при повышении флюенса. В работе [1.7-5] подробно рассмотрены явления, происходящие при воздействии на толстую пленку. Анализ этих явлений позволяет понять, что происходит в опытах [7-доп – 9-доп], в которых авторы приводят только данные экспериментов и качественные рассуждения.

A2. В рамках работы над проектом выполнена работа по моделированию воздействия рентгеновского оптического вихря на многослойную мишень [1.7-11+12]. Понято явление формирования центрального заострения в окрестности центра, где интенсивность воздействия близка к нулю [1.7-11+12]. До этой работы воздействие световыми вихрями изучалось только с применением лазеров инфракрасного и оптического диапазонов. Работа выполнялась совместно с экспериментаторами из Японии [1.7-11]. В ней лазерный фемтосекундный импульс жесткого (7.71 кэВ) рентгена излучался из XFEL – x-ray free electron laser SACLA [14-доп]. Рассматривались как однослойные, так и многослойные мишени. В

многослойном случае крупномасштабное численное моделирование было проведено для пяти чередующихся слоев золота и хрома, напыленных на кремниевую подложку. Воздействие импульса с распределением интенсивности оптического вихря приводит к формированию тороидальной оболочки из расплавленных металлов. Решающим (для формирования заострения в центре) оказывается действие капиллярного натяжения во внутреннем кольце тороида. Оно приводит к стягиванию внутреннего кольца к оси, превращению его в трубку и сжатию трубки в центральную колонкообразную затвердевшую структуру [1.7-11+12].

В работах [1.7-2,6,8] по проекту было изучено формирование чрезвычайно острых игл при фокусировке в ограниченное дифракцией малое пятно на пленке. Иглы имеют радиус скругления в вершине в единицы нанометров. Такие иглы могут применяться, например, как концентраторы электрического поля на вершине. Найдено, что в окрестности заострения возникают необычные кристаллические формы с 5-кратной симметрией (икосаэдр) [1.7-2,6].

А3. Гидродинамическое и молекулярно-динамическое моделирование поведения пленок металла под действием фемтосекундных лазерных импульсов в зависимости от поглощенного флюенса применено для исследования задач со сложным электромагнитным (ЭМ) полем, решаемых совместно с решением задачи о теплофизическом и динамическом отклике мишени на воздействие лазерного импульса, где рассматриваются двухтемпературные явления (электроны горячее ионов, выравнивание температур), плавление, испарение, рекристаллизация, динамика перетока вещества мишени с учетом инерции, капиллярных сил и давления паров. В разделе А3 сложное поле создается за счет интерференции плазмон-поляритонной (ППР) моды и падающей ЭМ волны. Проблема является весьма актуальной для современной плазмоники при создании периодических структур на поверхности металла. Нами рассмотрено в одном варианте образование периодических структур вследствие выделения энергии от интерференции лазерного излучения на поверхности пленки и поверхностной плазмон-поляритонной моды в ней в геометрии Кречмана. В другом варианте периодическая гофрировка поверхности металла создается тем, что лазерный импульс воздействует на уединенную структуру на металлической пленке (эта структура создается предварительно острогофокусированным импульсом на пленке). Гофрировка возникает из-за интерференции поверхностной плазмонной волны от уединенной структуры с полем лазерного излучения. Проведено моделирование, которое определяет длину волны плазмонной моды (около 400 нм) и глубину модуляции максимум/минимум стоячей волны (десятки процентов). Эти данные похожи на те, которые соответствуют первому варианту. Выполнено теплофизическое/гидродинамическое моделирование с помощью метода тонких пленок (см. [21-доп]) и крупномасштабной молекулярной динамики (МД). В деталях промоделировано развитие гофрировки на стадии капиллярного торможения пленки и ее рекристаллизации. Ранее ни метод тонких пленок, ни МД не применялись для задач с периодической гофрировкой.

А4. За отчетный год в приближении тонкой пленки создана программа [21-доп] для решения задач с наносекундными лазерными импульсами. В версии [21-доп] учитывались инерция пленки и поверхностное натяжение. Теперь добавлена, во-первых, теплопроводность, учитывающая растекание тепла по пленке. В настоящий момент в программе с теплопроводностью (ПТ-блок) не учитывается изменение формы пленки при движении. Тепло растекается по плоской двумерной пленке; потерями на испарение и отводом тепла в подложку пренебрегаем, это справедливо в случае подложек с низкими значениями коэффициента теплопроводности. ПТ-блок нужен нам для оценки темпа остывания пленки. Во-вторых, учтена зависимость давления насыщенного пара металла пленки от температуры. На каждом временном шаге берем из ПТ-блока наибольшую температуру по пленке – в вершине нанобампа – и находим по этой температуре давление насыщенного пара под куполом нанобампа. Проведена серия вычислений в таком приближении. Показано, что пленка отделяется от подложки за счет давления насыщенного пара. Первоначально паровая прослойка возникает в области контакта между пленкой и подложкой. Далее пар ускоряет пленку, и на ней образуется купол. Картина оказывается схожей со случаем ультракоротких импульсов, когда отделение пленки и ее полет по инерции связаны с короткой стадией механического отталкивания пленки от подложки. Далее пленка при наносекундном воздействии постепенно остывает из-за теплоотвода на периферию, давление пара, из-за которого растет купол, сильно падает и становится динамически несущественным. На первый план выходит капиллярное торможение.

[В]. Исследована 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). Результаты опубликованы в статье [1.7-1]. Выполнен важный цикл исследований в области лазерной генерации ударных волн вместе с исследованиями по распространению УВ [1.7-4,13,16]. Очень интересные результаты получены в работах [1.7-4,16]. Они относятся к моделированию распространения УВ в прочных керамиках наподобие карбида бора и др. Показано, что методика SPH (Smooth Particle Hydrodynamics) в нашей многопроцессорной реализации позволяет с высокой точностью описывать многоэтапный процесс разрушения керамики. Результаты хорошо согласуются с измерениями, а также с одномерными численными расчетами. Но в отличие от таких расчетов, мы видим внутреннюю структуру волн разрушения (см. рис. В.1). В работе [1.7-13] проанализировано прохождение сильной ударной волны через взвесь жидкости и сферических металлических частиц. Показано, что ударная волна деформирует частицы и увлекает их в направлении своего движения.

Вопрос о многослойных зеркалах изучен в выполненной в рамках данного проекта РФФ работе [1.7-11+12].

В соответствии с планом начато решение трудной задачи о моделировании диспергирования капель олова с добавкой иридия. Это практически важная и теоретически сложная задача. За отчетный период подготовлены SPH-программы для ее решения. Начато численное моделирование. Используется разработанная нами мощная многопроцессорная версия SPH-кода [22-доп,23-доп,24-доп]. Это позволило на высокопроизводительных кластерах доводить число SPH частиц до миллиарда. С таким числом частиц можно описывать в деталях сложные трехмерные процессы. Проблемы связаны именно с геометрической сложностью задачи. Скин-слой жидкой оловянной капли, подаваемой из дозатора, составляет около 20 нм. Зона прогрева после воздействия ультракороткого импульса на каплю имеет толщину около 100 нм, когда волна сжатия покидает слой прогрева. При этом радиус капли - 50 мкм – на три порядка превышает толщину волны сжатия. Чтобы решать такую задачу «насквозь», полагая с самого начала хотя бы 10 SPH-частиц на слой, необходимо 1000 миллиардов частиц – $(10^4)^3$. Из-за поляризации излучения лазерного импульса, дробящего каплю на мельчайшие фрагменты, имеются заметные 3D эффекты. Чтобы обойти эти проблемы, используется осесимметричное приближение. Расчет ведется поэтапно. С мелкими частицами проходим стадию начального лазерного энерговклада и достижения треугольной ударной волной (УВ, волна сжатия, быстро трансформируется в такую УВ) продвижения вглубь сферической капли на 4 мкм (этап 1). Затем финальные данные этапа 1 огрубляются и используются уже как начальные данные этапа 2. В таком осесимметричном приближении выполнены предварительные расчеты моделирования абляции капли олова. Уточнена программа одномерных двухтемпературных гидродинамических вычислений (1D-2T-HD). Создана программа построения рентгеновских изображений. Она позволяет строить изображения на ПЗС матрице интерферограмм, картины с кольцами Ньютона.

Работа по пункту [С] тесно связана с подготовкой кода 1D-2T-HD, который учитывает наши последние данные по электронному вкладу, и с программами построения рентгеновских изображений, см. предыдущий раздел. Электронный вклад в теплоемкость и давление находится с помощью квантово-механических вычислений состояний двухтемпературной конденсированной среды, возникающих при воздействии ультракороткого лазерного импульса. Для вычислений нами применяются DFT (Density Functional Theory) коды VASP, Elk и др.

[D] В рамках гранта РФФИ выполнены и приняты в печать в PRL работы [1.7-14+15,17] о взаимодействии поляризованного света с малыми частицами. Аккуратное решение проблемы о взаимодействии света с частицами состоит из двух одинаково важных частей. Во-первых, необходимо вычислить сечение взаимодействия, поскольку оно определяет величину поглощенной энергии и ее распределение по частице. Работа [1.7-14] как раз посвящена исследованию поглощения излучения различной мультипольности малыми частицами в зависимости от их размеров, формы и

комплексной диэлектрической проницаемости материала частицы. Во-вторых, требуется промоделировать теплофизический и гидродинамический отклик частицы на лазерное воздействие. Результаты работ по первой части проблемы, выполненные за 2017 год в рамках гранта РФФИ 14-19-01599, представлены в статьях (выполнены и приняты в печать в PRL работы [1.7-14+15,176]). Параллельно в течение года строилось решение второй части проблемы ([E]). Оно описано выше в разделе В.

[F] Важнейшим является вопрос о механизмах формирования наночастиц при лазерной абляции металлической мишени в жидкость. Лазерный метод получения чистых (по сравнению с химическими методами) кристаллических наночастиц (НЧ) востребован в технологиях. Рассмотрена задача об абляции золота в воду и проделана большая работа по определению межмолекулярных и межатомных потенциалов в этой смеси. Работа ведется, начиная с 2015 г., и состоит из ряда этапов. На первых этапах был разработан межатомный потенциал воды. На этапе 2017 года этот потенциал был усовершенствован для конкретных расчетов абляции золота в воду. Добавлен потенциал взаимодействия золото-вода отталкивательного характера, поскольку поверхностное натяжение золота намного превышает поверхностное натяжение воды. Потенциал золото-золото был создан в нашей группе и опубликован в статье Жаховского и др. 2009 года [26-доп]. ЕАМ потенциал Au [26-доп] апробирован в наших предыдущих работах, а также применяется другими авторами в их собственных вычислениях.

С указанными потенциалами выполнены расчеты абляции золото/вода с помощью крупномасштабной молекулярной динамики (МД) в комбинации с описанием механизма теплопроводности с помощью блока Монте-Карло (МК). Результаты моделирования описаны в двух статьях [1.7-6,9]. Одна статья принята для публикации [1.7-6], другая [1.7-9] направлена в журнал Matter and Radiation at Extremes - Journal - Elsevier. Результаты МД-МК подхода дополнены расчетами с помощью двухтемпературного гидродинамического (2Т-ГД) кода [1.7-6,9], где применяются двухтемпературная физика, широкодиапазонное уравнение состояния золота и аппроксимация адиабаты воды. С помощью проведенных расчетов показано, как отрываются и попадают в жидкость НЧ, как они оказываются внутри парового (пары жидкости) пузырька.

[G] За отчетный период удалось создать потенциалы межатомного взаимодействия олова с существенно разными значениями коэффициента поверхностного натяжения. Они требуются для скейлинга требований к объему молекулярно-динамических (МД) вычислений в сторону снижения этих требований. Эквивалентный в смысле теории подобия по отношению к капиллярному числу размер частицы в МД получается меньше, чем в эксперименте, если для моделирования применить межчастичный потенциал, дающий уменьшенный коэффициент поверхностного натяжения. Причем в 3D геометрии уменьшение

размера входит в кубе. За счет этого обеспечивается выигрыш в параметрах расчета. Для исследования влияния поверхностного натяжения на кавитацию и фрагментацию мы разработали два межатомных потенциала для жидкого олова, которые имеют разные поверхностные натяжения. Олово, моделируемое с использованием потенциала EAM1, имеет поверхностное натяжение 0.59 J/m^2 , что очень близко к экспериментальной величине 0.525 J/m^2 . Олово EAM2 имеет поверхностное натяжение 0.133 J/m^2 , что почти в 4 раза меньше. Вследствие слегка более высокого теплового расширения олово EAM2 имеет слегка меньшую плотность жидкости в точке плавления. Несмотря на то, что потенциалы имеют разные поверхностные свойства, их парные, зарядовые функции, энергии погружения различны – тем не менее, они демонстрируют идентичную реакцию на деформацию. Такая механическая идентичность EAM1 и EAM2 не удивительна, так как она закладывалась в процедуру подгонки. Это позволяет наблюдать различия в процессе фрагментации при одинаковых размерах, ударных нагрузках и волнах растяжения.

Дополнительная литература

[1-доп] (open access) A. A. Kuchmizhak et al., Plasmon-mediated Enhancement of Rhodamine 6G Spontaneous Emission on Laser-spalled Nanotextures, *Physics Procedia* (December 2017) 86:66-71

[2-доп] (open access) Inogamov et al. Solitary Nanostructures Produced by Ultrashort Laser Pulse, *Nanoscale Research Letters* (2016) 11:177. DOI 10.1186/s11671-016-1381-1

[3-доп] (open access) Urs Zywietz et al., Laser printing of silicon nanoparticles with resonant optical electric and magnetic responses, *NATURE COMMUNICATIONS* (2014) | 5:3402 | DOI: 10.1038/ncomms4402

[4-доп] V. Sametoglu et al., Production of 70-nm cr dots by laser-induced forward transfer, *Optics Express* (2013) 21, 18525-31.

[5-доп] R. Pohl et al., Imaging of the Ejection Process of Nanosecond Laser-induced forward Transfer of Gold, *JLMN-Journal of Laser Micro/Nanoengineering* (2015) Vol. 10, No. 2

[6-доп] M. Zenou, A. Sa'Ar, and Z. Kotler, Laser jetting of femto-liter metal droplets for high resolution 3D printed structures, *Scientific Reports* (2015) 5, 17265.

[7-доп] C.W. Visser et al., Toward 3d printing of pure metals by laser-induced forward transfer, *Advanced Materials* (2015) 27, 4087-4092.

[8-доп] (open access) Qingfeng Li et al., Generating liquid nanojets from copper by dual laser irradiation for ultra-high resolution printing, *Optics Express* (October 2017) 25, No. 20, 24164-72.

- [9-доп] Qingfeng Li et al., Laser-induced nano-jetting behaviors of liquid metals , Applied Physics A (October 2017) 123 (11), 718. DOI10.1007/s00339-017-1308-4 2017.
- [10-доп] (open access) J.P. Padilla-Martinez et al., Controllable direction of liquid jets generated by thermocavitation within a droplet, Applied Optics (September 2017) Vol. 56, No. 25, 7167-7173.
- [11-доп] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, S.I. Ashitkov, Yu.V. Petrov, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, K. Nishihara, V.E. Fortov, J. Experim. Theor. Phys. (JETP) (2008) 107, No. 1, pp. 1-19.
- [12-доп] B.J. Demaske, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, I.I. Oleynik, Phys. Rev. B (2010) 82, 064113.
- [13-доп] G.E. Norman, S.V. Starikov, and V.V. Stegailov, J. Experim. Theor. Phys. (JETP) (2012) 114, No. 5, pp. 792-800.
- [14-доп] Ishikawa, T. et al., A compact X-ray free-electron laser emitting in the sub-angstrom region, Nat. Photon. (2012) 6, 540-544.
- [15-доп] Kretschmann, E.; Raether, H. Radiative Decay of Non Radiative Surface Plasmons Excited by Light, Z. Naturforsch. (1968) 23a, 2135–2136.
- [16-доп] V.V. Temnov, Ultrafast acousto-magneto-plasmonics, Nat. Phot. (2012) Vol. 6, 728-736. DOI: 10.1038/NPHOTON.2012.220
- [17-доп] Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, K.V. Khishchenko, and S.I. Anisimov, Reflectance of thin silver film on the glass substrate at the interaction with femtosecond laser pulses, J. Phys.: Conf. Ser. (2016) 774, 012099. doi:10.1088/1742-6596/774/1/012099
- [18-доп] A.K. Upadhyay, N.A. Inogamov, B. Rethfeld, H.M. Urbassek, Ablation by ultrashort laser pulses: Atomistic and thermodynamic analysis of the processes at the ablation threshold, Phys. Rev. B (2008) 78, 045437 [10 pages].
- [19-доп] 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. (2012) v. 95(4), 176-181.
- [20-доп] A.A. Kuchmizhak, A.A. Ionin, S.I. Kudryashov, S.V. Makarov, A.A. Rudenko, Yu.N. Kulchin, O.B. Vitrik, and T.V. Efimov, Flash-imprinting of intense femtosecond surface plasmons for advanced nanoantenna fabrication, Opt. Lett. (2015) Vol. 40, No. 8, 1687-1690.
- [21-доп] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, and V.A. Khokhlov, Jet Formation in Spallation of Metal Film from Substrate under Action of Femtosecond Laser Pulse, Journal of Experimental and Theoretical Physics (JETP) (2015) 120(1), 15-48.

[22-доп] M.S. Egorova, S.A. Dyachkov, A.N. Parshikov, V.V. Zhakhovsky, Parallel SPH modeling using dynamic domain decomposition and load balancing displacement of Voronoi subdomains, Preprint submitted to Journal of Computational Physics, October 2017.

[23-доп] Dyachkov, S.A.; Egorova, M.S.; Murzov, S.A.; Parshikov, A.N.; Zhakhovsky V.V., Auto-balancing algorithm for parallel SPH simulation of materials in extremes, Lobachevskii Journal of Mathematics (September 2017), Vol. 38, Issue: 5 Pages: 893-897. DOI: 10.1134/s1995080217050092

[24-доп] M.S. Egorova, S.A. Dyachkov, A.N. Parshikov, V.V. Zhakhovsky, Parallel SPH modeling using dynamic domain decomposition and load balancing displacement of Voronoi subdomains, Computer Physics Communication (in preparation)

[25-доп] (open access) J. Xiao, P. Liu, C.X. Wang, G.W. Yang, External field-assisted laser ablation in liquid: An efficient strategy for nanocrystal synthesis and nanostructure assembly, Progress in Materials Science (2017) v. 87, 140-220.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.02.004>

[26-доп] V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, S.I. Ashitkov, K. Nishihara, Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials, Appl. Surf. Sci. (2009) v. 255(24), 9592-9596.

[27-доп] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, Laser-induced spalling of thin metal film from silica substrate followed by inflation of microbump, Applied Physics A: Material Science and Processing (2016) v. 122, 432 (9 pages). DOI 10.1007/s00339-016-9942-9

Все запланированные в отчетном году научные результаты достигнуты:
да

1.5. Описание выполненных в отчетном году работи полученных научных результатов для публикации на сайте РФФ

на русском языке (до 3 страниц текста, также указываются ссылки на информационные ресурсы в сети Интернет (url-адреса), посвященные проекту)

A1. Совместно с группой экспериментаторов из (i) австралийских центров микрофотоники и нанофабрикации, (ii) ряда дальневосточных научных организаций и (iii) ФИАНа, ИТМО СПб. при теоретических и численных исследованиях сотрудников ВНИИА им. Н.Л. Духова и головного по проекту Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау выполнена большая работа, нацеленная на управляемое создание оптимальных поверхностных структур субволновых размеров с искусственно созданной нужной диэлектрической проницаемостью. Крупномасштабное численным моделированием показано, что сверхбыстрое (длительность импульса 230 фс)

выделение лазерной энергии в пленках металлов индуцирует быстрое плавление и движение расплава, в результате после рекристаллизации происходит сложное перераспределение вещества пленки на наномасштабах. Плавление-переток-кристаллизация формируют морфологию наноструктур. Морфологические нанохарактеристики структур (диаметр, кривизна купола, застывшая струя в вершине, капля на струе и др.) сильно влияют на оптический отклик при плазмонном зондировании. Это позволяет применять полученные массивы структур в нелинейных оптических приложениях. При моделировании применен комбинированный теоретический подход, основанный на разделении относительно медленного гидродинамического движения пленки и быстрых физических процессов, определяющих сепарацию пленки от подложки, учитывались все физические процессы, связанные с поглощением лазерной энергии, электрон-ионным энергетическим обменом, акустической релаксацией и гидродинамическим движением.

Проведен всесторонний анализ влияния толщины пленки на динамику при лазерном воздействии различной длительности от десятков фемтосекунд до субнаносекундного диапазона. Решение этой проблемы существенно для технологий лазерного переноса вещества (LIFT/LIBT – laser induced forward/ backward transfer, лазерная печать). Тонкими являются пленки, толщина которых мала по сравнению с глубиной прогрева лазером. Детально изучена динамика тонких металлических пленок, однородно прогреваемых лазерным импульсом, как свободно висящих и испытывающих незатухающие акустические колебания при малых поглощенных флюенсах, так и пленок на подложке, в которых эти колебания затухают из-за возбуждения звуковых волн в подложке. Исследована динамика отрыва части пленки при повышении флюенса как для тонких пленок, так и для толстых пленок с толщиной, большей глубины прогрева.

A2. Выполнена работа по моделированию воздействия рентгеновского оптического вихря на многослойную мишень. Понято явление формирования центрального заострения в окрестности центра вихря, где интенсивность воздействия близка к нулю. До этой изучалось только воздействие световыми вихрями инфракрасного и оптического диапазонов. В работе, выполненной совместно с экспериментаторами из Японии, лазерный фемтосекундный импульс жесткого (7.71 кэВ) рентгена излучался из XFEL – x-ray free electron laser SACLA (Япония). Рассматривались как однослойные, так и многослойные мишени. В многослойном случае крупномасштабное численное моделирование было проведено для пяти чередующихся слоев золота и хрома, напыленных на кремниевую подложку. Воздействие вихревого импульса с приводит к формированию тороидальной оболочки из расплава металлов. Капиллярное натяжение во внутреннем кольце тороида приводит к стягиванию внутреннего кольца к оси, превращению его в трубку и сжатие трубки в центральную колонкообразную затвердевшую структуру.

Изучено формирование чрезвычайно острых игл при фокусировке лазерного пучка в ограниченное дифракцией малое пятно на пленке. Иглы имеют радиус скругления в вершине в единицы нанометров. Такие иглы могут применяться, например, как концентраторы электрического поля на своей вершине. Найдено, что в окрестности заострения возникают необычные кристаллические формы с 5-кратной симметрией (икосаэдр).

A3. Изучена актуальная для современной плазмоники проблема создания периодических структур на поверхности металла. Рассмотрено в одном варианте образование периодических структур вследствие выделения энергии от интерференции лазерного излучения на поверхности пленки и поверхностной плазмон-поляритонной моды в ней в геометрии Кречмана. В другом варианте

периодическая гофрировка поверхности металла создается тем, что лазерный импульс воздействует на уединенную структуру на металлической пленке (эта структура создается предварительно острогофокусированным импульсом на пленке). Гофрировка возникает из-за интерференции поверхностной плазмонной волны от уединенной структуры с полем лазерного излучения. Проведено моделирование, которое определяет длину волны плазмонной моды (около 400 нм) и глубину модуляции максимум/минимум стоячей волны (десятки процентов). Выполнено гидродинамическое моделирование с помощью метода тонких пленок и крупномасштабная молекулярная динамика. В деталях промоделировано развитие гофрировки на стадии капиллярного торможения пленки и ее рекристаллизации. Ранее ни метод тонких пленок, ни МД не применялись для задач с периодической гофрировкой.

A4. Расчеты воздействия длинных (нс) импульсов.

В приближении тонкой пленки разработана программа для решения задач с длинными (наносекундными) лазерными импульсами. В программе, кроме инерции пленки и поверхностного натяжения, учтена теплопроводность, нужная для оценки темпа остывания пленки. Учтена зависимость давления насыщенного пара металла пленки от температуры. В серии вычислений в таком приближении показано, что пленка отделяется от подложки за счет давления насыщенного пара. Первоначально паровая прослойка возникает в области контакта между пленкой и подложкой. Далее пар ускоряет пленку, и на ней образуется купол. Картина оказывается схожей со случаем ультракоротких импульсов, когда отделение пленки и ее полет по инерции связаны с короткой стадией механического отталкивания пленки от подложки. При наносекундном воздействии пленка далее постепенно остывает из-за теплоотвода на периферию, падающее давление пара, из-за которого растет купол, становится динамически несущественным, на первый план выходит капиллярное торможение.

[B]. Исследована задача о последствиях воздействия субнаносекундного (600 пс) оптического лазерного импульса на пленку тантала и диагностики результатов воздействия с помощью ультракороткого (единицы фс) жесткого (10-20 кэВ) импульса лазера на свободных электронах. Показано, что совместное действие мощного оптического лазерного импульса (pump-импульса) и фемтосекундного импульса рентгеновского зондирующего излучения (probe-импульс), позволяет обнаруживать динамику разрушения кристаллической решетки в пленке тантала при сверхвысокой скорости деформации $\sim 2 \times 10^8 - 3.5 \times 10^8$ 1/с. Использование метода рентгеновской дифракции в реальном времени, открывает путь к исследованию структуры вещества под напряжением и динамического разрушения материалов на атомном уровне. Используя этот метод, было непосредственно измерено максимальное снижение плотности от 8 до 10%, ассоциированное с началом откола в образце тантала и определена откольная прочность $\sim 16,8$ ГПа. Такая экспериментальная техника открывает новый путь для исследования явлений при сверхвысоких скоростях деформации в материалах на атомном масштабе, включая высокоскоростную динамику трещин и индуцированные напряжениями структурные переходы в твердых телах.

Выполнен важный цикл исследований в области лазерной генерации и распространения ударных волн. Они относятся к моделированию распространения ударных волн в прочных керамиках наподобие карбида бора и др. Показано, что использование программ SPH (Smooth Particle Hydrodynamics) в нашей многопроцессорной реализации позволяет с высокой точностью описывать многоэтапный процесс разрушения керамики, видеть внутреннюю структуру волн разрушения.

Проанализировано прохождение сильной ударной волны через взвесь жидкости и сферических металлических частиц. Показано, что ударная волна деформирует частицы и увлекает их в направлении своего движения.

Начато решение практически важной и теоретически сложной задачи о моделировании диспергирования капель олова с добавкой иридия. За отчетный период подготовлены SPH-программы для ее решения. Начато численное моделирование. Используется разработанная нами мощная многопроцессорная версия SPH-кода. Это позволило на высокопроизводительных кластерах доводить число SPH- частиц до миллиарда, позволяющее в деталях описывать сложные трехмерные процессы. Проблемы связаны именно с геометрической сложностью задачи. Чтобы обойти эти проблемы, используется осесимметричное приближение. Расчет ведется поэтапно. С мелкими частицами проходит стадия начального лазерного энерговклада и достижения треугольной ударной волной продвижения вглубь сферической капли на 4 мкм (этап 1). Затем финальные данные этапа 1 огрубляются и используются уже как начальные данные этапа 2. В таком осесимметричном приближении выполнены расчеты моделирования абляции капли олова.

Создана программа построения рентгеновских изображений, позволяющая строить изображения на ПЗС матрице интерферометрической картины на ПЗС матрице, получать кольца Ньютона при лазерной абляции.

[C] Проведено развитие программы одномерных двухтемпературных гидродинамических вычислений (1D-2T-HD) с учетом наших последние данные по электронному вкладу, и в связи с созданными программами построения рентгеновских изображений. Электронный вклад в теплоемкость и давление находится с помощью квантово-механических вычислений состояний двухтемпературной конденсированной среды, возникающих при воздействии ультракороткого лазерного импульса. Для вычислений применены DFT (Density Functional Theory) коды VASP, Elk и др.

[D] Выполнены работы о взаимодействии поляризованного света с малыми частицами. Проведено исследование поглощения излучения различной мультиполярности малыми частицами в зависимости от их размеров, формы и комплексной диэлектрической проницаемости материала частицы.

[F] Важнейшим является вопрос о механизмах формирования наночастиц при лазерной абляции металлической мишени в жидкость. Рассмотрена задача об абляции золота в воду и проделана большая работа по определению межмолекулярных и межатомных потенциалов в этой смеси (золото-золото, вода-золото, вода-вода). С указанными потенциалами выполнены расчеты абляции золото/вода применением крупномасштабной молекулярной динамики в комбинации с описанием механизма теплопроводности методом Монте-Карло, а также при помощи гидродинамического кода с использованием двухтемпературной физики, широкодиапазонного уравнения состояния золота и аппроксимации адиабаты воды. С помощью проведенных расчетов показано, как отрываются и попадают в жидкость наночастицы золота, как они оказываются внутри парового (пары жидкости) пузырька.

[G] За отчетный период удалось создать потенциалы межатомного взаимодействия олова с существенно разными значениями коэффициента поверхностного натяжения. Они требуются для скейлинга требований к объему молекулярно-динамических (МД) вычислений в сторону снижения этих требований. Эквивалентный в смысле теории подобия по отношению к капиллярному числу размер частицы в МД получается меньше, чем в эксперименте, если для

моделирования применить межчастичный потенциал, дающий уменьшенный коэффициент поверхностного натяжения. Причем в 3D геометрии уменьшение размера входит в кубе. За счет этого обеспечивается значительный выигрыш в параметрах расчета.

Сайт проекта: <http://laser.itp.ac.ru/RNF-14-19-01599/index.html>

на английском языке

Together with a group of experimenters from (i) Australian centers of microphotonics and nanofabrication, (ii) a number of Far Eastern scientific organizations and (iii) FIAN, ITMO Spb. at theoretical and numerical investigations of researches from N.L. Dukhov VNIIA and L.D. Landau Institute for Theoretical Physics, the head institution of the proekt, a great deal of work aimed at the controlled creation of optimal surface structures of subwave dimensions with an artificially created required dielectric function is performed. Large-scale numerical simulation showed that superfast (pulse duration 230 fs) release of laser energy in metal films induces rapid melting and melt motion, resulting in a complex redistribution of the film material at the nanoscale after recrystallization. Melting-overflow-crystallization form the morphology of nanostructures. Morphological nanocharacteristics of structures (diameter, curvature of the dome, frozen jet at the apex, drop on the jet, etc.) strongly influence the optical response at plasmon probing. This makes it possible to apply the resulting arrays of structures in nonlinear optical application. The combined theoretical approach based on the separation of the relatively slow hydrodynamic motion of the film and fast physical processes that determine the separation of the film from the substrate was used in the simulation; all the physical processes associated with the absorption of laser energy, electron-ion energy exchange, acoustic relaxation and hydrodynamic motion were taken into account.

A comprehensive analysis of the influence of the film thickness on the ablation dynamics at laser action of various durations from tens of femtoseconds to the subnanosecond range is carried out. The solution to this problem is essential for laser transfer of matter (LIFT / LIBT - laser-induced forward / backward transfer, laser printing). Films are considered as thin, if their thickness is small compared to the depth of heating by a laser. The dynamics of thin metal films, homogeneously heated by a laser pulse, both free-hanging and experiencing undamped acoustic vibrations with low absorbed fluences, and films on a substrate, in which these oscillations are damped due to excitation of sound waves in the substrate, are studied in detail. The dynamics of detachment of a part of the film with increasing fluence is studied for both thin films and thick films with a thickness greater than the depth of heating.

A2. Work has been done to simulate the effect of an X-ray optical vortex on a multilayer target. The phenomenon of the formation of the central tip in the vicinity of the vortex center is understood, where the intensity of the action is close to zero. Prior to this, only the effect of light vortices of the infrared and optical ranges was studied. In a work performed jointly with experimenters from Japan, a hard X-ray (7.71 keV) laser femtosecond pulse was emitted from the XFEL-X-ray free electron laser SACLA (Japan). Both single-layer and multi-layered targets were considered. In the multi-layer case, large-scale numerical simulation was carried out for five alternating layers of gold and chromium deposited on a

silicon substrate. Interaction of the vortex pulse with the target leads to the formation of a toroidal shell from the melt of metals. The capillary tension in the inner ring of the toroid leads to the tightening of the inner ring to the axis, converting it into a tube and compressing the tube into a central columnar solidified structure.

The formation of extremely sharp needles was studied when the laser beam was focused in a small spot on the film, limited by diffraction. Needles have a rounding radius at the top of several nanometers. Such needles can be used, for example, as concentrators of the electric field at its apex. It is found that unusual crystalline forms with 5-fold symmetry (icosahedron) appear in the vicinity of the taper.

A3. The actual for modern plasmonics problem of creation of periodic structures on a metal surface is studied. In one embodiment, the formation of periodic structures is considered due to the release of energy from the interference of laser radiation on the surface of the film and the surface plasmon-polariton mode in it in the Kretschmann geometry. In another embodiment, the periodic corrugation of the metal surface is created by the fact that the laser pulse acts on a solitary structure on a metal film (this structure is created by the action of a preliminary strongly focused pulse on the film). Corrugation arises from the interference of the surface plasmon wave from a solitary structure with a laser radiation field. A simulation was performed that determines the wavelength of the plasmon mode (about 400 nm) and the depth of modulation of the maximum / minimum of the standing wave (tens of percent). Hydrodynamic modeling using the thin-film method and large-scale molecular dynamics were performed. The development of corrugation at the stage of capillary retardation of the film and its recrystallization is modeled in detail. Previously, neither thin film method nor MD was used for periodic corrugation problems.

A4. Calculations of the effect of long (ns) pulses.

In the thin film approximation, a program is developed for solving problems with long (nanosecond) laser pulses. In the program, in addition to film inertia and surface tension, the thermal conductivity necessary for estimating the rate of cooling of the film is taken into account. The dependence of the saturated vapor pressure of a metal film on temperature is taken into account. In a series of calculations in this approximation it is shown that the film separates from the substrate due to the saturated vapor pressure. Initially, a vapor interlayer occurs in the region of contact between the film and the substrate. Then the vapor accelerates the film, and a dome is formed on it. The picture is similar to the case of ultrashort pulses, when the separation of the film and its flight by inertia are associated with a short stage of mechanical repulsion of the film from the substrate. With nanosecond action, the film gradually cools down due to the heat sink to the periphery, the falling vapor pressure, because of which the dome grows, becomes dynamically insignificant, and the capillary slowing comes to the fore.

[B]. The problem of the effects of the action of a subnanosecond (600 ps) optical laser pulse on a tantalum film and the diagnostics of the results of action with the help of ultrashort (several fs) hard (10-20 keV) free electron laser pulse was studied. It is shown that the combined action of a powerful optical laser pulse (pump pulse) and a femtosecond pulse of X-ray probing radiation (probe pulse)

makes it possible to detect the dynamics of the destruction of the crystal lattice in a tantalum film at an ultrahigh deformation rate of $\sim 2 \times 10^8$ - 3.5×10^8 1 / s . Using the method of X-ray diffraction in real time, opens the way to studying the structure of matter under stress and the dynamic destruction of materials at the atomic level. Using this method, the maximum reduction in density from 8 to 10% associated with the beginning of the break in the tantalum sample was directly measured and spallation strength ~ 16.8 GPa was determined. This experimental technique opens a new way for investigating phenomena at ultrahigh strain rates in materials on an atomic scale, including high-speed fracture dynamics and stress-induced structural transitions in solids.

An important cycle of investigations in the field generation and propagation of shock waves by laser irradiation has been performed. They are related to modeling the propagation of shock waves in strong ceramics such as boron carbide, etc. It is shown that the use of SPH (Smooth Particle Hydrodynamics) programs in our multiprocessing realization allows us to describe the multi-stage process of destruction of ceramics with high accuracy and see the internal structure of the fracture waves.

Passage of a strong shock wave through a slurry of liquid and spherical metal particles is analyzed. It is shown that the shock wave deforms the particles and entrains them in the direction of their motion.

The solution of the practically important and theoretically complex problem of modeling the dispersion of tin droplets with the addition of iridium is begun. During the reporting period, SPH-programs were prepared to solve it. Numerical simulation has been started. We have developed a powerful multiprocessor version of the SPH code. This allowed us to bring the number of SPH particles to a billion in high-performance clusters, which allows us to describe complex three-dimensional processes in detail. Difficulty is related precisely to the geometric complexity of the problem. To circumvent these problems, an axisymmetric approximation is used. The calculation is carried out in stages. With small particles, the stage of the initial laser energy input and the achievement of a triangular shock wave propagating deeper into the spherical droplet at $4 \mu\text{m}$ is passed (stage 1). Then the final data of stage 1 are coarsened and used already as initial data of stage 2. In this axisymmetric approximation, the modeling of the ablation of the tin drop are performed.

A program for constructing X-ray images was created, which makes it possible to build images of an interferometric pattern on a CCD array and to obtain Newton's rings at laser ablation.

[C] The program of one-dimensional two-temperature hydrodynamic computations (1D-2T-HD) has been developed taking into account our latest data on the electronic contribution, and in connection with the created programs for constructing X-ray images. Electronic contribution to the heat capacity and pressure are found with the help of quantum mechanical calculations of the states of a two-temperature condensed medium arising from the action of an ultrashort laser pulse. For calculations, DFT (Density Functional Theory) codes VASP, Elk, and others are applied.

[D] Work has been done on the interaction of polarized light with small particles. A study was made of the absorption of radiation of different multipolarity by small particles, depending on their size, shape, and complex permittivity of the particle material.

[F] The most important question is the mechanisms of nanoparticle formation during laser ablation of a metal target into a liquid. The problem of ablation of gold in water is considered and a great work has been done to determine the intermolecular and interatomic potentials in this mixture (gold-gold, water-gold, water-water). With these potentials, gold-water ablation calculations were performed using large-scale molecular dynamics in combination with a description of thermal conductivity by the Monte Carlo method, and also using a hydrodynamic code with two-temperature physics, a wide-range equation of state of gold, and approximation of water adiabat. With the help of the calculations performed, it is shown how gold nanoparticles break away and enter the liquid, how they appear inside the vapor (vapor of the liquid) bubble.

[G] During the reporting period, it was possible to create potentials of interatomic interaction of tin with significantly different values of the coefficient of surface tension. They are required for scaling the requirements for the volume of molecular dynamics (MD) calculations in the direction of reducing these requirements. Equivalent in the sense of the similarity theory with respect to the capillary number, the particle size in the MD is obtained less than in the experiment if the interparticle potential giving a reduced coefficient of surface tension is used for modeling. And in 3D geometry, the size reduction cubically multiplies. Due to this, a significant gain in the calculation parameters is ensured.

Project website: <http://laser.itp.ac.ru/RNF-14-19-01599/index.html>

1.7. Перечень публикаций за год по результатам проекта

(публикации добавляются из списка зарегистрированных участниками проекта публикаций)

1. [Албертаззи Б., Озаки Н., Жаховский В., Фаенов А., ... Ильницкий Д., Иногамов Н. и др. \(Albertazzi B., Ozaki N., Zhakhovsky V., Faenov A., ... Ilnitsky D., Inogamov N., et al.\) Dynamic fracture of tantalum under extreme tensile stress SCIENCE ADVANCES \(2017 г.\)](#) ^{WOS}

2. [Анисимов С. И., Жаховский В. В., Иногамов Н. А., Мурзов С. А., Хохлов, В. А. \(Anisimov S.I., Zhakhovsky V.V., Inogamov N.A., Murzov S.A., Khokhlov V.A.\) О формировании и кристаллизации жидкой струи, возникающей при воздействии на пленку остросфокусированным лазерным пучком Квантовая Электроника \(2017 г.\)](#) ^{WOS SCOPUS РИНЦ}

3. [Ванг К.В., Кучмижак А.А., Ли, К., Йуодказиз С., Витрик О.Б., Кулчин Ю.Н., Жаховский В.В., Данилов П.А., Ионин А.А., Кудряшов С.И., Руденко А.А., Иногамов Н.А. \(Wang, X. W.; Kuchmizhak, A. A.; Li, X.; Juodkazis, S.; Vitrik, O. B.; Kulchin, Y. N.; Zhakhovsky, V. V.; Danilov, P. A.; Ionin, A. A.; Kudryashov, S. I.; Rudenko, A. A. & Inogamov, N. A.\) Laser-induced Translative Hydrodynamic Mass Snapshots: non-invasive characterization and predictive modeling via mapping at nanoscale Physical Review Applied \(2017 г.\)](#) [WOS](#) [SCOPUS](#) [РИНЦ](#) [Q1](#)

4. [Дьячков С.А.Ю Медин С.А., Егорова М.С., Жаховский В.В., Паршиков А.Н. \(Dyachkov, S. A.; Medin, S. A.; Egorova, M. S.; Zhakhovsky, V. V. & Parshikov, A. N.\) Boron carbide: SPH simulation of shock-wave experiments with the JHB-based failure model Journal of Applied Physics \(2018 г.\)](#) [WOS](#) [SCOPUS](#) [РИНЦ](#)

5. [Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. \(Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V. & Khokhlov, V. A.\) Warm Dense Matter in Extremely Small Volume - Hydrodynamics of Nanofilms Triggered by Laser Irradiation at Diffraction Limit Conference Proceedings of the 20th Biennial Conference of the APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter. Bulletin of the American Physical Society \(2018 г.\)](#) [SCOPUS](#)

6. [Иногамов Н.А., Жаховский В.В. \(Inogamov N. A., Zhakhovsky V. V.\) Simulations of Short Pulse Laser-Matter Interaction in Case of Tight Focusing onto Thin Film Lobachevskii Journal of Mathematics \(2017 г.\)](#) [SCOPUS](#) [РИНЦ](#)

7. [Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. \(Inogamov, N.; Zhakhovsky, V. & Khokhlov, V.\) Laser Ablation of Metal into Liquid: near Critical Point Phenomena and Hydrodynamic Instability Conference Proceedings of the 20th Biennial Conference of the APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter. Bulletin of the American Physical Society \(2018 г.\)](#) [SCOPUS](#)

8. [Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. \(Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V.; Khokhlov, V. A.\) Laser ablation caused by geometrically constrained illumination and inventive target design J. Phys.: Conf. Ser., \(2017 г.\)](#) [WOS](#) [SCOPUS](#) [РИНЦ](#)

9. [Иногамов Н.А., Хохлов В.А., Жаховский В.В., Хищенко К.В., Анисимов С.И. \(Inogamov, N. A.; Khokhlov, V. A.; Zhakhovsky, V. V.; Khishchenko, K. V. & Anisimov, S. I.\) Ablation of gold into water Matter and Radiation at Extremes \(2017 г.\)](#)

10. [Иногамов Н.А., Хохлов В.А., Петров Ю.В., Жаховский В.В., Мигдал К.П., Ильнитский Д.К., Хасегава Н., Нишиино М., Ямагива М., Ишино М., Кавачи Т., Фаенов А.Я., Пикуз Т., Баба М.,](#)

[Минами И., Суемото Т. \(Inogamov, N. A.; Khokhov, V. A.; Petrov, Y. V.; Zhakhovsky, V. V.; Migdal, K. P.; Ilnitsky, D. K.; Hasegawa, N.; Nishikino, M.; Yamagiwa, M.; Ishino, M.; Kawachi, T.; Faenov, A. Y.; Pikuz, T.; Baba, M.; Minami, Y., Suemoto., T.\) Rarefaction after fast laser heating of a thin metal film on a glass mount. AIP Conference Proceedings \(2017 г.\)](#) SCOPUS РИНЦ

11. Кохумура И., Жаховский В., Такей Д., Сузуки И., Такеши А., Иноуе И., Инубуши И., Иногамов Н., Ишикава Т., Ябашу М. (Kohmura, Y.; Zhakhovsky, V.; Takei, D.; Suzuki, Y.; Takeuchi, A.; Inoue, I.; Inubushi, Y.; Inogamov, N.; Ishikawa, T. & Yabashi, M.) **Nano-structuring of multi-layer material by single x-ray vortex pulse with femtosecond duration** Applied Physics Letters (2017 г.) WOS SCOPUS РИНЦ Q1

12. Кохумура И., Жаховский В., Такей Д., Сузуки И., Такеши А., Иноуе И., Инубуши И., Иногамов Н., Ишикава Т., Ябашу М. (Kohmura, Y.; Zhakhovsky, V.; Takei, D.; Suzuki, Y.; Takeuchi, A.; Inoue, I.; Inubushi, Y.; Inogamov, N.; Ishikawa, T. & Yabashi, M.) **Supplementary material for the document entitled: Nano-structuring of multi-layer material by single x-ray vortex pulse with femtosecond duration** Applied Physics Letters (2017 г.) WOS SCOPUS РИНЦ Q1 без ссылки на РНФ

13. М.С.Егорова, С.А.Мурзов, В.В.Жаховский, А.Н.Паршиков (M.S. Egorova, S.A. Mursov, V.V. Zhakhovsky, A.N. Parshikov) **Прохождение ударной волны через взвесь металлических частиц в жидкости** Физико-химическая кинетика в газовой динамике (2017 г.) РИНЦ

14. Мирошненко А. Е. и Трибельский М. И. (Miroshnichenko, A. E. & Tribelsky, M. I.) **Ultimate Absorption in Light Scattering by a Finite Obstacle** Physical Review Letters (2017 г.) WOS SCOPUS РИНЦ Q1

15. Мирошниченко А.Е., Трибельский М.И. (Miroshnichenko, A. E., Tribelsky, M. I.) **Ultimate Absorption in Light Scattering by a Finite Obstacle Supplemental Material** Physical Review Letters (2017 г.) WOS SCOPUS РИНЦ Q1 без ссылки на РНФ

16. С.А.Дьячков, А.Н.Паршиков, В.В.Жаховский (S A Dyachkov, A N Parshikov, V V Zhakhovsky) **SPH simulation of boron carbide under shock compression with different failure models** Journal of Physics: Conference Series (2017 г.) SCOPUS РИНЦ не аффилирована с организацией

17. Свяковский С.Е., Терновский В.В., Трибельский М.И. (Svyakhovskiy, S. E.; Ternovski, V. V. & Tribelsky, M. I.) **Transient effects in resonant light scattering by particles: Anapole as a storage for "frozen light"?** Physical Review Letters (2017 г.) WOS SCOPUS РИНЦ Q1

18. [Фаенов А., Пикуз Т, Ишино М., Иногамов Н., Жаховский В., Скобелев И., Хасегава Н., Нишикино М., Кандо М., Кодама Р., Кавачи, Т \(Faenov, A.; Pikuz, T.; Ishino, M.; Inogamov, N.; Zhakhovsky, V.; Skobelev, I.; Hasegawa, N.; Nishikino, M.; Kando, M.; Kodama, R. & Kawachi, T.\) Soft x-ray laser ablation of metals and dielectrics Proceedings of SPIE \(2017 г.\)](#) ^{WOS} ^{SCOPUS} ^{РИНЦ}

19. [Хохлов В.А., Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Ильнитский Д.К., Мигдал К.П., Шепелев В.В. \(Khokhlov, V. A.; Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V.; Ilnitsky, D. K.; Migdal, K. P., Shepelev., V. V.\) Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation AIP Conference Proceedings \(2017 г.\)](#) ^{SCOPUS} ^{РИНЦ}
