


# Форма «Т». Титульный лист отчета (итогового отчета) о выполнении проекта

Название проекта: <b>Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в трехмерной геометрии</b>		Номер проекта: <b>14-19-01599</b>	
		Код типа проекта: <b>ОНГ-П</b>	
		Отрасль знания: <b>09</b>	
Фамилия, имя, отчество (при наличии) руководителя проекта: <b>Анисимов Сергей Иванович</b>		Контактные телефон и e-mail руководителя проекта: <b>+79032130112, s.i.anisimov@mail.ru</b>	
Полное и краткое название организации, через которую осуществляется финансирование проекта: <b>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН</b>			
Объем средств, фактически полученных от РНФ в 2018 г.: <b>6000</b> тыс. руб.		Год начала проекта: <b>2017</b>	Год окончания проекта: <b>2018</b>
		Объем финансирования, запрошенный на 2018 год: <b>6000</b> тыс. руб.	
Перечень приложений к отчету	1. Копии публикаций* в соответствии с Формой 2о - 16 шт. на 32 стр. в 1 экз. <i>* К печатному экземпляру отчета прикладываются только копии первой (с указанием авторов) страницы и страницы со ссылкой на поддержку от РНФ.</i> Файл с дополнительными материалами на 46 стр в 1 экз.		
<b>Гарантирую, что при подготовке отчета не были нарушены авторские и иные права третьих лиц, и/или имеется согласие правообладателей на представление в РНФ материалов и их использование РНФ для проведения экспертизы и для их обнародования.</b>			
Подпись** руководителя проекта  _____/С.И. Анисимов/		Дата подачи отчета: <b>14.12.2018 г.</b>	
Подпись** руководителя организации*** ** Подписи должны быть расшифрованы. *** Либо уполномоченного представителя, действующего на основании доверенности или распорядительного документа. В случае подписания формы уполномоченным представителем организации (в т.ч. – руководителем филиала) к печатному экземпляру отчета прилагается копия распорядительного документа или доверенности, заверенная печатью организации.  _____/_____/		Печать (при наличии) организации	

Отчет о выполнении проекта  
№ 14-19-01599  
«Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в трехмерной  
геометрии»,  
в 2018 году

### 1.1. Заявленный в проекте план работы на год

Формируется в соответствии с заявкой на участие в конкурсе.

На 2018 год запланирован обширный план работ. В основном он состоит из задач, перечисленных в заявке на продление гранта РФФИ на 2017 и 2018 гг. Плюс имеются важные дополнения. Эти дополнения связаны с успешным развитием исследований на этапе 2017 г. и новыми научными связями, которые сформировались за последние год-два (MESA+ University of Twente и Lasercenter Munich, University of Applied Sciences)

((1)) 3D эффекты, плавление/испарение/рекристаллизация, произвольная длительность лазерного импульса  
Слова о трёхмерном пространстве означают, что мы будем учитывать конечный размер пятна нагрева. Сказанное о геометрии поясняет рис. 1 в приложенном п. 3.3. файле. Лазерный пучок  $F(r)$  действует на мишень. Пусть пучок имеет максимум интенсивности на оптической оси (например, гауссов пучок). Глубина  $H$  (по нормали к границе мишени), на которую распространилось влияние лазерного воздействия, сравнивается с радиусом  $R$  пучка. Если глубина  $H$  мала по сравнению с радиусом  $R$ , то задачу можно кардинально упростить, перейдя от 3D к 1D пространству. Но если  $H \sim R$  или  $H > R$ , то приходится решать полную, трудную 3D задачу. Кроме того, в окрестности порога задача всегда является трехмерной. Эта окрестность выделена кружком на рис. 1 в приложенном п. 3.3. файле. Например, рассмотрим ультракороткое воздействие с амплитудой, превышающей порог абляции; (длительность ультракороткого импульса  $\tau_L$  мала по сравнению с акустическим масштабом времени  $d/c$ , где  $d$  – это глубина слоя прогрева: Heat Affected Zone, HAZ,  $c$  – скорость звука). Тогда на некоторой глубине под поверхностью мишени начинается нуклеация. В результате формируется полость  $tm_2$ , наполненная двухфазной смесью, см. рис. 1. В боковом направлении полость оканчивается на радиусе  $r^*$ . Окончание  $r^*$  находится там, где флюенс  $F(r^*)$  снижается до порогового значения  $F_{thr}$ .  
Примеры 3D формирований приведены на рис. 2 в приложенном п. 3.3. файле. Подчеркнем, это две принципиально разные ситуации, хотя на вид морфология аналогична. В обоих случаях использовалась металлическая пленка, напыленная на диэлектрическую подложку. Слева пленка тонкая – в том смысле, что толщина слоя прогрева HAZ в материале пленки больше, чем толщина пленки. Тогда пленка прогревается однородно по нормали вдоль своей толщины. Причем в случае на рис. 2 слева импульс ультракороткий – нагрев завершается до того, как звук пробежит пленку по ее толщине. Если в левом случае неважно, с какой стороны происходит нагрев пленки (со стороны материальной прозрачной подложки, т.е. нагрев снизу на рис. 1, или со стороны вакуума, т.е. нагрев сверху на рис. 1), то в правом случае это существенное обстоятельство. В левом случае имеет место однородный нагрев пленки по ее толщине, поэтому направление нагрева не играет роли. Тонкая пленка (левый случай) отлетает от подложки под действием давления, действующего на контакте между пленкой и подложкой.

Одно из основных направлений работ по гранту РФФИ 14-19-01599 связано с 3D уединенными формированиями на тонких пленках, остающимися после ультракороткого удара (это левый случай на рис. 2 в приложенном п. 3.3. файле). В результате наших исследований по гранту этот вопрос решен, см. статьи и отчеты за 2015 и 2016-й годы. Отметим, что до нашего цикла работ решения этой важной проблемы не было. Хотя первые экспериментальные фото вида, показанного слева на рис. 2, появились в 2003, 2004 гг.; работы Korte F., Koch J., and Chichkov B.N. Appl. Phys. A, 79, 879 (2004); Y. Nakata, T. Okada, M. Maeda, Jpn. J. Appl. Phys. 42 (2003) L1452. В предыдущих теоретических и численных работах не удавалось получить картину с джетом на вершине купола.

На этапе 2018 г. исполнения гранта, наработанные на предыдущих этапах подходы, будут применены к более сложному случаю, к толстым пленкам. Будут рассмотрены как ультракороткий импульс, так и длинные импульсы. Сначала мы рассмотрим проблему с формированием, показанным на рис. 2 в приложенном п. 3.3. файле справа. Затем перейдем к еще более сложной проблеме с толстой пленкой на подложке, освещаемой со стороны вакуума. Наши подходы состоят в применении комбинированной методики. Сначала решаются одномерные задачи с полной двухтемпературной физикой, гидродинамикой и уравнениями состояния. Учитываются процессы плавления, испарения и затвердевания по мере остывания. Находится распределение скорости по веществу в конце стадии падения давления

на контакте подложка – пленка до малых значений. По распределениям скорости и температуры мы определяем слой, который в будущем сформирует жидкую оболочку. Далее используем полуаналитическую модель бесконечно тонкой оболочки для подготовки начальных данных для молекулярно-динамического моделирования.

К этому кругу относится и проблема с воздействием наносекундных импульсов. На этапе 2017 года были подготовлены подходы к этой проблеме с помощью модели бесконечно тонкой оболочки. В 2018 г. решение будет окончено. Будут добавлены данные молекулярно-динамического моделирования и написана статья. Отметим важность данного направления. Многие лаборатории предпочитают для фабрикации наноструктур применять именно наносекундные лазерные системы, как более простые.

#### ((2)) Фазовые пластинки и вихревые пучки электромагнитного излучения

С помощью фокусировки и фазовых пластинок создают «закрученные» потоки ЭМ излучения. Вихревой оптический пучок создает на мишени спиральное острие, см. рис. 3 в приложенном п. 3.3. файле. Это популярное сегодня направление исследований, по которому публикуются десятки работ в год, см. например, K. Toyoda, Using Optical Vortex To Control the Chirality of Twisted Metal Nanostructures, Nano Lett. (2012) v. 12, 3645-3649. Предполагается, что в будущем такие хиральные наноструктуры позволят различать хиральность и оптическую активность молекул на наномасштабах. Можно будет влиять на химические реакции на хиральных плазмонных наноструктурах. С этими возможными приложениями связан интерес к проблеме. Статей по проблеме много. Но все они посвящены или вопросам формирования вихревого пучка в теории и на практике, или эксперименту. Авторы подсчитывают орбитальный момент и связывают его знак с направлением закрутки - Takahashi et al., Picosecond optical vortex pulse illumination forms a monocrystalline silicon needle, Scientific Reports | 6:21738 | DOI: 10.1038/srep21738. Нет ни одной работы, в которой на базе физики взаимодействия излучения с веществом авторы хотя бы пытались проанализировать ситуацию. Наша работа по направлению ((2)) в 2018 г. будет нацелена на исправление этого положения. Будет проанализировано влияние оптических вихрей на основе пучков Лагерра-Гаусса и Эрмита-Гаусса на гидродинамику расплава вещества мишени в пятне лазерного нагрева.

#### ((3)) Термомеханические эффекты при интерференции ЭМ волны и плазмонного поля, запись голограмм

По этому направлению многое сделано в 2017 году. За 2018 г. будет изучено влияние параметров, соответственно накоплены варианты расчетов и даны конкретные рекомендации экспериментаторам. Далее будут выполнены проверки, собраны беловые материалы и подготовлены публикации.

#### ((4)) Мягкий рентген, косое падение, кольца Ньютона и построение интерферометрических изображений – расшифровка эксперимента.

Очень важным является продолжение кооперации с японской исследовательской группой «X-ray Laser Group» проф. Кавачи и др. Ишино в Kansai Photon Science Institute, QST. Это активная группа, имеющая в своем распоряжении мягкий (13.9 нм) рентгеновский лазер (SXRL) в KPSI и имеющая доступ к мощному суперсовременному лазеру на свободных электронах XFEL SACLA. Они ставят перед нами, во-первых, вопрос об абляции (т.е. о повреждении, модификации мишеней) на SXRL и на XFEL. Во-вторых, за 2018 г. будет доведен до публикации вопрос об интерпретации и построении изображений колец Ньютона и интерферометрических полос при памп-проб освещении облученной мишени проб импульсами мягкого рентгена косого падения. Отметим, что вопрос об абляции материалов под действием облучения с длиной волны 13.9 нм тесно связан с обработкой при литографии на длине волны «оловянной лампочки» 13.5 нм.

#### ((5)) Лазерная фрагментация капель

Будут проанализированы задачи о лазерном диспергировании капель. Эта задача связана с литографическими машинами на жестком ультрафиолете – мягком рентгене. В 2017 г. была проведена большая работа по моделированию распыления капель, см. отчет-2017. Для расчетов подготовлен многопроцессорный вариант SPH (smooth particle hydrodynamics) кода. Многопроцессорность позволяет намного увеличить число SPH-частиц, и т.о. сильно повысить точность моделирования. Первые SPH расчеты были выполнены в 2017 г. Теперь мы перейдем от прикидочных расчетов к беловым. Вместе с трехмерным осесимметричным SPH расчетом ведется 1D двухтемпературный (2T) расчет с помощью гидродинамического кода по лагранжевой координате. Во-первых, это дает нам информацию о формировании и эволюции «треугольной» ударной волны, которая распространяется к центру сферической капли. Этот профиль при необходимости будет перенесен в SPH расчет. Во-вторых, нас интересует ситуация при подходе сходящейся ударной волны к центру и при отражении от центра. Кроме того, мы разрабатываем параметры скейлинга, чтобы на малой молекулярно-динамической системе (шарик расплава олова с радиусом 50 нм) промоделировать лазерный удар по капле с радиусом 50 мкм.

#### ((6)) Рентгеновская и оптическая абляция рутения

В настоящее время быстро растут мощности и частота повторения рентгеновских лазеров на свободных электронах XFEL. В связи с этим разрабатываются покрытия, которые выдерживают воздействия ультракоротких интенсивных рентгеновских импульсов. Физическое описание механизмов повреждения поверхности необходимо для оценки времени жизни покрытий под действием жесткого излучения. Рутений считается подходящим материалом для таких покрытий. Наши коллеги экспериментаторы (Др. И. Махоткин и др.) из университета Твенте, Энсхеде, Голландия (группа Проф. Др. Fred Bijkerk) накопили много данных по рентгеновскому воздействию на рутений. Чтобы иметь возможность проводить сопоставление, ими были проведены серии опытов с воздействием на рутений оптическим лазером.

В 2018 г. нами будет создана физическая модель рутения и будет проведено численное моделирование воздействия рентгеновского и оптического излучений. Будет разработан межатомный потенциал рутения (Ru имеет ГПУ решетку) и выполнено молекулярно-динамическое моделирование. Результаты будут сопоставлены с опытами.

#### ((7)) Формирование наночастиц при абляции золота в воду

Это важная тематика, по которой имеется обширный и до сих пор плохо понятый эксперимент. На этапе 2017 г. были выполнены первые расчеты (одна статья послана в печать, другая принята к публикации). Этап 2018 г. является завершающим по данной проблеме. Будут выполнены крупномасштабные молекулярно-динамические и гидродинамические расчеты. Важно, что будут изучены случаи с более высокими значениями поглощенной энергии чем те, которые были рассмотрены в 2017 г.

#### ((8)) Проверка двухтемпературной теплофизической модели тантала

Важнейшими параметрами двухтемпературной модели являются теплоемкость, теплопроводность и коэффициент обмена энергией между электронной и ионной подсистемами. Имеются расчетные подходы к определению этих параметров. Спрашивается, как проверить расчет в эксперименте?

В 90-е годы с помощью измерений терморелефтанса определяли коэффициент обмена. Но эти измерения относились к слабым нагревам, ниже порога плавления. На сегодня ситуация при высоких нагревах остается неясной.

В 2018 г. с помощью DFT (Density Functional Theory) вычислений будет уточнена двухтемпературная модель тантала. Будут вычислены указанные параметры модели. Понятно, что значения параметров определяют форму волны сжатия, которая возникает под действием лазерного импульса. Эта волна распространяется из нагретого поверхностного слоя. Считаем лазерный импульс (поглощенный флюенс, длительность и вообще временная форма) фиксированным. Сравним форму волны сжатия при большом и малом значении параметра электрон-ионного обмена. При большом значении релаксация идет быстро, слой прогрева получается тонким, а давление в нем велико. При малом значении импульса слой прогрева толще, а давление в нем ниже.

Время пробега пленки волной сжатия (и закон смещения тыльной границы пленки) будет разным при разных значениях коэффициента обмена. Это открывает путь к проверке параметров.

В данном разделе плана будем проверять влияние полуvalентной 4f зоны тантала при нагревах выше 30 кК на параметры и, соответственно на форму волны сжатия. Сначала выполним такие проверки в расчетах. А затем предложим данную работу экспериментаторам.

В двухтемпературном гидродинамическом расчёте будут вычислены смещение задней границы пленки и глубина откольного кратера на фронтальной поверхности. Будет выяснено, как включение/исключение 4f-вклада в электронные теплоемкость, внутреннюю энергию, электрон-фононный теплообмен сказывается на смещении границы и глубине кратера.

#### ((9)) Ультратонкие пленки молибдена

Наши коллеги из Lasercenter Munich, University of Applied Sciences собрали много уникальных данных по лазерному воздействию на пленки молибдена толщиной 10 нм. В 2018 г. нами будет создана физическая модель молибдена и проведено численное моделирование. Это позволит существенно уточнить высокотемпературные теплофизические и оптические данные по этому важному тугоплавкому металлу.

#### Литература

[1] Данилов и др. Перераспределение материала при фемтосекундной лазерной абляции тонкой серебряной пленки, Письма ЖЭТФ (2016) т. 104(11), с. 780

[2] Qingfeng Li et al., Laser-induced nano-jetting behaviors of liquid metals, Applied Physics A (October 2017) v. 123(11), p.718.

## 1.2. Заявленные научные результаты на конец года

Формируется в соответствии с заявкой на участие в конкурсе.

### ((1)) 3D эффекты, плавление/испарение/рекристаллизация, произвольная длительность лазерного импульса

Будет построена теория, проведены численные расчеты и получено полное описание сложных явлений, которые имеют место при лазерном воздействии на толстые пленки. В практическом плане вопрос представляет интерес в связи с лазерной печатью в случаях, когда переносу с донора на ресивер подлежат более крупные капли, чем те, которые образуются в случае тонких пленок (крупные капли нужны, например, для создания квантовых точек на ресивере). Будет полностью решен вопрос о толстых пленках при воздействиях на них со стороны прозрачных подложек (случай А). Такое направление воздействия проиллюстрировано на рис. 1 в приложенном п. 3.3. файле, если принять, что среда «frontal medium» - это прозрачная подложка, через которую освещается фронтальная граница пленки. А «rear-side medium» - это вакуум, в сторону которого вылетает крупная капля.

Будет проведен анализ ситуации с толстой пленкой, когда воздействие оказывается с вакуумной стороны, а пленка нанесена на подложку – т.е. на рис. 1 лазер светит снизу через вакуум, а пленка держится на подложке «frontal medium» (случай В). Заранее, т.е. на момент составления отчета за 2017-й год, неясно, удастся ли получить полное описание в данном случае. Конечно, вспенивание тонкого слоя со стороны вакуума мы увидим (это воздействия с умеренной энергетикой). Но непонятно, отделится ли металл от подложки при воздействии с повышенной энергетикой, если контакт с подложкой находится на значительной глубине. Ударная волна, которая идет со стороны облученной вакуумной границы к контакту в случае В, движет вещество около контакта в сторону противоположную вакуумной границе. Если разрыв контакта и происходит, то на поздних стадиях, как протекают которые сейчас не ясно.

В 2018 г. будут сделаны попытки объяснить полный унос толстой пленки над подложкой (как на правых двух кадрах на рис. 4 в приложенном п. 3.3. файле. Это нетривиальная задача. Как показывает энергетический баланс, до полного испарения всей толщины пленки 500 нм еще далеко. Да и кадры с куполом-пузырем на рис. 5 (e,f,g,k) свидетельствуют против полного испарения. На рисунках i, j, k показаны сечения пленки для соответствующих SEM кадров, см. связывающие стрелки. Они получены с помощью резки фокусированным ионным пучком (FIB, focused ion beam). Как видим, на кадрах i и j пленка прилегает к контакту с подложкой. И только на рис. 5 k пленка отслаивается от подложки. Эта картинка похожа на отслоение пленки под куполом в случае тонких пленок. Но подчеркнем, здесь пленка толстая. Поэтому аргумент с давлением на контакте, ускоряющем центр масс первоначально неподвижной пленки в сторону вакуума, здесь не проходит. Здесь возле контакта имеется импульс (количество движения вещества пленки), направленный в сторону подложки. Его несет волна сжатия, идущая от облученной границы к контакту. Конечно, подложка тормозит импульс натекающего металла, но может ли она повернуть его в обратную сторону? На этапе 2018 г. будет сделана попытка разобраться с этим вопросом.

К этому кругу относится и проблема с воздействием наносекундных импульсов. На этапе 2017 года подготовлены подходы к этой проблеме с помощью модели бесконечно тонкой оболочки. В 2018 г. решение будет окончено. Будут добавлены данные молекулярно-динамического моделирования и написана статья.

### ((2)) Фазовые пластинки и вихревые пучки электромагнитного излучения

С учетом фазовых переходов плавление/кристаллизация будет проанализировано гидродинамическое течение, которое создается действием малого по диаметру (1 - 10 мкм) вихревого лазерного пучка на поверхность металлической мишени.

### ((3)) Термомеханические эффекты при интерференции ЭМ волны и плазмонного поля, запись голограмм

В 2018 г. будет изучено влияние параметров и накоплены варианты расчетов. Работа будет вестись параллельно опытам. Далее будут выполнены проверки результатов, собраны беловые материалы и подготовлены публикации.

### ((4)) Мягкий рентген, косое падение, кольца Ньютона и построение интерферометрических изображений – расшифровка эксперимента.

Будут доведены до совершенства программы, описывающие воздействие мягкого рентгена косого падения для построения изображений и расшифровки достаточно шумной экспериментальной информации наших коллег из Kansai Photon Science Institute, QST. Будет теоретически и численно проработан вопрос об абляции мягким рентгеном при разной длительности импульса воздействия: порядка десятка фс от XFEL SACLA и 7 пс от SXRL KPSI.

#### ((5)) Лазерная фрагментация капель

Будут подготовлены коды для моделирования лазерного диспергирования капель. Будет проанализирована физика диспергирования.

#### ((6)) Рентгеновская и оптическая абляция рутения

В 2018 г. нами будет создана физическая модель рутения и будет проведено численное моделирование воздействия рентгеновского и оптического излучений. Будет разработан межатомный потенциал рутения (Ru имеет ГПУ решетку) и выполнено молекулярно-динамическое моделирование. Результаты будут сопоставлены с опытами, которые проводят наши коллеги в университете г. Твенте.

#### ((7)) Формирование наночастиц при абляции золота в воду

Будут выполнены крупномасштабные молекулярно-динамические и гидродинамические расчеты. Важно пройти возможно более протяженный участок по времени, когда ударная волна в воде уходит на далекие расстояния от контакта вода-золото, контакт останавливается и давление на нем падает до низких значений.

#### ((8)) Проверка двухтемпературной теплофизической модели тантала

В 2018 г. с помощью DFT (Density Functional Theory) вычислений будет уточнена двухтемпературная модель тантала. Будут вычислены указанные параметры модели. Понятно, что значения параметров определяют форму волны сжатия, которая возникает под действием лазерного импульса. Эта волна распространяется из нагретого поверхностного слоя. Считаем лазерный импульс (поглощенный флюенс, длительность и вообще временная форма) фиксированным. Сравним форму волны сжатия при большом и малом значении параметра электрон-ионного обмена. При большом значении релаксация идет быстро, слой прогрева получается тонким, а давление в нем велико. При малом значении импульса слой прогрева толще, а давление в нем ниже.

Время пробега пленки волной сжатия (и закон смещения тыльной границы пленки) будет разным при разных значениях коэффициента обмена. Это открывает путь к проверке параметров.

В данном разделе плана будем проверять влияние полуvalентной 4f зоны тантала при нагревах выше 30 кК на параметры и, соответственно на форму волны сжатия. Сначала выполним такие проверки в расчетах. А затем предложим данную работу экспериментаторам.

В двухтемпературном гидродинамическом расчёте будут вычислены смещение задней границы пленки и глубина откольного кратера на фронтальной поверхности. Будет выяснено, как включение/исключение 4f-вклада в электронные теплоемкость, внутреннюю энергию, электрон-фононный теплообмен сказывается на смещении границы и глубине кратера.

#### ((9)) Ультратонкие пленки молибдена

Наши коллеги из Lasercenter Munich, University of Applied Sciences собрали много уникальных данных по лазерному воздействию на пленки молибдена толщиной 10 нм. В 2018 г. нами будет создана физическая модель молибдена и проведено численное моделирование. Это позволит существенно уточнить теплофизические и оптические данные по этому тугоплавкому металлу.

### 1.3. Сведения о фактическом выполнении плана работы на год

*(фактически проделанная работа, до 10 стр.)*

Наверно, важнейшим достижением является создание коллектива исследователей, вооруженного самыми передовыми средствами решения сложнейших современных задач. Это 3D течения жидкой и твердой фаз с внутренними контактами между веществами, ударными волнами и волнами разгрузки, с капиллярными явлениями, диффузией компонент, переходом в состояния выше критической точки и возвращением из этих состояний, формированием конденсатов, и эволюцией многофазных сред (вспененные горячие расплавы металлов, синтез коллоидных растворов наночастиц). Модели и алгоритмы работают в условиях равновесных и неравновесных фазовых переходов первого рода, включают процессы испарения и конденсации вместе с рекристаллизацией в твердые состояния на завершающих стадиях.

Все указанные проблемы являются с одной стороны труднорешаемыми, относятся к фундаментальным научным проблемам, с другой стороны они весьма актуальны в технологическом плане и тесно связаны с опытами. При их решении наш коллектив поддерживает крепкие связи с рядом передовых экспериментальных лабораторий.

Представляется очень существенным то, что коллектив состоит из молодых ученых (Шепелев, Ильницкий, Мигдал, Дьячков, Григорьев, Егорова, Мурзов) и нескольких высококвалифицированных ученых старшего возраста. Это оптимальное сочетание молодости и опыта.

Во-первых, быстро растут молодые. Видно по публикациям, в которых они являются первыми авторами в лучших научных журналах. Плюс научно-квалификационная деятельность, диссертации кфмн: Мигдал - защищена (21.3.2018, ИВТАН <https://www.jiht.ru/upload/iblock/d75/Avtoferat.pdf>), Дьячков – подготовлена, защита 26 декабря 2018 г. ИВТАН [https://www.jiht.ru/science/dissert-council/defend\\_detail.php?ELEMENT\\_ID=79290](https://www.jiht.ru/science/dissert-council/defend_detail.php?ELEMENT_ID=79290), Ильницкий – подготовлена, защита в первой половине 2019 г. мехмат МГУ (предзащита на ведущем предприятии [http://www.gpi.ru/news\\_s.php?eng=0&id=1631](http://www.gpi.ru/news_s.php?eng=0&id=1631)).

Во-вторых, быстро решаются самые сложные, весьма амбициозные научные проблемы.

Отметим, финансовая поддержка со стороны гранта РНФ играет важную роль в объединении и мотивации исследователей (для молодых ученых это особенно важно).

За 2018-й год участники коллектива приняли участие в 10 международных конференциях, и представили 2 приглашенных, 13 устных и 3 постерных докладов по тематике проекта РНФ.

Ниже мы перечислим разработанные средства, к которым относим физические модели и численные алгоритмы, реализацию этих алгоритмов на мощных суперкомпьютерах. Будет дано детальное описание физических результатов и их отношения к фундаментальной проблематике.

Заявленная программа исследований состоит из 9-ти разделов, которые пронумерованы так: ((1))-((9)), см. пп. 1.1 и 1.2 карточки отчета. Ниже мы будем следовать данной нумерации для удобства рецензирования. В отчет добавлен раздел ((10)), в который мы включили описание дополнительных работ, проделанных в рамках проекта за истекший период. Понятно, что при планировании работ на год в конце 2017 года нельзя было учесть всех новинок, которые были развиты далее (т.е. после осени 2017 г.) в отчетном 2018-м году.

((1)) 3D эффекты, плавление/испарение/рекристаллизация, произвольная длительность лазерного импульса

В этом направлении нашим коллективом за отчетный год выполнено много исследований. Заявленная программа выполнена. Если же смотреть на проблему шире, т.е. включить в отчет работы по трехмерному моделированию сложных лазерных воздействий, то выполнены исследования по пространственному дроблению капель лазерным ударом. Но эту тему оставим до раздела ((5)) ниже. Проведен сравнительный анализ воздействия ультракоротких импульсов на тонкие пленки металлов для двух типов мишеней. В первом типе мишеней тонкая пленка нанесена на «толстую» (порядка 100 мкм) диэлектрическую подложку. Мишени второго типа образуют свободновисящие пленки, т.е. пленки толщиной десятки нанометров, у которых обе поверхности пленки являются свободными; на свободной границе металл контактирует с вакуумом или газом; для пленки 1-го типа одна граница свободная, а вторая – это контакт двух конденсированных сред: металла и диэлектрика/полупроводника (стекло или кремний).

Мишени 1-го типа были исследованы на предыдущих этапах исполнения проекта РНФ; ссылки [1-9] в списке дополнительной литературы к разделу 1.3 годового отчета. Мишени 2-го типа стали актуальны благодаря экспериментальным работам наших коллег из ИАП ДВО РАН (Институт автоматики и процессов управления, Владивосток) и ДВФУ (Дальневосточный федеральный университет). Изготовление свободновисящей пленки требует технологического мастерства. Схема поддержки свободновисящих ультратонких участков пленки золота на крестовых отверстиях в гораздо более толстой пластинке из титана показана на рис. 1 к разделу 1.3 в приложенном к отчету файле. Там же приведены соответствующая постановка задачи со стороны эксперимента и результаты опытов. Эта часть совместных работ находится в процессе подготовки к публикации. Теоретические результаты частично опубликованы в статье [8-9], см. п. 1.7. Эти результаты вошли в годовой отчет РНФ по проекту за 2018-й год. Они

показаны на рис. 2 к разделу 1.3.

В работах [8-9] п.1.7 описана динамика поглощения, последующего плавления и расширения свободновисящей пленки. Учтены сложные трехмерные эффекты – картина эволюции пленки после лазерного воздействия, показанная на рис. 2 к разд.1.3, это 3D картина – нет даже осевой симметрии течения. Осевая симметрия нарушается из-за спонтанных тепловых флуктуаций, заметных на наших очень малых пространственно-временных микро масштабах. Два левых рисунка на рис. 2 к 1.3 дают вид сверху – по оси лазерного луча. На двух правых рисунках на рис. 2 к 1.3 показано сечение пленки. Это сечение проходит через ось лазерного пучка. Верхние два рисунка на рис. 2 к 1.3 представляют момент времени, предшествующий двум нижним рисункам. На верхних двух рисунках две половинки пленки, образовавшиеся после разрыва пленки, продолжают удаляться друг от друга. На нижней паре рисунков половины пленки движутся назад, навстречу друг другу. Переход от разлета к режиму возвращения происходит под действием капиллярной энергии расплава золота. Капли жидкой фазы золота внутри полости из двух половинок (внутри оболочки) сформировались при распаде слоя пены в расплаве. В режиме возвращения все эти капли перехватываются жидкой оболочкой. При этом прорыва оболочки нет.

Зеленым цветом показана затвердевшая фаза, красным – расплав. Фронт кристаллизации движется по половинкам пленки по направлению к оси – к центру. Постепенное замораживание пленки (происходит на наносекундных масштабах времени) связано с отводом тепла из горячего пятна, нагретого лазером, на холодную периферию пленки. Возникает сложнейшая картина, в которой жидкая фаза кристаллизуется и теряет свою растяжимость, а еще жидкая пленка продолжает участвовать в капиллярно-инерционном движении под действием сил инерции и поверхностного натяжения. Чрезвычайно интересной является поликристаллическая фаза, в которую переходит затвердевшая пленка. Кристаллиты имеют форму уплощенных сильно вытянутых в радиальном направлении пластинок, см. [8-9] в п.1.7. Такого же рода кристаллиты наблюдались в опытах, см. рис. 4 в статье [10] в списке доп.лит. к разделу 1.3.

В работе [11] в п.1.7 был детально изучен случай достаточно толстых пленок. Поясним, чем толстые пленки отличаются от тонких. Речь идет о воздействии ультракороткого импульса, т.е. лазерного импульса фемтосекундной – пикосекундной длительности (от 10 фс до 1 пс). В тонкой пленке с толщиной сопоставимой с толщиной скин-слоя до толщины в несколько скин-слоев прогрев на указанную толщину происходит за время порядка времени двухтемпературной релаксации в металле. Это время порядка пикосекунды. В случае золота это время составляет до 10 пс. Обозначим толщину быстро прогреваемого слоя  $dT$ . Тонкими называем пленки, которые тоньше, чем  $dT$ . В них акустический масштаб времени  $t_s = df/cs$  превышает время создания (т.е. прогрева) теплового слоя  $dT$ ; здесь и далее  $t_s$  – это время, за которое звук пробегает пленку толщиной  $df$ ,  $cs$  – скорость звука в материале пленки. Тогда нет волн сжатия внутри пленки на стадии расширения пленки; только потом, когда пленка перерасширится, появляются слабые волны сжатия. Все режимы движения тонких пленок на подложках проанализированы в статьях [1-9] в списке дополнительной литературы к разделу 1.3.

В толстых пленках ситуация иная; [11] в п.1.7 с публикациями по отчету. Здесь быстро (в сравнении с  $dT/cs$ ) за время двухтемпературной релаксации создается нагретый слой  $dT$  у поверхности. Затем на временах  $dT/cs$  формируется волна сжатия и следующая за ней волна разрежения. Эта пара связанных волн распространяется из слоя  $dT$  в объем пленки.

Если в тонких пленках пространственное распределение энтропии примерно однородно (по толщине), то в толстых пленках возникает резко неоднородное распределение энтропии. Имеется горячий высоко-энтропийный слой  $dT$  у поверхности и относительно холодная остальная часть пленки; волна сжатия выходит из слоя нагрева  $dT$ , трансформируется в ударную волну; ударная волна диссипативно нагревает остальную часть, но нагрев этот мал в сравнении с нагревом вещества в высоко-энтропийном слое  $dT$ . Далее пара волн сжатие/разрежение проходит среднюю часть пленки, подходит к краю пленки и отражается от границы с газом. Этот процесс при достаточной амплитуде (а амплитуды, рассмотренные нами, соответствуют эксперименту [11,12 доп.лит к 1.3] и велики) приводит к разрушению вещества у границы с газом. Такое явление в конденсированных средах называется отколом. Таким образом, возникает и задача о расширении высоко-энтропийного слоя  $dT$  в подложку пленки, и задача о фрагментации, приводящей к отколу, отрыву и выбросу части (или всего) вещества пленки в газ. Отметим, что на ранних и средних стадиях (до формирования пузырька в жидкости) расширение плотного высоко-энтропийного слоя  $dT$  в конденсированную подложку пленки эквивалентно расширению (абляции) металла в жидкость; нет большой разницы между веществом подложки и жидкостью: и те, и те принимают и тормозят разлет продуктов абляции.

В работе [11] в п.1.7 с помощью теории и численного моделирования описаны экспериментальные данные, полученные в работах [11,12], см. доп.лит к 1.3. В [11,12] авторы видят и струю, летящую в газ, и обнаруживают купол на пленке. Это показано на рисунках 3 и 4 к разд.1.3; рисунки заимствованы из статей [11,12], см. доп.лит к 1.3.

На рисунках 3 и 4 к разд.1.3 показаны три варианта воздействия на расплавленную пленку меди с относительно (1) малым, (2) средним и (3) большим вложением энергии  $Fabs$ . Вложениям 1, 2 и 3 соответствуют рисунки а, б, в. В первых двух на поверхности остается куполообразное формирование. На рис. (в) в пленке остается сквозное отверстие. При



этом во всех трех случаях из пленки вылетает струя, примеры а, b, с:

а -> d, b -> e, c -> f

Из-за намного большей толщины пленки и намного большего вложения энергии в опытах [11,12] (доп.лит к 1.3) (по сравнению с ситуациями рассмотренными в [1-9] в доп.лит. к 1.3) вылетают гораздо более крупные капли, чем в [1-9]; хотя пятно воздействия примерно такое же, как в [1-9], фокусировка на дифракционном пределе, см. риску – пространственный масштаб 2 мкм на рис. а, b, с на рис. 3,4 к разд.1.3. Регулировка массы капли важна для приложений в лазерной печати (LIFT – laser induced forward transfer).

Существенно то, что в отчетной работе [11] в п.1.7 детально проанализирован случай с субнаносекундным импульсом. Его длительность на три порядка превышает длительности импульсов, рассмотренных на предыдущих этапах выполнения проекта РНФ 14-19-01599.

((2,3)) Фазовые пластинки и вихревые пучки электромагнитного излучения. Термомеханические эффекты при интерференции ЭМ волны и плазмонного поля, запись голограмм.

Создана программа расчета поглощения излучения, диссипативного нагрева и внесения углового момента в скин-слой облучаемого металла под действием вихревого пучка. Она необходима для моделирования структуры последующего течения.

Выполнены расчеты диссипации энергии электромагнитного поля, которое получается комбинированием лазерного излучения и поля поверхностной плазмон-поляритонной волны. Соответствующие графики, взятые из публикаций [4-6] к разделу 1.7 отчета, показаны на рисунках 5, 6, 7 и 8 к разделу 1.3 отчета.

На рис. 5/1.3 показана схема опыта/постановка задачи. Лазерный пучок расщепляется делителем (находится вне схемы на рис. 5/1.3) на два пучка, один из которых проходит через стекло призмы Кречманна (laser 1 на рис. 5/1.3). Второй пучок освещает пленку сверху (laser 2 на рис. 5/1.3). Так достигается синхронизация во времени короткоимпульсных пучков лазеров 1 и 2, см. статьи [4-6] в списке литературы к п. 1.7. Пятна освещения 1 и 2 разнесены на пленке. Расстояние между пятнами не слишком велико, чтобы поверхностная плазмон-поляритонная (ППП) волна, выбегающая из пятна лазера 1, не затухла до того, как она достигнет пятна 2, см. рис. 6/1.3 (а).

На рис. 6/1.3 представлены три панели (а), (b) и (с). На первой из них (а) показано распределение интенсивности электромагнитных (ЭМ) волн (лазера и ППП) от лазера 1, см. развернутую подпись к рис. 6/1.3 (а). На средней панели (b) показано поле лазера 2. Наконец на нижней панели рис. 6/1.3 (с) приведено суммарное поле: лазер 1, ППП волна и лазер 2. Поле лазера 2 на рис. 6/1.3 (b) складывается из ЭМ полей падающей и отраженной волн. Коэффициент отражения близок к единице. Поэтому сумма ЭМ полей падающей и отраженной волн похожа на стоячую волну с максимумами и минимумами. Ими являются чередующиеся светлые и темные полосы на рис. 6/1.3 (b), расстояние между которыми порядка длины волны.

Результат интерференции описан в подписи под рис. 6/1.3 (с), см. также рисунки 7/1.3 и 8/1.3. Важно то, что перераспределение энергии нагрева пленки лазерными пучками 1 и 2 в стоячей волне на рис. 6/1.3 (с) является значимым. Т.е. амплитуда воздействия и температура нагрева на горячих отрезках стоячей волны достаточны для профилирования пленки.

Как говорилось выше, комбинированное (ЭМ плюс ППП) поле создает модулированное распределение мощности диссипации  $Q$  внутри пленки, см. рисунки 6 (с), 7 и 8/все 1.3. Эта мощность нагрева действует в течение времени действия лазерного импульса пучков 1 и 2 (пучки синхронизированы, длительность – несколько пикосекунд). Электронная теплопроводность размазывает распределение  $Q$  по толщине пленки. Т.е. за время порядка пикосекунды (сравнимое с длительностью импульса) распределение  $Q$ , показанное на рисунках 6 (с), 7 и 8/1.3, расплывается по толщине пленки. Но это распределение не успевает размазаться по длине волны модуляции вдоль поверхности пленки за промежуток времени порядка акустического масштаба времени. Это важно для последующего отпечатывания модуляции нагрева в пространственную модуляцию рельефа пленки (в этом заключается изготовление голограмм).

Что такое акустический масштаб времени? За это время звук пробегает по толщине пленки от одной границы пленки до другой границы. Это время равно  $t_s = df/cs$ , где  $df$  – толщина пленки (f-film) 80 нм,  $cs$  – скорость звука в золоте – примерно 3 км/с, соответственно  $t_s$  около 30 пс. За время порядка 30 пс температура пленки не успевает выровняться по длине модуляции около 1 мкм, см. рис. 8/1.3. Время выравнивания по длине модуляции  $\lambda$  порядка  $(\lambda/2)^2/4/\chi \sim 1$  нс, здесь  $\chi$  – это коэффициент температуропроводности расплавленного золота.

Следовательно, на акустическом масштабе времени, на котором происходит сепарация (механический «отскок») пленки от подложки (стекло призмы), действует неоднородность нагрева вдоль поверхности пленки. Поэтому скорость отскока разная вдоль длины модуляции. Вследствие этого относительно медленно, на временах порядка десятка наносекунд, развивается гофрировка пленки – горячие отрезки поднимаются над поверхностью подложки, а холодные остаются на подложке.

На этих же временах происходит охлаждение пятна нагрева лазером 2 на рисунках 5 и 6/1.3 (с) за счет вывода тепла

из пятна нагрева на холодную периферию пленки. Гофрированная поверхность ре-кристаллизуются и останавливается – голограмма изготовлена. Описанию совместного решения электродинамической, гидродинамической и теплофизической задач с фазовыми переходами (плавление, кристаллизация) и динамикой деформируемого твердого тела посвящены статьи [4-6] из списка в разделе 1.7.

((4)) Мягкий рентген, косое падение, кольца Ньютона и построение интерферометрических изображений – расшифровка эксперимента.

((6)) Рентгеновская и оптическая абляция рутения

Пункты 4 и 6 объединены, поскольку в значительной мере относятся к рентгену. За отчетный период усовершенствована программа построения интерференционных колец Ньютона. Она применяется как для рентгеновской оптики, так и для диапазона оптического излучения. За 2018-й год в коллективе создан потенциал межатомного взаимодействия для рутения, который в нормальном состоянии имеет кристаллическую решетку типа ГПУ. Это многочастичный потенциал, который аппроксимирует взаимодействие атомов с помощью модели погружённого атома (англ. embedded atom model, сокращенно EAM). Разработанный потенциал правильно описывает механические и теплофизические характеристики рутения.

Проведены серии двухтемпературных гидродинамических расчетов для описания экспериментов с рутением. Нами разработана двухтемпературная физическая модель рутения. Она включает в себя аппроксимацию двухтемпературного уравнения состояния (2Т-УрС), см. [15]/1.7. Нами вычислен коэффициент электрон-фононного взаимодействия  $\alpha$ . Кроме того, создана аппроксимация коэффициента теплопроводности  $\kappa$  в двухтемпературных состояниях (2Т- $\kappa$ ). Расчеты двухтемпературных характеристик базируются на вычисленном в работе по проекту электронном спектре рутения (показан на рис. 9 к разделу 1.3).

Наличие 2Т-УрС и коэффициентов  $\alpha$  и 2Т- $\kappa$  позволяет нам вести количественное моделирование последствий воздействия на мишени рутения (пленочные и объемные) лазерных импульсов ультракороткой длительности, применяя усовершенствованный нами двухтемпературный гидродинамический (2Т-гд) код [15]/п.1.7. С помощью EAM в рамках проекта проводятся молекулярно-динамические (МД) расчеты динамики лазерного воздействия. Мы комбинируем результаты МД и 2Т-гд расчетов, чтобы уточнить детали. Для 2Т-гд расчетов термомеханической абляции рутения фемтосекундным импульсом особое значение имеет зависимость прочности при растяжении как функции от температуры и темпа растяжения. Эту функцию мы определили путем МД моделирования.

Рутений важный материал в технологиях, связанных с применением мягкого рентгена в промышленности. Это тугоплавкий ( $T_m=2607$  К) химически весьма инертный металл. Используется в рентгеновских зеркалах косого падения или как защитная пленка, прикрывающая многослойные зеркала. Такие зеркала входят в оптические системы фотолитографических машин будущего, работающих на вакуумном ультрафиолете/мягком рентгене (энергия фотона 90 эВ, длина волны 13.5 нм). Пленка предохраняет зеркала от повреждения интенсивными продолжительными радиационными потоками и от загрязнения потоками нейтралов и ионов, идущими от плазменного источника излучения, см. также ниже пункт ((5)) отчета, посвященный лазерному дроблению микрокапель олова в источнике излучения для фотолитографии.

В науке и технологиях используется ряд современных лазеров на мягком и жестком рентгене. Это либо лазеры на свободных электронах, либо лазеры на переходах в высокоионизованной плазме. Вот некоторые из таких машин: когерентный источник на линейном ускорителе Linac в Стэнфорде [13]-список лит. к разделу 1.3; SwissFEL в Швейцарии <https://www.psi.ch/swissfel/>; SACLA в Японии, префектура Хиого, RIKEN [14]/разд.1.3; FERMI@Elettra FEL [15]/1.3 фемтосекундный лазер для генерации фотонных пучков мягкого и жесткого рентгена на синхротроне в Триесте <https://www.elettra.trieste.it/lightsources/fermi.html>; DESY в Гамбурге <http://www.desy.de/>. Крупнейшими являются SACLA, DESY и LCLS (Linac Coherent Light Source/SLAC).

Примером лазера, активно используемого для нагрева и диагностики в мягком рентгене/ВУФ (вакуумный ультрафиолет, 89.3 эВ, 13.9 нм), является машина на переходе в высокозарядных ионах серебра (19+) в плазменной колонке, созданной оптическим лазером. Она излучает импульс вдоль оси колонки длительностью 7 пс, с малой угловой расходимостью и когерентностью 10-4. Эта машина создана и применяется [16]/разд.1.3 в Kansai Photon Science Institute, Department of Advanced Photon Research, X-ray Laser Group, Group Leader Dr. M. Nishikino <http://www.kansai.qst.go.jp/kpsi-en/organization-1-2.html>.

((5)) Лазерная фрагментация капель

В интересах фотолитографии следующего поколения разрабатывается источник мягкого рентгена/вакуумного ультрафиолета (англ. EUV – extreme ultraviolet и EUVL – EUV Lithography, 13.5 нм) на основе плазмы олова («оловянная лампочка»). Один из разработчиков – компания ASML, см. интернет. Уже созданы (ASML) экспериментальные EUV системы TWINSKAN NXE с разрешением 38-19 нм для печати изделий наноэлектроники.

Об оловянной лампочке. Перевод олова в плазменное состояние осуществляется в два приема. Во-первых, лазерным ударом микро-капля диаметром порядка 50 мкм фрагментируется на наноклапты. Микро-капля сбрасывается дозатором в фокусное пятно первого лазера. Во-вторых, облако наноклапель облучается мощным вторым лазерным импульсом, который переводит жидкое олово в горячее плазменное состояние, излучающее на длине волны 13.5 нм.

В работе по проекту решена проблема фрагментирования микро-капли первым лазером. Это важно, поскольку для оптимизации работы источника необходимо знать параметры облака и составляющих его наноклапель. Результаты представлены в статье [1], перечисленных в списке работ в п. 1.7, входящих в отчет по проекту. Распространение волн сжатия и разрежения, растяжение жидкого олова в волнах разрежения, и кавитация в растянутом веществе показаны на примере расчета на рис. 10/к разд. 1.3.

Проведенные исследования проходили в несколько этапов. Была создана двухтемпературная модель олова, включавшая уравнение состояния и кинетические коэффициенты. Был разработан межатомный потенциал жидкого олова. Были выполнены одномерные гидродинамические расчеты и молекулярно-динамическое (МД) моделирование, с помощью МД была определена динамическая прочность расплава олова в процессах быстрого растяжения (это важно для аккуратного расчета фрагментации методом SPH). Далее было проведено трехмерное численное моделирование с использованием разработанного в отчетном году алгоритма (применение сетки Вороного) и комплекса программ SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) для многопроцессорного моделирования, см. отчетную работу [16] в списке публ. 1.7 за 2018-й год по отчету. Новый алгоритм позволил использовать в расчетах на суперкомпьютерах миллионы SPH-частиц. Таким образом, было получено описание сложнейшего иерархического процесса лазерного дробления микро-капли. Наглядное представление можно получить, просматривая киноматериалы, приложенные к работе [2]/п. 1.7.

#### ((7)) Формирование наночастиц при абляции золота в воду

За отчетный период выполнена очень большая работа по анализу лазерной абляции в жидкость. Это важная фундаментальная и технологическая задача. В фундаментальном плане задача интересна тем, что принципиально отличается от абляции в газ или вакуум. Приложения в подробно описаны в недавних обширных обзорах [18,19] (список доп.лит.к разделу 1.3). Приложений много, они в фотонике, химиндустрии (катализ), медицине (доставка лекарств), энергетике и экологии.

Выполнены крупномасштабные молекулярно-динамические (МД) и гидродинамические (2Т-гд) расчеты. Для таких расчетов разработан потенциал взаимодействия частиц воды, см. сайт <https://www.researchgate.net/project/Development-of-interatomic-EAM-potentials>. 2Т-гд код дополнен алгоритмами, позволяющими учесть теплопроводность воды. Используется широкомасштабное уравнение состояния золота, полученное от наших коллег в ИВТАНе, лаборатория К.В. Хищенко [20-22], см. доп.лит.в конце раздела 1.3. Для воды сначала применялась политропная зависимость  $p(\rho)$ , в качестве которой мы брали адиабату Гюгонио воды по данным [22]/1.3. В настоящее время мы перешли к использованию уравнения состояния в форме Ми-Грюнайзена согласно работе [23]/1.3. Это позволяет описать переход в слое горячей воды (у контакта между газообразным золотом и водой) от ударно сжатого состояния к двухфазному состоянию пар-жидкость под бинодалью воды.

Результаты, полученные при работе по проекту РФФИ по разделу LAL (laser ablation in liquid), вошли в статьи [10-12]/п. 1.7. Анализ расчетов показывает, что при умеренных значениях поглощенных мишенью энергий, крупные (десятки нм) первичные наночастицы (НЧ) (при последующих взаимодействиях НЧ они могут образовывать агрегаты из-за слипания НЧ, кроме того, происходят реакции на поверхности НЧ) образуются вследствие развития неустойчивости Релея-Тейлора. Соответствующая ситуация показана на рис. 11 к разделу 1.3.

Механизм формирования мелких первичных НЧ другой. Горячий металл испаряется в жидкость (растворяется в жидкости) через границу контакта. Далее атомы металла диффундируют в слое жидкости возле границы. Кроме того, атомы перемещаются вместе с жидкостью при развитии релей-тейлоровской неустойчивости (рост пузырей и струй и конвекция вокруг них). В жидкости температура существенно ниже, чем в горячем металле возле контакта. Поэтому начинается конденсация атомов металла в кластеры. Рост и слияния кластеров приводят к формированию первичных НЧ с диаметрами порядка нанометров. Сказанное проиллюстрировано на рис. 11 к разделу 1.3. Если приглядеться, то в воде в водных пузырях можно заметить атомы золота и кластеры из атомов.

#### ((8)) Проверка двухтемпературной теплофизической модели тантала

В течение 2018 года ситуация изменилась. Не нашлось коллег в опытах, которые приняли бы на себя проверку расчетов по танталу. Поэтому вместо тантала были построены аналогичные двухтемпературные физические модели для рутения и молибдена. Работа по рутению нужна в связи с рентгеновскими экспериментами, в которых исследователи, работающие с нами, должны уточнить вопросы о повреждаемости рутения под действием радиационных потоков и потоков нейтралов и ионов относительно невысоких скоростей. Об этом выше написано в пункте отчета номер ((6)). О работе по молибдену скажем в следующем пункте.

((9)) Ультратонкие пленки молибдена

По этой теме наша работа ведется совместно с нашими коллегами-экспериментаторами из Lasercenter Munich, University of Applied Sciences. Т.е. деятельность эта не только интересна в фундаментальном плане, но и востребована прикладниками. Они занимаются молибденом, поскольку имеют заказ на разработку инструмента для лазерной резки коллекторных электродов солнечных панелей. Эти электроды делаются из молибдена.

За отчетный период была создана двухтемпературная модель молибдена. Сначала с использованием квантово-механических DFT (density functional theory) вычислений были рассчитаны электронные спектры молибдена. Далее на этой основе были разработаны уравнения состояния и кинетические коэффициенты. Указанные данные были включены в программу по гидродинамическому расчету динамики пленки из молибдена. Была усовершенствована программа расчета изображений при воздействии по схеме pump-probe.

((10)) Дополнительные результаты, полученные в 2018 г. в рамках проекта РФФ

Кроме перечисленных выше, за отчетный год было получено много новых результатов по нескольким направлениям.

Важно то, что был доведен до совершенства многомерный гидродинамический код SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics). Разработан и введен в действие многопроцессорный вариант кода. Этот вариант опирается на разбиение расчетной области на многогранники Вороного, см. статью [16] в списке отчетной лит. в п. 1.7. Причем это разбиение не фиксированное, а так сказать, «плавающее». Имеется автобалансировка по процессорам (каждый процессор берет на себя один многогранник). Автобалансировка помогает в разы экономить вычислительные ресурсы при расчетах задач со сложной геометрией, например, когда имеются пены, или происходит отделение частиц или струй.

Почему это важно? Дело в том, что теперь мы используем этот эффективный высокопроизводительный код при решении многих поставленных перед коллективом задач. SPH код с успехом заменяет молекулярно-динамическое (МД) моделирование в задачах с большими пространственно-временными объемами. Как известно, МД код не может выйти за пределы порядка кубического микрона и десятков наносекунд.

С помощью SPH кода получены важные результаты, описывающие волны сжатия в хрупких керамиках, см. статью [2] в списке отчетной лит. в п. 1.7.

SPH код был применен для анализа проблемы об аблиции в воду.

С использованием SPH подхода решена трудная задача об инициации детонации, см. статью [14] в списке отчетной лит. в п. 1.7. В настоящее время решается проблема о волнах сжатия в пористых средах.

Именно с применением SPH кода было проведено исследование дробления микро-капли лазерным воздействием, описанное в разделе ((5)) выше, см. рис. 10/1.3 и статью [1] в списке отчетной лит. в п. 1.7.

Принципиальные результаты, относящиеся к пониманию сущности процессов испарения и конденсации, разработаны в статье [3] в списке отчетной лит. в п. 1.7. Выяснение тонких деталей в этих вопросах важно для работы над задачами о лазерном воздействии.

Подход с применением конечных элементов использован в работе [7] в списке отчетной лит. в п. 1.7. В результате удалось решить практически значимую задачу об инициации разложения в отдельных случайных точках при использовании взрывчатого вещества из насыпки мелких кристаллитов при низкоскоростной инициации.

Важной для наших исследований аблиции является работа [13] из списка отчетной лит. в п. 1.7. В ней изучаются транспортные коэффициенты металлов в горячих сильно расширенных состояниях.

Список дополнительной литературы к разделу 1.3 годового отчета

[1] Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, Формирование наноразмерных струек и капель ультракоротким лазерным импульсом при фокусировке на дифракционном пределе, Письма ЖЭТФ 100 (1), 6-12 (2014). Свободный доступ: [http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2048/article\\_30838.shtml](http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2048/article_30838.shtml)

[N.A. Inogamov and V. V. Zhakhovskii, Formation of Nanojets and Nanodroplets by an Ultrashort Laser Pulse at Focusing in the Diffraction Limit, JETP Lett. 100, (1), 4-10 (2014).] <https://doi.org/10.1134/S0021364014130050>

[2] Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, В.А. Хохлов, Струеобразование при отрыве металлической пленки от подложки в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса, ЖЭТФ 147 (1), 20-56 (2015). Свободный доступ: DOI: 10.7868/S0044451015010034

[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) 120(1), 15-48 (2015).] <https://doi.org/10.1134/S1063776115010136>

[3] П.А. Данилов, Д.А. Зяряный, А.А. Ионин, С.И. Кудряшов, А.А. Руденко, А.А. Кучмижак, О.Б. Витрик, Ю.Н. Кульчин, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, Перераспределение материала при фемтосекундной лазерной аблиции тонкой серебряной

- пленки, Письма в ЖЭТФ 104(11), 780-786 (2016). Свободный доступ:  
[http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2142/article\\_32140.shtml](http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2142/article_32140.shtml)
- P.A. Danilov, D.A. Zayarny, A.A. Ionin, S.I. Kudryashov, A.A. Rudenko, A.A. Kuchmizhak, O.B. Vitrik, Yu.N. Kulchin, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, Redistribution of a Material at Femtosecond Laser Ablation of a Thin Silver Film, JETP Lett. 104(11), 759-765 (2016). <https://doi.org/10.1134/S0021364016230077>
- [4] A. Kuchmizhak, O. Vitrik, Yu. Kulchin, D. Storozhenko, A. Mayor, A. Mirochnik, S. Makarov, V. Milichko, S. Kudryashov, V. Zhakhovsky, N. Inogamov, Laser printing of resonant plasmonic nanovoids, *Nanoscale* 8, 12352-12361 (2016). DOI: 10.1039/C6NR01317A
- [5] N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, and K. P. Migdal, Solitary Nanostructures Produced by Ultrashort Laser Pulse, *Nanoscale Research Letters* 11, 177 (2016). DOI 10.1186/s11671-016-1381-1
- [6] 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* 122, 432 (9 pages) (2016). DOI 10.1007/s00339-016-9942-9
- [7] N. A. Inogamov and V. V. Zhakhovsky, Surface 3D nanostructuring by tightly focused laser pulse: simulations by Lagrangian code and molecular dynamics, *J. Phys.: Conf. Series* 681, 012001 (2016). Open access doi:10.1088/1742-6596/681/1/012001
- [8] С.И.Анисимов, В.В.Жаховский, Н.А.Иногамов, С.А.Мурзов, В.А.Хохлов, О формировании и кристаллизации жидкой струи, возникающей при воздействии на пленку остророфокусированным лазерным пучком, *Квантовая электроника*, т. 47, № 6, 509-521 (2017)
- S.I. Anisimov, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, S.A. Murzov, V.A. Khokhlov, "Formation and crystallisation of a liquid jet in a film exposed to a tightly focused laser beam," *Quantum Electronics* 47 (6) 509 – 521 (2017)
- [9] 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*, 8, 044016 - 1–17 (2017). <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.8.044016>
- [10] П. А. Данилов, Д. А. Заярный, А. А. Ионин, С. И. Кудряшов, Ч. Т. Х. Нгуен, А. А. Руденко, И. Н. Сараева, А. А. Кучмижак, О. Б. Витрик, Ю. Н. Кульчин, "Структура и механизмы лазерного формирования микроконусов на поверхности серебряных пленок варьированной толщины", Письма в ЖЭТФ, 103:8 (2016), 617–621; JETP Letters, 103:8 (2016), 549–552
- [11] 7. Q. Li, A. P. Alloncle, D. Grojo, and P. Delaporte, Generating Liquid Nanojets from Copper by Dual Laser Irradiation for Ultra-High Resolution Printing, *Opt. Express* 25, 24164 (2017).
- [12] Q. Li, A. P. Alloncle, D. Grojo, and P. Delaporte, Laser-induced nano-jetting behaviors of liquid metals, *Appl. Phys. A* 123, 718 (2017).
- [13] C. Bostedt, S. Boutet, D. M. Fritz, Z. Huang, H. J. Lee, H. T. Lemke, A. Robert, W. F. Schlotter, J. J. Turner, and G. J. Williams, Linac coherent light source: the first five years, *Rev. Mod. Phys.* 88, 015007 (2016).
- [14] D. Pile, "X-rays: first light from SACLA," *Nat. Photonics* 5, issue 8, 456–457 (2011). DOI: 10.1038/nphoton.2011.178
- [15] E. Allaria, C. Callegari, D. Cocco, W. M. Fawley, M. Kiskinova, C. Masciovecchio, and F. Parmigiani, "The fermi@elettra free-electron-laser source for coherent x-ray physics: photon properties, beam transport system and applications," *New J. Phys.* 12, 075002 (2010).
- [16] N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Ishino, N. Ohnishi, A. M. Ito, Y. Minami, M. Baba, A.Y. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, K. Kondo, and T. Suemoto, The Observation of Transient Thin Film Structures During the Femto-Second Laser Ablation Process by Using the Soft X-Ray Laser Probe, Chapter 40, pp. 273-277. Springer Proceedings in Physics, Volume 202. X-Ray Lasers 2016, Proceedings of the 15th International Conference on X-Ray Lasers, Kawachi, T., Bulanov, S.V., Daido, H., Kato, Y. (Eds.)
- [17] Ю.В. Петров, Н.А. Иногамов, К.П. Мигдал, Теплопроводность и коэффициент электрон-ионного теплообмена в конденсированных средах с сильновозбужденной электронной подсистемой, Письма ЖЭТФ 97, сс. 24-31 (2013).
- [18] D. Zhang, B. Goekce, and S. Barcikowski, *Laser Synthesis and Processing of Colloids: Fundamentals and Applications*, *Chem. Rev.* 117, No. 5, pp. 3990-4103 (2017).
- [19] 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* v. 87, 140-220 (2017)  
<http://dx.doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.02.004>
- [20] A. V. Bushman, V. E. Fortov, G. I. Kanel, and A. L. Ni, *Intense Dynamic Loading of Condensed Matter* (Taylor and Francis, London, New York, 1993).
- [21] K. V. Khishchenko, S. I. Tkachenko, P. R. Levashov, I. V. Lomonosov, and V. S. Vorobev, *Int. J. Thermophys.* 23, 1359 (2002).
- [22] <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/>  
<http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>
- [23] Nigmatulin, R. I. and Bolotnova, R. Kh., Wide-range equation of state of water and steam: Simplified form, *High Temperature*, 49, No. 2, 303-306 (2011). Doi 10.1134/S0018151X11020106

**Все планируемые на год работы выполнены полностью:**

да

#### **1.4. Сведения о достигнутых конкретных научных результатах в отчетном году**

*(до 5 стр.)*

((1)) 3D эффекты, плавление/испарение/рекристаллизация, произвольная длительность лазерного импульса  
Выполнен сравнительный анализ воздействия ультракоротких импульсов на тонкие пленки металлов для двух типов мишеней. В первом типе мишеней тонкая пленка напылена на «толстую» (порядка 100 мкм) диэлектрическую подложку. Мишени второго типа образуют свободновисящие пленки, т.е. пленки толщиной десятки нанометров, у которых обе поверхности пленки являются свободными; на свободной границе металл контактирует с вакуумом или газом; для пленки 1-го типа одна граница свободная, а вторая – это контакт двух конденсированных сред: металла и диэлектрика/полупроводника (стекло или кремний).

Мишени 1-го типа были исследованы на предыдущих этапах исполнения проекта РФФ; ссылки [1-9] в списке дополнительной литературы к разделу 1.3 годового отчета. Мишени 2-го типа стали актуальны благодаря экспериментальным работам наших коллег из ИАП ДВО РАН (Институт автоматики и процессов управления, Владивосток) и ДВФУ (Дальневосточный федеральный университет). Изготовление свободновисящей пленки требует высокого технологического совершенства. Анализ ситуации со свободновисящими пленками приведен в отчетной статье [8], см. п. 1.7.

В отчетной статье [9] в п.1.7 детально проанализирован случай с субнаносекундным импульсом и толстой пленкой. Наша работа [9] в п.1.7 позволяет понять результаты сложных (сложность: двойной импульс, предварительное плавление пленки, средства диагностики: в полете и финальные средства микроанализа) опытов, выполненных в лаборатории LP3 (the Lasers, Plasmas and Photonic Processes); эта лаборатория является объединенной исследовательской единицей университета в Марселе и CNRS. Результаты этих опытов опубликованы в работах [11,12] (доп.лит к 1.3). Исследования ведутся в интересах оптимизации устройств лазерной печати; LIFT – laser induced forward transfer. Такая печать важна для создания изделий микроэлектроники, наноплатоники (например, печатание массива нано-антенн) и биологии (печать тканей, например, кожи и костной ткани).

((2,3)) Фазовые пластинки и вихревые пучки электромагнитного излучения. Термомеханические эффекты при интерференции ЭМ волны и плазмонного поля, запись голограмм.

Выполнены электродинамические расчеты диссипации в скин-слое энергии электромагнитного (ЭМ) поля, которое получается комбинированием излучения двух лазерных пучков и поля поверхностной плазмон-поляритонной (ППП) волны. В качестве мишени используется пленка золота, напыленная на грань стеклянной призмы в конфигурации Кречманна. Суммарное ЭМ и ППП поле создает модулированное распределение мощности диссипации вдоль поверхности пленки. Пространственная модуляция мощности связана с интерференцией ЭМ и ППП волн и возникновением стоячей волны. В пучностях волны образуются горячие участки поверхности пленки, а в узлах волны остаются ненагретые участки. Совместно с электродинамическим этапом выполняются теплофизический и гидродинамический расчеты, см. статьи [4-6] в списке п. 1.7.

Наш тепло-гидродинамический подход учитывает фазовые переходы первого рода и капиллярные эффекты в расплаве металла. За счет быстрого плавления на горячих участках нагрева пленки, пленка «отскакивает» от подложки (деламинация). Последующее затвердевание расплава формирует гофрированный рельеф на поверхности пленки. Дело в том, что искривленные участки пленки (гофры) не успевают вернуться назад в плоское состояние (гофры не успевают распрямиться) из-за кристаллизации.

Подход основан на разделении времен, поскольку импульс нагрева короткий. Решение электродинамической задачи дает нам распределение энтропии по поверхности пленки, смещения не успевают произойти за время нагрева. Движение, смещения, развитие гофр вместе с игрой капиллярных сил вкпе с рекристаллизацией рассматривается после выполнения электродинамического моделирования, см. статьи [4-6] в списке п. 1.7.

Создана программа расчета поглощения излучения, диссипативного нагрева и внесения углового момента в скин-слой облучаемого металла под действием вихревого пучка. Она необходима для моделирования структуры последующего течения.

((4)) Мягкий рентген, косое падение, кольца Ньютона и построение интерферометрических изображений – расшифровка эксперимента.

((6)) Рентгеновская и оптическая абляция рутения

Выполнен широкий спектр работ в рамках гранта РФФИ по указанному направлению. Логически связанные (результаты этапа опираются на результаты предыдущего этапа, этапы образуют последовательную цепочку) этапы были следующие.

Применение квантово-механических DFT (density functional theory) подходов для определения параметров ГПУ (гексагональная плотноупакованная) решетки рутения Ru (постоянная решетки, отношение  $c/a$ ) в зависимости от сжатия/растяжения. Использовался пакет VASP. Построены: холодная кривая  $p(\rho)$ , электронные спектры в зависимости от плотности и электронной температуры: зависимость плотности  $g$  электронных состояний (DoS – density of states) от энергии  $g(E; \rho, T_e)$ , см. рис. 9/разд.1.3.

Определен многочастичный EAM (метод погруженного атома, embedded atom model) потенциал взаимодействия атомов Ru. Подгонка параметров потенциала осуществлялась программой симплекс путем поиска соответствия (1) холодной кривой из DFT и (2) табличным коэффициентам (энергии образования вакансий, дефектов решетки в виде междоузельных атомов, коэффициенту теплового расширения и др.), а также (3) температуре тройной точки. В результате создан EAM потенциал, который с высокой точностью воспроизводит все известные данные и в широком диапазоне плотностей (особенно в сторону растяжения) и температур. Далее (т.е. на следующих этапах выполнения работ) это позволило проводить надежные молекулярно-динамические (МД) расчеты, которые важны и сами по себе, и для подготовки данных по прочности рутения для двухтемпературных гидродинамических расчетов.

На основе вычисленных с помощью DFT/VASP электронных спектров  $g(E; \rho, T_e)$  было создано (i) двухтемпературное уравнение состояния рутения  $p(\rho, T_e, T_i)$ ,  $E(\rho, T_e, T_i)$ , см. отчетную публикацию [15]/п.1.7. Ионная часть этого уравнения записана в аппроксимации Ми-Грюнаизена. С помощью спектра  $g(E; \rho, T_e)$  и приемов расчета кинетических коэффициентов ([17], список дополн. лит. к разделу 1.3) были определены (ii) коэффициент  $\alpha(T_e)$  обмена энергией между электронной и ионной подсистемами и (iii) коэффициент электронной теплопроводности в двухтемпературных условиях  $\kappa(\rho, T_e, T_i)$ .

Имея данные (i), (ii) и (iii), мы выполнили серии двухтемпературных гидродинамических расчетов (код 2Т-гд) облучения рутения оптическими или рентгеновскими импульсами (мягкий рентген, фотон 90 эВ). Данные по коэффициентам поглощения брались из справочников под редакцией Палика и с сайта с таблицами Хенке [http://henke.lbl.gov/optical\\_constants/](http://henke.lbl.gov/optical_constants/). Описанные выше этапы частично опубликованы в отчетной статье [15]/п. 1.7.

Была усовершенствована программа расчета изображений на ПЗС матрице, см. ссылку [16] в доплит. к п. 1.3. Из 2Т-гд кода или МД расчета берутся распределения плотности и температуры на данный момент времени, определяется комплексный показатель преломления, а затем вычисляется изображение в виде колец Ньютона или интерференционных полос.

#### ((5)) Лазерная фрагментация капель

В работе по проекту решена проблема фрагментирования микро-капли первым лазером. Это важно, поскольку для оптимизации работы источника необходимо знать параметры облака и составляющих его наночастиц. Результаты представлены в статье [1], перечисленных в списке работ в п. 1.7, входящих в отчет по проекту. Результаты сопоставлены с опытами, которые проводились в институте спектроскопии РАН в г. Троицк. Доказано хорошее согласие данных.

Проведенные исследования проходили в несколько этапов. Была создана двухтемпературная модель олова, включавшая уравнение состояния и кинетические коэффициенты. Был разработан межатомный потенциал жидкого олова. Были выполнены одномерные гидродинамические расчеты и молекулярно-динамическое (МД) моделирование, с помощью МД была определена динамическая прочность расплава олова в процессах быстрого растяжения (это важно для аккуратного расчета фрагментации методом SPH). Далее было проведено трехмерное численное моделирование с использованием разработанного в отчетном году алгоритма (применение сетки Вороного) и комплекса программ SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) для многопроцессорного моделирования, см. отчетную работу [16] в списке публ. 1.7 за 2018-й год по отчету. Новый алгоритм позволил использовать в расчетах на суперкомпьютерах миллионы SPH-частиц. Таким образом, было получено описание сложнейшего иерархического процесса лазерного дробления микро-капли. Наглядное представление можно получить, просматривая киноматериалы, приложенные к работе [1]/п. 1.7.

#### ((7)) Формирование наночастиц при абляции золота в воду

Выполнены крупномасштабные молекулярно-динамические (МД) и гидродинамические (2Т-гд) расчеты. Для таких расчетов разработан потенциал взаимодействия частиц воды, см. сайт <https://www.researchgate.net/project/Development-of-interatomic-EAM-potentials>. 2Т-гд код дополнен алгоритмами, позволяющими учесть теплопроводность воды. Используется широкомасштабное уравнение состояния золота, полученное от наших коллег в ИВТАНе, лаборатория К.В. Хищенко [20-22], см. доплит. в конце раздела 1.3. Для воды сначала применялась политропная зависимость  $p(\rho)$ , в качестве которой мы брали адиабату Гюгиони воды по данным

[22]/1.3. В настоящее время мы перешли к использованию уравнения состояния в форме Ми-Грюнайзена согласно работе [23]/1.3. Это позволяет описать переход в слое горячей воды (у контакта между газообразным золотом и водой) от ударно сжатого состояния к двухфазному состоянию пар-жидкость под бинодалью воды.

Результаты, полученные при работе по проекту РФФ по разделу LAL (laser ablation in liquid), вошли в статьи [10-12]/п. 1.7. Анализ расчетов показывает, что при умеренных значениях поглощенных мишенью энергий, крупные (десятки нм) первичные наночастицы (НЧ) образуются вследствие развития неустойчивости Релея-Тейлора. При последующих взаимодействиях НЧ они могут образовывать агрегаты наночастиц из-за слипания НЧ, кроме того, происходят реакции на поверхности НЧ.

Механизм формирования мелких первичных НЧ другой. Горячий металл испаряется в жидкость (растворяется в жидкости) через границу контакта. Далее атомы металла диффундируют в слое жидкости возле границы. Кроме того, атомы перемещаются вместе с жидкостью при развитии релей-тейлоровской неустойчивости (рост пузырей и струй и конвекция вокруг них). В жидкости температура существенно ниже, чем в горячем металле возле контакта. Поэтому начинается конденсация атомов металла в кластеры. Рост и слияния кластеров приводят к формированию первичных НЧ диаметрами порядка нанометров.

((8)) Проверка двухтемпературной теплофизической модели тантала

В течение 2018 года ситуация изменилась. Не нашлось коллег в опытах, которые приняли бы на себя проверку расчетов по танталу. Поэтому вместо тантала были построены аналогичные двухтемпературные физические модели для рутения и молибдена. Работа по рутению нужна в связи с рентгеновскими экспериментами, в которых исследователи, работающие с нами, должны уточнить вопросы о повреждаемости рутения под действием радиационных потоков и потоков нейтралов и ионов относительно невысоких скоростей. Об этом выше написано в пункте отчета номер ((6)). О работе по молибдену скажем в следующем пункте.

((9)) Ультратонкие пленки молибдена

По этой теме наша работа ведется совместно с нашими коллегами-экспериментаторами из Lasercenter Munich, University of Applied Sciences. Т.е. деятельность эта не только интересна в фундаментальном плане, но и востребована прикладниками. Они занимаются молибденом, поскольку имеют заказ на разработку инструмента для лазерной резки коллекторных электродов солнечных панелей. Эти электроды делаются из молибдена.

За отчетный период была создана двухтемпературная модель молибдена. Сначала с использованием квантово-механических DFT (density functional theory) вычислений были рассчитаны электронные спектры молибдена. Далее на этой основе были разработаны уравнения состояния и кинетические коэффициенты. Указанные данные были включены в программу по гидродинамическому расчету динамики пленки из молибдена. Была усовершенствована программа расчета изображений при воздействии по схеме pump-probe.

((10)) Дополнительные результаты, полученные в 2018 г. в рамках проекта РФФ

Кроме перечисленных выше, за отчетный год было получено много новых результатов по нескольким направлениям.

Важно то, что был доведен до совершенства многомерный гидродинамический код SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics). Разработан и введен в действие многопроцессорный вариант кода. Этот вариант опирается на разбиение расчетной области на многогранники Вороного, см. статью [16] в списке отчетной лит. в п. 1.7. Причем это разбиение не фиксированное, а так сказать, «плавающее». Имеется автобалансировка по процессорам (каждый процессор берет на себя один многогранник). Автобалансировка помогает в разы экономить вычислительные ресурсы при расчетах задач со сложной геометрией, например, когда имеются пены, или происходит отделение частиц или струй.

Почему это важно? Дело в том, что теперь мы используем этот эффективный высокопроизводительный код при решении многих поставленных перед коллективом задач. SPH код с успехом заменяет молекулярно-динамическое (МД) моделирование в задачах с большими пространственно-временными объемами. Как известно, МД код не может выйти за пределы порядка кубического микрона и десятков наносекунд.

С помощью SPH кода получены важные результаты, описывающие волны сжатия в хрупких керамиках, см. статью [2] в списке отчетной лит. в п. 1.7.

SPH код был применен для анализа проблемы об абляции в воду.

С использованием SPH подхода решена трудная задача об инициации детонации, см. статью [14] в списке отчетной лит. в п. 1.7. В настоящее время решается проблема о волнах сжатия в пористых средах.

Именно с применением SPH кода было проведено исследование дробления микро-капли лазерным воздействием, описанное в разделе ((5)) выше, см. рис. 10/1.3 и статью [1] в списке отчетной лит. в п. 1.7.



Принципиальные результаты, относящиеся к пониманию сущности процессов испарения и конденсации, разработаны в статье [3] в списке отчетной лит. в п. 1.7.

Выяснение тонких деталей в этих вопросах важно для работы над задачами о лазерном воздействии.

Подход с применением конечных элементов использован в работе [4] в списке отчетной лит. в п. 1.7. В результате удалось решить практически значимую задачу об инициации разложения в отдельных случайных точках при использовании взрывчатого вещества из насыпки мелких кристаллитов при низкоскоростной инициации.

Важной для наших исследований абляции является работа [13] из списка отчетной лит. в п. 1.7. В ней изучаются транспортные коэффициенты металлов в горячих сильно расширенных состояниях.

#### **Все запланированные в отчетном году научные результаты достигнуты:**

да

#### **1.5. Описание выполненных в отчетном году работ и 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)*

((1)) 3D эффекты, плавление/испарение/рекристаллизация, произвольная длительность лазерного импульса  
Выполнен сравнительный анализ воздействия ультракоротких импульсов на тонкие пленки металлов для двух типов мишеней. В первом типе мишеней тонкая пленка напылена на «толстую» (порядка 100 мкм) диэлектрическую подложку, с помощью которой осуществляется механическая поддержка тонкой пленки. Мишени второго типа образуют свободновисящие пленки, т.е. пленки толщиной десятки нанометров, у которых обе поверхности пленки являются свободными; на свободной границе металл контактирует с вакуумом или газом; для пленки 1-го типа одна граница свободная, а вторая – это контакт двух конденсированных сред: металла и диэлектрика/полупроводника (стекло или кремний).

Мишени 1-го типа были исследованы на предыдущих этапах исполнения проекта РФФ. Мишени 2-го типа стали актуальны благодаря экспериментальным работам наших коллег из ИАП ДВО РАН (Институт автоматики и процессов управления, Владивосток) и ДВФУ (Дальневосточный федеральный университет). Изготовление свободновисящей пленки требует высокого технологического совершенства. Анализ ситуации со свободновисящими пленками приведен в отчетной статье [8], см. п. 1.7.

В отчетной статье [11] в п.1.7 детально проанализирован случай с субнаносекундным импульсом и толстой пленкой. Наша работа [11] в п.1.7 позволяет понять результаты сложных опытов, выполненных в лаборатории LP3 (the Lasers, Plasmas and Photonic Processes); эта лаборатория является объединенной исследовательской единицей университета в Марселе и CNRS (CNRS/Aix-Marseille University-AMU). Результаты французских опытов опубликованы в работах [11,12] (доп.лит к 1.3). Исследования ведутся в интересах оптимизации устройств лазерной печати; LIFT – laser induced forward transfer. Такая печать важна для создания изделий микроэлектроники, нанофотоники (например, печатание массива нано-антенн) и биологии (печать тканей, например, кожи и костной ткани).

((2,3)) Фазовые пластинки и вихревые пучки электромагнитного излучения. Термомеханические эффекты при интерференции ЭМ волны и плазмонного поля, запись голограмм.

С применением сложных пучков (вихревые пучки) и комбинированием электромагнитного (ЭМ) поля лазерного воздействия и поля поверхностной плазмон-поляритонной (ППП) волны связаны технологии записи сложных рельефов (микро- наноструктур). Сложные рельефы используются в нанофотонике (управление ЭМ полем отраженного сигнала при освещении искусственно созданного рельефа), для записи голограмм и при создании сенсоров и катализаторов. В рамках работ по проекту создан подход, в котором совместно применяются электродинамический и тепло-гидродинамический коды, см. [4-6] в списке п. 1.7.

Выполнены электродинамические расчеты диссипации в скин-слое энергии электромагнитного (ЭМ) поля, которое получается комбинированием излучения двух лазерных пучков и поля поверхностной плазмон-поляритонной (ППП) волны. В качестве мишени используется пленка золота, напыленная на грань стеклянной призмы в конфигурации Кречманна. Суммарное ЭМ и ППП поле создает модулированное распределение мощности диссипации вдоль поверхности пленки. Пространственная модуляция мощности связана с интерференцией ЭМ и ППП волн и возникновением стоячей волны. В пучностях волны образуются горячие участки поверхности пленки, а в узлах волны остаются ненагретые участки. Совместно с электродинамическим этапом выполняются теплофизический и гидродинамический расчеты, см. статьи [4-6] в списке п. 1.7.

Наш тепло-гидродинамический подход учитывает фазовые переходы первого рода и капиллярные эффекты в расплаве металла. За счет быстрого плавления на горячих участках нагрева пленки, пленка «отскакивает» от подложки (деламинация). Последующее затвердевание расплава формирует гофрированный рельеф на поверхности пленки.

Дело в том, что искривленные участки пленки (гофры) не успевают вернуться назад в плоское состояние (гофры не успевают распрямиться) из-за кристаллизации.

((4)) Мягкий рентген, косое падение, кольца Ньютона и построение интерферометрических изображений – расшифровка эксперимента.

((6)) Рентгеновская и оптическая абляция рутения

Актуальными в наше время стали исследования по физике воздействия рентгеновских лазеров на вещество. В отчетном году создана физическая модель рутения Ru и проведены первые серии молекулярно-динамических и гидродинамических расчетов. Модель описана в отчетной работе [15]/п. 1.7. Модель опирается на квантово-механическое DFT (density functional theory) моделирование и расчеты кинетических коэффициентов. Определены электронные спектры рутения, создан потенциал межатомного взаимодействия, разработано уравнение термодинамического состояния (УрС) с учетом двухтемпературных эффектов (электронный вклад в давление и энергию). Вычислены коэффициент взаимодействия электронной и ионной подсистем Ru и коэффициент теплопроводности. Потенциал межатомного взаимодействия аккуратно воспроизводит холодную кривую, энергии дефектов и температуру плавления.

Интерес к тугоплавкому, химически инертному рутению оправдан в связи с его применением в рентгеновских машинах. Рутений применяют в качестве зеркала скользящего падения и для защиты оптики фотолитографических машин (см. также п. ((5)) отчета). Такого же рода применения связаны с рентгеновскими лазерами, генерирующими импульсы в мягком или жестком диапазонах излучения. Это лазеры SACLA/Spring-8, DESY, LCLS (Linac Coherent Light Source/SLAC), SwissFEL и FERMI@Elettra FEL. Достаточно в интернете набрать любую из перечисленных аббревиатур, и появится соответствующая страничка.

((5)) Лазерная фрагментация капель

В работе по проекту решена проблема лазерного дробления микро-капли жидкого олова, выбрасываемого в камеру генератором капель, см. статью [1] в п. 1.7. Задача сложная, представляет фундаментальный интерес и важна для индустрии нано-электроники. Задача решается в интересах фотолитографии следующего поколения. В таких машинах используется источник мягкого рентгена/вакуумного ультрафиолета (англ. EUV – extreme ultraviolet и EUVL – EUV Lithography, 13.5 нм) на основе плазмы олова («оловянная лампочка»). Компанией ASML созданы экспериментальные EUV системы TWINSCAN NXE с разрешением 38-19 нм для печати изделий наноэлектроники.

Для оптимизации работы источника излучения необходимо знать параметры облака и составляющих его наночастиц. Результаты расчетов [1]/п. 1.7 сопоставлены с опытами, которые проводились в институте спектроскопии РАН в г. Троицк. Доказано хорошее согласие данных.

Проведенные исследования проходили в несколько этапов. Была создана двухтемпературная модель олова, включавшая уравнение состояния и кинетические коэффициенты. Был разработан межатомный потенциал жидкого олова. Были выполнены одномерные гидродинамические расчеты и молекулярно-динамическое (МД) моделирование, с помощью МД была определена динамическая прочность расплава олова в процессах быстрого растяжения (это важно для аккуратного расчета фрагментации методом SPH). Далее было проведено трехмерное численное моделирование с использованием разработанного в отчетном году алгоритма (применение сетки Вороного) и комплекса программ SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) для многопроцессорного моделирования, см. отчетную работу [16] в списке публ. 1.7 за 2018-й год по отчету. Новый алгоритм позволил использовать в расчетах на суперкомпьютерах многие миллионы SPH-частиц. Таким образом, было получено детальное описание сложнейшего иерархического процесса лазерного дробления микро-капли. Наглядное представление можно получить, просматривая киноматериалы, приложенные к работе [1]/п. 1.7.

((7)) Формирование наночастиц при абляции золота в воду

Выполнена большая работа по исследованию явлений, сопровождающих абляцию в жидкость. Результаты вошли в статьи [10-12] (раздел 1.7) для отчета РНФ. Исследование опирается на гидродинамические расчеты с полной физикой и на крупномасштабное молекулярно-динамическое (МД) моделирование. Анализ расчетов показывает, что при умеренных значениях поглощенных мишенью энергий, крупные (десятки нм) первичные наночастицы (НЧ) образуются вследствие развития неустойчивости Релея-Тейлора. Механизм формирования мелких первичных НЧ другой. Горячий металл испаряется в жидкость (растворяется в жидкости) через границу контакта. Далее атомы металла диффундируют в слое жидкости возле границы. Кроме того, атомы перемещаются вместе с жидкостью при развитии релей-тейлоровской неустойчивости (рост пузырей и струй и конвекция вокруг них). В жидкости температура существенно ниже, чем в горячем металле возле контакта. Поэтому начинается конденсация атомов металла в кластеры. Рост и слияния кластеров приводят к формированию первичных НЧ диаметрами порядка нанометров.

Задача об абляции в жидкость имеет важное фундаментальное и прикладное значение. В фундаментальном плане задача интересна тем, что принципиально отличается от абляции в газ или вакуум. Приложения в технологиях подробно описаны в недавних обширных обзорах [18,19] (список доп.лит.к разделу 1.3). Приложений много, они в фотонике,

химиндустрии (катализ), медицине (доставка лекарств), энергетике, экологии и т.д. До сих пор имеются в основном экспериментальные данные по синтезу коллоидных растворов наночастиц путем абляции в жидкости. Наши работы восполняют этот пробел, помогают понять, как в реальности происходит абляция в жидкость.

#### ((8)) Проверка двухтемпературной теплофизической модели тантала

В течение 2018 года ситуация изменилась. Не нашлось коллег в опытах, которые приняли бы на себя проверку расчетов по танталу. Поэтому вместо тантала были построены аналогичные двухтемпературные физические модели для рутения и молибдена. Работа по рутению нужна в связи с рентгеновскими экспериментами, в которых исследователи, работающие с нами, должны уточнить вопросы о повреждаемости рутения под действием радиационных потоков и потоков нейтралов и ионов относительно невысоких скоростей. Об этом выше написано в пункте отчета номер ((6)). О работе по молибдену скажем в следующем пункте.

#### ((9)) Ультратонкие пленки молибдена

По этой теме наша работа ведется совместно с нашими коллегами-экспериментаторами из Lasercenter Munich, University of Applied Sciences. Т.е. деятельность эта не только интересна в фундаментальном плане, но и востребована прикладниками. Они занимаются молибденом, поскольку имеют заказ на разработку инструмента для лазерной резки коллекторных электродов солнечных панелей. Эти электроды делаются из молибдена.

За отчетный период была создана двухтемпературная модель молибдена. Сначала с использованием квантово-механических DFT (density functional theory) вычислений были рассчитаны электронные спектры молибдена. Далее на этой основе были разработаны уравнения состояния и кинетические коэффициенты. Указанные данные были включены в программу по гидродинамическому расчету динамики пленки из молибдена. Была усовершенствована программа расчета изображений при воздействии по схеме pump-probe.

#### ((10)) Дополнительные результаты, полученные в 2018 г. в рамках проекта РФФ

Кроме перечисленных выше, за отчетный год было получено много новых результатов по нескольким направлениям.

Важно то, что был доведен до совершенства многомерный гидродинамический код SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics). Разработан и введен в действие многопроцессорный вариант кода. Этот вариант опирается на разбиение расчетной области на многогранники Вороного, см. статью [16] в списке отчетной лит. в п. 1.7. Причем это разбиение не фиксированное, а так сказать, «плавающее». Имеется автобалансировка по процессорам (каждый процессор берет на себя один многогранник). Автобалансировка помогает в разы экономить вычислительные ресурсы при расчетах задач со сложной геометрией, например, когда имеются пены, или происходит отделение частиц или струй.

Почему это важно? Дело в том, что теперь мы используем этот эффективный высокопроизводительный код при решении многих поставленных перед коллективом задач. SPH код с успехом заменяет молекулярно-динамическое (МД) моделирование в задачах с большими пространственно-временными объемами. Как известно, МД код не может выйти за пределы порядка кубического микрометра и десятков наносекунд.

С помощью SPH кода получены важные результаты, описывающие волны сжатия в хрупких керамиках, см. статью [2] в списке отчетной лит. в п. 1.7.

SPH код был применен для анализа проблемы об абляции в воду.

С использованием SPH подхода решена трудная задача об инициации детонации, см. статью [14] в списке отчетной лит. в п. 1.7. В настоящее время решается проблема о волнах сжатия в пористых средах.

Именно с применением SPH кода было проведено исследование дробления микро-капли лазерным воздействием, описанное в разделе ((5)) выше, см. рис. 10/1.3 и статью [1] в списке отчетной лит. в п. 1.7.

Принципиальные результаты, относящиеся к пониманию сущности процессов испарения и конденсации, разработаны в статье [3] в списке отчетной лит. в п. 1.7. Выяснение тонких деталей этих вопросов важно для работы над задачами о лазерном воздействии.

Подход с применением конечных элементов использован в работе [7] в списке отчетной лит. в п. 1.7. В результате удалось решить практически значимую задачу об инициации разложения в отдельных случайных точках при использовании взрывчатого вещества из насыпки мелких кристаллитов при низкоскоростной инициации.

Важной для наших исследований абляции является работа [13] из списка отчетной лит. в п. 1.7. В ней изучаются транспортные коэффициенты металлов в горячих сильно расширенных состояниях.

Перечень публикаций за год по результатам проекта

1. Григорьев и др., Phys. Rev. Appl., 10, 064009 (2018 г.)
2. Дьячков и др., J. Appl. Phys., 124, 085902 (2018 г.)
3. Жаховский и др., Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS) (2018 г.) DOI: 10.1073/pnas.1714503115
4. Игнатов и др., J. Phys.: Conf. Series, 1092, 012051 (2018 г.)
5. Игнатов и др., J. Phys.: Conf. Series, 1092, 012051 (2018 г.)
6. Игнатов и др., J. Phys.: Conf. Series (2018 г.), accepted

7. Ильницкий и др., J. Phys.: Conf. Series (2018 г.), accepted
8. Иногамов и др., J. Phys.: Conf. Ser., 946, 012008 (2018)
9. Иногамов и др., AIP Conference Proceedings, 1979, 190002 (2018 г.) (open access)
10. Иногамов и др., ЖЭТФ, 154, 92-123 (2018 г.) (open access на русск.яз)
11. Иногамов и др., Письма в ЖЭТФ, 108(7), 470-477 (2018 г.) (open access на русск.яз)
12. Иногамов и др., AIP Conference Proceedings, 1979, 190001 (2018 г.) (open access)
13. Мигдал и др., J. Phys.: Conf. Series (2018 г.), accepted (open access)
14. Мурзов и др., J. Phys.: Conf. Series (2018 г.), accepted (open access)
15. Хохлов и др., J. Phys.: Conf. Series (2018 г.), accepted (open access)
16. Егорова и др., Computer Physics Communications, 234, 112-125 (2019 г.) (open access)

#### **на английском языке**

((1)) 3D effects, melting / evaporation / recrystallization, arbitrary duration of the laser pulse.

A comparative analysis of the effects of ultrashort pulses on thin metal films for two types of targets has been performed. In the first type of targets, a thin film is deposited on a "thick" (about 100  $\mu\text{m}$ ) dielectric substrate, with which the mechanical support of the thin film is carried out. The targets of the second type form free-hanging films, i.e. films with a thickness of tens of nanometers, in which both surfaces of the film are free; on the free border metal is in a contact with a vacuum or gas; for type 1 film, one boundary is free, and the second is the contact of two condensed media: metal and dielectric / semiconductor (glass or silicon). Targets of the 1st type were investigated at the previous stages of the implementation of the project RNF. Targets of the 2nd type have become relevant due to the experimental work of our colleagues from the IACP FEB RAS (Institute of Automation and Control Processes, Vladivostok) and FEFU (Far Eastern Federal University). Making a free film requires high technological excellence. An analysis of the situation with free-standing films is given in the reporting article [9], see Section 1.7. In the reporting article [9] in Section 1.7, the case with a subnanosecond pulse and a thick film was analyzed in detail. Our work [9] in Section 1.7 allows us to understand the results of complex experiments performed in the LP3 laboratory (the Lasers, Plasmas and Photonic Processes); This laboratory is a joint research unit of the University of Marseille and CNRS (CNRS / Aix-Marseille University-AMU). The results of the French experiments were published in [11,12] (additional to 1.3). Research is being conducted in the interest of optimizing laser printing devices; LIFT - laser induced forward transfer. Such printing is important for creating products of microelectronics, nanophotonics (for example, printing an array of nano-antennas) and biology (for example, printing skin and bone tissue).

((2,3)) Phase plates and vortex beams of electromagnetic radiation. Thermomechanical effects in the interference of an EM wave and a plasmon field, creating of holograms.

The use of complex beams (vortex beams) and a combination of an electromagnetic (EM) laser field and a surface plasmon-polariton (PPP) wave are associated with the technology of recording complex reliefs (micro-nanostructures). Complex reliefs are used in nanophotonics (controlling the EM field of the reflected signal when illuminating an artificially created relief), for creating holograms, and when creating sensors and catalysts. As part of the project, an approach has been created in which electrodynamic and heat-hydrodynamic codes are used together, see [4–6] in the list of Section 1.7. Electrodynamic calculations of the dissipation in the skin layer of the energy of an electromagnetic (EM) field, which is obtained by combining the radiation of two laser beams and the field of a surface plasmon-polariton (SPP) wave, are performed. A gold film deposited on the edge of a glass prism in the Kretschmann configuration is used as a target. The total EM and SPP field generates a modulated power dissipation distribution along the film surface. Spatial power modulation is associated with the interference of EM and SPP waves and the occurrence of a standing wave. In the antinodes of the wave, hot areas of the film surface are formed, and unheated areas remain in the wave nodes. Thermophysical and hydrodynamic calculations are performed in conjunction with the electrodynamic stage, see the articles [4–6] in the list of Section 1.7. Our heat-hydrodynamic approach takes into account first-order phase transitions and capillary effects in a metal melt. Due to the rapid melting in the hot areas of the film, the film "bounces" from the substrate (delamination). Subsequent solidification of the melt forms a corrugated relief on the film surface. The fact is that the curved parts of the film (corrugations) do not have time to go back to a flat state (the corrugations do not have time to straighten) due to crystallization.

((4)) Soft X-rays, oblique incidence, Newton's rings and the construction of interferometric images - decoding the experiment.

((6)) X-ray and optical ablation of ruthenium.

Research in the physics of the action of X-ray lasers on matter has become relevant in our time. In the reporting year, a physical model of ruthenium (Ru) was created and the first series of molecular dynamics and hydrodynamic calculations were

performed. The model is described in the work [15] / Section 1.7. The model is based on quantum mechanical DFT (density functional theory) modeling and calculations of kinetic coefficients. The electronic spectra of ruthenium have been determined, the potential of interatomic interaction has been created, the equation of the thermodynamic state (EOS) has been developed taking into account the two-temperature effects (electronic contribution to pressure and energy). The coefficient of the energy exchange between the electron and ion subsystems of Ru and the coefficient of thermal conductivity are calculated. The interatomic interaction potential accurately reproduces the cold curve, the energy of defects, and the melting point. Interest in refractory, chemically inert ruthenium is justified in connection with its use in X-ray machines. Ruthenium is used as a sliding incidence mirror and to protect the optics of photolithographic machines (see also paragraph ((5)) of the report). The same kind of applications are associated with X-ray lasers, generating pulses in the soft or hard radiation ranges. These are SACLA / Spring-8, DESY, LCLS (Linac Coherent Light Source / SLAC), SwissFEL and FERMI @ Elettra FEL lasers. It is enough to dial any of the abbreviations listed on the Internet, and the corresponding page will appear.

#### ((5)) Laser fragmentation of droplets.

In the project, the problem of laser crushing of micro-droplets of liquid tin emitted into the chamber by a droplet generator was solved, see the article [1] in Section 1.7. The task is complex, of fundamental interest and important for the nano-electronics industry. The problem is solved in the interests of the next generation photolithography. Such machines use a source of soft X-ray / vacuum ultraviolet (eng. EUV - extreme ultraviolet and EUVL - EUV Lithography, 13.5 nm) based on tin plasma ("tin bulb"). The company ASML has created experimental EUV systems TWINSCAN NXE with a resolution of 38-19 nm for printing nanoelectronics products. To optimize the operation of the radiation source, it is necessary to know the parameters of the cloud and its constituent nanodroplets. The results of calculations [1] / Section 1.7 are compared with experiments that were carried out at the Institute of Spectroscopy of the Russian Academy of Sciences in Troitsk. Good agreement of the data is obtained. The studies were carried out in several stages. A two-temperature model of tin was created, which included the equation of state and kinetic coefficients. The interatomic potential of liquid tin was developed. One-dimensional hydrodynamic calculations and molecular dynamics (MD) simulations were performed, and the dynamic strength of the tin melt in fast stretching processes was determined using the MD (this is important for accurate calculation of SPH fragmentation). Next, a three-dimensional numerical simulation was performed using the algorithm developed in the reporting year (using the Voronoi grid) and the SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) program complex for multiprocessor modeling, see the report [16] in the list of publ. 1.7 for the 2018th year of the report. The new algorithm made it possible to use many millions of SPH particles in calculations on supercomputers. Thus, a detailed description was obtained of the most complicated hierarchical process of micro-drop laser crushing. A visual representation can be obtained by viewing the film materials attached to the work [1] / Section 1.7.

#### ((7)) The formation of nanoparticles during the ablation of gold into water.

A lot of work has been done on the study of phenomena accompanying ablation into a liquid. The results are included in the articles [10-12] (Section 1.7) for the RNF report. The study relies on hydrodynamic calculations with complete physics and on large-scale molecular dynamics (MD) modeling. Analysis of the calculations shows that at moderate energies absorbed by the target, large (tens of nanometers) primary nanoparticles (NP) are formed due to the development of the Rayleigh-Taylor instability. The mechanism of formation of small primary NP is different. Hot metal evaporates into a liquid (dissolves in a liquid) through the contact boundary. Further, the metal atoms diffuse in the fluid layer near the border. In addition, atoms move with the liquid during the development of Rayleigh-Taylor instability (the growth of bubbles and jets and convection around them). In liquid, the temperature is substantially lower than in hot metal near the contact. Therefore, the condensation of metal atoms into clusters begins. The growth and merging of clusters lead to the formation of primary NP with diameters of the order of nanometers. The problem of ablation into a fluid is of fundamental and applied importance. In fundamental terms, the problem is interesting in that it is fundamentally different from ablation into gas or vacuum. Applications in technology are described in detail in recent extensive reviews [18,19] (a list of additional references in Section 1.3). There are many applications, they are in photonics, chemical industry (catalysis), medicine (drug delivery), power engineering, ecology, etc. Until now, there are mainly experimental data on the synthesis of colloidal solutions of nanoparticles by ablation in a liquid. Our work fills this gap, helps to understand how ablation into liquid occurs in reality.

#### ((8)) Verification of the tantalum two-temperature thermophysical model.

During 2018, the situation changed. There were no colleagues in the experiments that would take over the verification of calculations for tantalum. Therefore, instead of tantalum, similar two-temperature physical models for ruthenium and molybdenum were constructed. Work on ruthenium is needed in connection with X-ray experiments, in which researchers working with us should clarify questions about the damageability of ruthenium under the influence of radiation fluxes and neutral and ion fluxes of relatively low velocities. This is described above in paragraph ((6)) of the report. In the next

paragraph we say on the work on molybdenum.

#### (9)) Ultra Thin Molybdenum Films.

On this topic, our work is being done jointly with our experimental colleagues from Lasercenter Munich, University of Applied Sciences. So this activity is not only interesting in fundamental terms, but also demanded by applied scientists. They are engaged in molybdenum, because they have an order to develop a tool for laser cutting collector electrodes of solar panels. These electrodes are made of molybdenum. During the reporting period, a two-temperature model of molybdenum was created. First, using electronic quantum mechanical DFT (density functional theory) calculations, the electronic spectra of molybdenum were calculated. Further, on this basis, equations of state and kinetic coefficients were developed. These data were included in the program for hydrodynamic calculation of the dynamics of a molybdenum film. The image calculation program for pump-probe effects has been improved.

#### ((10)) Additional results obtained in 2018 in the framework of the project RNF.

In addition to those listed above, many new results were obtained in several areas in the reporting year. It is important that the multidimensional hydrodynamic code SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) was perfected. A multiprocessor version of the code has been developed and implemented. This option is based on splitting the computational domain into Voronoi polyhedra; see the article [16] in the list of the reporting lit. in Section 1.7. Moreover, this partition is not fixed, but, so to speak, "floating". There is auto-balancing on processors (each processor takes on one polyhedron). Auto-balancing helps in times to save computational resources when calculating tasks with complex geometry, for example, when there are foams, or there is a separation of particles or jets. Why is it important? The fact is that now we use this efficient high-performance code when solving many tasks assigned to a team. The SPH code successfully replaces molecular dynamic (MD) modeling in problems with large space-time volumes. As is known, the MD code cannot go beyond the order of cubic microns and tens of nanoseconds. Using the SPH code, important results have been obtained that describe compression waves in fragile ceramics, see article [2] in the list of the reporting lit. in Section 1.7. The SPH code was used to analyze the ablation problem in water. Using the SPH approach, the difficult detonation initiation problem was solved, see the article [14] in the list of the reporting lit. in Section 1.7. The problem of compression waves in porous media is currently being solved. It was with the use of the SPH code that the micro-droplets were studied by laser irradiation, described in section ((5)) above, see fig. 10 / 1.3 and article [1] in the list of the reporting lit. in Section 1.7. Fundamental results relating to the understanding of the nature of the processes of evaporation and condensation, are developed in article [3] in the list of the reporting lit. in Section 1.7. Elucidation of the subtle details in these questions is important for working on the problems of laser exposure. The finite element approach is used in [3] in the list of the reporting lit. in Section 1.7. As a result, it was possible to solve a practically significant problem of initiating decomposition at individual random points using an explosive from filling up small crystallites during low-speed initiation. Important for our studies of ablation is the work [13] from the list of the reporting lit. in Section 1.7. It examines the transport coefficients of metals in hot highly expanded states.

#### 1.6. Файл с дополнительными материалами

*(при необходимости представления экспертному совету РНФ дополнительных графических материалов к отчету по проекту)*

В формате pdf, размером до 3 Мб.

скачать...

#### 1.7. Перечень публикаций за год по результатам проекта

*(публикации добавляются из списка зарегистрированных участниками проекта публикаций)*

1. Григорьев С.Ю., Лакатош Б.В., Криворуков М.С., Жаховский В.В., Дьячков С.А., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., Иногамов Н.А., Виноходов А.Ю., Компанец В.О., Сидельников Ю.В., Кривцин В.М., Кошелев К.Н., Медведев В.В. (Grigoryev, S. Y.; Lakatosh, B. V.; Krivokorytov, M. S.; Zhakhovsky, V. V.; Dyachkov, S. A.; Ilnitsky, D. K.; Migdal, K. P.; Inogamov, N. A.; Vinokhodov, A. Y.; Kompanets, V. O.; Sidelnikov, Y. V.; Krivtsun, V. M.; Koshelev, K. N. & Medvedev, V. V.) **Expansion and fragmentation of a liquid-metal droplet by a short laser pulse** PHYSICAL REVIEW APPLIED (2018 г.)

2. Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Егорова М.С., Григорьев С.Ю., Жаховский В.В., Медин С.А. (Dyachkov, S. A.; Parshikov, A. N.; Egorova, M. S.; Grigoryev, S. Y.; Zhakhovsky, V. V. & Medin, S. A.) **Explicit failure model for boron carbide ceramics under shock loading** J. Appl. Phys. (2018 г.)

3. Жаховский В.В., Крюков А.П., Левашов В.Ю., Шишкова И.Н., Анисимов С.И. (V.V. Zhakhovsky, A.P. Kryukov, V.Yu. Levashov, I.N. Shishkova, S.I. Anisimov) **Mass and heat transfer between evaporation and condensation surfaces: Atomistic simulation and solution of Boltzmann kinetic equation** Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS) (2018 г.)
- 
4. Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А. (Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogamov, N. A.) **Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse. Part I: Plasmonics** Journal of Physics: Conf. Series (2018 г.)
- 
5. Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А. (Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogamov, N. A.) **Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse. Part II** Journal of Physics: Conf. Series (2018 г.)
- 
6. Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А. (Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogamov N., A.) **Laser-induced formation of holograms for generation of plasmons** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)
- 
7. Ильницкий Д.К., Дьячков С.А., Иногамов Н.А., Жаховский В.В. (Ilnitsky, D. K.; Dyachkov, S. A.; Inogamov, N. A. & Zhakhovsky, V. V.) **Mechanical anisotropy of energetic polycrystals as possible initiation mechanism** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)
- 
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** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)
- 
9. Иногамов Н.А., Жаховский В.В. Хохлов, В.А. (N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov) **Warm dense matter in extremely small volume - Hydrodynamics of nanofilms triggered by laser irradiation at diffraction limit** AIP Conference Proceedings (2018 г.)
- 
10. Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. (Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Khokhlov V.A.) **ДИНАМИКА АБЛЯЦИИ ЗОЛОТА В ВОДУ** Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики (2018 г.)
- 
11. Иногамов Н.А., Хохлов В.А., Жаховский В.В. (Inogamov, N. A.; Khokhlov, V. V. Zhakhovsky, V. A.) **Формирование уединенной микроструктуры и абляция в прозрачный диэлектрик при субнаносекундном лазерном воздействии** Письма в ЖЭТФ (2018 г.)
- 
12. 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** AIP Conference Proceedings (2018 г.)
- 
13. Мигдал К.П., Петров Ю.В., Жаховский В.В., Иногамов Н.А. (Migdal, K. P.; Petrov, Y. V.; Zhakhovsky, V. V. & Inogamov, N. A.) **Electrical resistivity of liquid expanded metals by Ziman approach** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)
- 
14. Мурзов С.А., Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Егорова М.С., Жаховский В.В. (S A Murzov, S A Dyachkov, A N Parshikov, M S Egorova and V V Zhakhovsky) **Multiscale smoothed particle hydrodynamics simulation of detonation initiation** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)
- 
15. Хохлов В.А., Жаховский В.В., Петров Ю.В., Шепелев В.В., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., Иногамов Н.А. (Khokhlov, V. A.; Zhakhovsky, V. V.; Petrov, Y. V.; Shepelev, V. V.; Ilnitsky, D. K.; Migdal, K. P. & Inogamov, N. A.) **Dynamics of ruthenium mirror under action of soft x-ray ultrashort laser pulse** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)
- 
16. Егорова М.С., Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Жаховский В.В. (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 Communications (2019 г.)

1.8. В 2018 году возникли исключительные права на результаты интеллектуальной деятельности (РИД), созданные при выполнении проекта:

Нет

## 1.9. Показатели реализации проекта

**Показатели кадрового состава научного коллектива** (рассчитываются как округленное до целого отношение суммы количества месяцев, в которых действовали в отчетном периоде в отношении членов научного коллектива приказы о составе научного коллектива, к количеству месяцев, в которых действовало в отчетном периоде соглашение)

Плановые значения указываются только для показателей, предусмотренных соглашением.

Показатели	Единица измерения	2018 год	
		план	факт
Число членов научного коллектива	человек	16	13
Число исследователей в возрасте до 39 лет среди членов научного коллектива	человек	9	7
в том числе:			
кандидатов наук в возрасте до 35 лет (включительно)	человек		3
аспирантов (интернов, ординаторов, адъюнктов) и (или) студентов очной формы обучения	человек		2
Количество лиц категории «Вспомогательный персонал»	человек		0

**Публикационные показатели реализации проекта** (значения показателей формируются автоматически на основе данных, представленных в форме 2о (накопительным итогом). Показатели публикационной активности приводятся в отношении публикаций, имеющих соответствующую ссылку на поддержку Российского научного фонда и на организацию (в последнем случае – за исключением публикаций, созданных в рамках оказания услуг сторонними организациями).

Плановые значения указываются только для показателей, предусмотренных соглашением.

Публикационные показатели реализации проекта (нарастающим итогом, за исключением показателя «Число цитирований...»)	Единица измерения	2017-2018 годы	
		план	факт
Количество публикаций по проекту членов научного коллектива в рецензируемых российских и зарубежных научных изданиях, индексируемых в базах данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (SCOPUS)	Ед.	17	31
Число цитирований публикаций членов научного коллектива в научных журналах, индексируемых в международной базе данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) в отчетном году	Ед.		19
Количество публикаций по проекту членов научного коллектива в изданиях, учитываемых в базе данных «РИНЦ»	Ед.	17	20
Количество монографий по проекту членов научного коллектива	Ед.		0
Количество зарегистрированных результатов интеллектуальной деятельности по проекту членов научного коллектива	Ед.		0

### 1.10. Информация о представлении достигнутых научных результатов на научных мероприятиях (конференциях, симпозиумах и пр.)

(в том числе форма представления – приглашенный доклад, устное выступление, стендовый доклад и пр.)

1. VIII МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ФОТОНИКЕ И ИНФОРМАЦИОННОЙ ОПТИКЕ 23 - 25 января 2019 года  
Москва, НИЯУ МИФИ <http://fioconf.mephi.ru/info/>

Устный доклад (У1)

S.E. Svyakhovskiy, V.V. Ternovski, M.I. Tribelsky, Transient Effects at Resonant Light Scattering by Particles: Anapole as a New Memory Cell?

2. IV МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «ЛАЗЕРНЫЕ, ПЛАЗМЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И ТЕХНОЛОГИИ» ЛАПЛАЗ-2018, 30 января - 1 февраля 2018 года, <http://conf.laplas.mephi.ru/>

2.1. Устный доклад (У2)

В.А. ХОХЛОВ, Н.А. ИНОГАМОВ, А.Я., А.Я. ФАЕНОВ, Пороги короткоимпульсной лазерной абляции для оптических и рентгеновских лазеров

2.2. Устный доклад (У3)



С.Е. СВЯХОВСКИЙ, В.В. ТЕРНОВСКИЙ, М.И. ТРИБЕЛЬСКИЙ, Переходные процессы при резонансном рассеянии света наночастицами: анаполь, как новая ячейка памяти?

3. XXXIII International Conference on Equations of State for Matter, March 1–6, 2018, Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia, <http://www.ihed.ras.ru/elbrus18/>

3.1. Устный доклад (У4)

Grigoryev S.Yu., Dyachkov S.A., Parshikov A.N., Zhakhovsky V.V., Failure and phase transitions in solid ceramics under uniaxial shock compression

3.2. Устный доклад (У5)

Zhakhovsky, V. V.; Inogamov, N. A. & Khokhlov, V. A., Ablation into water: Fragmentation of metal via Rayleigh–Taylor instability

3.3. Стендовый доклад (С1)

Shepelev, V. V. & Inogamov, N. A., Numerical simulation of the holes formation in thin metal films under femtosecond laser irradiation

3.4. Стендовый доклад (С2)

Migdal, K. P.; Petrov, Y. V.; Zhakhovsky, V. V. & Inogamov, N. A., Electrical resistivity of liquid expanded metals by Ziman approach,

3.5. Стендовый доклад (С3)

Egorova M. S, Dyachkov S. A., Mursov S. A., Grigoryev S. Yu., Parshikov A. N., Zhakhovsky V. V., The massive parallel load balancing code for smooth-particle-hydrodynamic modeling of materials in extremes

4. IV International Conference on Metamaterials and Nanophotonics (METANANO 2019), 15-19 July 2019, St. Petersburg, Russia, <https://metanano.ifmo.ru/>

Устный доклад (У6)

Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogamov, N. A., Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse.

5. 10th European Solid Mechanics Conference (ESMC), Bologna, 2-6 June 2018, <http://www.esmc2018.org>

5.1. Устный доклад (У7)

Grigoryev S. Yu, Dyachkov S. A., Parshikov A. N., Zhakhovsky V. V., Failure and phase transitions in solid ceramics under uniaxial shock compression

5.2. Устный доклад (У8)

Milov, I.; Makhotkin, I.; Sobierajski, R.; Medvedev, N.; Lipp, V.; Inogamov, N.; Zhakhovsky, V.; Khokhlov, V.; Medvedev, V.; Louis, E. & Bijkerk, F., Single-shot ablation of Ru thin films induced by fs EUV Free-Electron Laser

6. 5-th International Conference on Advanced Nanoparticle Generation and Excitation by Lasers in Liquids (ANGEL-2018) June 3-7 2018, Lion, France, <http://angel-conference.org/en>

Приглашенный доклад (П1)

6.1. V. Zhakhovsky<sup>1,2</sup>, S. Dyachkov<sup>1,2</sup>, N. Inogamov, Laser ablation of gold into water: Comparative atomistic and hydrodynamics modeling

6.2. Устный доклад (У9)

V. Khokhlov, N. Inogamov, and V. Zhakhovsky

Laser ablation in liquid: heating, diffusion, and condensation

7. 11th International Conference on Photo-Excited Processes and Applications – ICPEPA 11, Vilnius, Lithuania on September 10-14, 2018, <http://icpepa11.com/>

Устный доклад (У10)

Petrov, Yu. V; Khokhlov, V. A.; Zhakhovsky, V. V. and Inogamov, N. A., Laser ablation in liquid

8. Физика взрыва: теория, эксперимент, приложения, Новосибирск, 18-21 сентября 2018 г.,

<http://conf.nsc.ru/expl2018/ru>

Устный доклад (У11)

Егорова М. С., Мурзов С. А., Жаховский В. В., Паршиков А. Н., Прохождение ударной волны через взвесь металлических частиц в жидкости

9. International Conference on Ultrafast Optical Science (UltrafastLight-2018), October 01-05, 2018, Lebedev Physical Institute, Moscow, <https://ultrafastlight.lebedev.ru/>

Приглашенный доклад (П2)

M.I. Tribelsky, Non-steady effects in resonant scattering of ultrashort laser pulses

10. Scientific-Coordination Session on "Non-Ideal Plasma Physics",

November 19-20, 2018, Leninsky avenue, 32a, Moscow, <http://www.ihed.ras.ru/npp2018/>

10.1. Устный доклад (У12)

N.A. Inogamov, Zhakhovskiy V.V., Khokhlov V.A., Petrov Yu.V. Ablation of gold into water: approaches based on molecular dynamics and on the equations of state of gold and water with hydrocodes

10.2. Устный доклад (У13)

Grigoryev S.Yu., Zhakhovskiy V.V., Dyachkov S.A., Medvedev V.V. Expansion and fragmentation of liquid metal droplet by a short laser pulse

**1.11. Все публикации, информация о которых представлена в пункте 1.9, имеют указание на получение финансовой поддержки от Фонда:**

да

**1.12. Информация (при наличии) о публикациях в СМИ, посвященных результатам проекта, с упоминанием Фонда:**

Да

---

**1.12.1 Наименование СМИ**

INTERFAX.RU

**Заголовок (название)**

Физики разработали алгоритм, позволяющий понять процессы при столкновении звезд

**Выходные данные публикации о проекте**

Москва. 20 ноября. INTERFAX.RU

**1.12.2 Ссылка на адрес в сети Интернет (при наличии)**

<https://www.interfax.ru/russia/638676>, <https://www.itp.ac.ru/ru/news/science-news/144/>

---

**1.12.1 Наименование СМИ**

INTERFAX.RU

**Заголовок (название)**

Физики создали наноиглы для сверхминиатюрной электроники при помощи луча-бублика

**Выходные данные публикации о проекте**

Москва. 31 мая. INTERFAX.RU

**1.12.2 Ссылка на адрес в сети Интернет (при наличии)**

<https://www.interfax.ru/russia/615137>, <https://www.itp.ac.ru/ru/news/science-news/135/>

---

**1.12.1 Наименование СМИ**

РИА Новости

**Заголовок (название)**

Физики из России раскрыли секрет «лазерной» сборки наночастиц

**Выходные данные публикации о проекте**

МОСКВА, 22 мар – РИА Новости.

**1.12.2 Ссылка на адрес в сети Интернет (при наличии)**

[https://ria.ru/20180322/1517039774.html?utm\\_source=rnews](https://ria.ru/20180322/1517039774.html?utm_source=rnews), <https://www.itp.ac.ru/ru/news/science-news/128/>

**1.13. Изменялся ли в отчетном периоде состав основных исполнителей проекта?**

Нет

**Основные исполнители проекта в 2018 г.:**

Жаховский Василий Викторович

Иногамов Наиль Алимович

Петров Юрий Васильевич

*В случаях изменения состава основных исполнителей проекта, указанных в заявке на участие в конкурсе, в составе отчета представляются сведения об исключении членов научного коллектива из состава основных исполнителей и о новых основных исполнителях проекта в соответствии с формой 2 приложения № 1 к конкурсной документации о проведении конкурса.*

Настоящим подтверждаю:

- самостоятельность и авторство текста отчета о выполнении проекта;
- что при обнародовании результатов, полученных в рамках реализации поддержанного РНФ проекта, научный коллектив ссылался на получение финансовой поддержки проекта от РНФ и на организацию, на базе которой выполнялось исследование;
- что согласен с опубликованием РНФ сведений из отчета о выполнении проекта, в том числе в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»;
- что проект не имеет других источников финансирования;
- что проект не является аналогичным\*\*\*\* по содержанию проекту, одновременно финансируемому из других источников.

---

\*\*\*\* Проекты, аналогичные по целям, задачам, объектам, предметам и методам исследований, а также ожидаемым результатам. Экспертиза на совпадение проводится экспертным советом Фонда.

---

Подпись руководителя проекта \_\_\_\_\_/С.И. Анисимов/

Сведения о публикациях по результатам проекта  
№ 14-19-01599  
«Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в трехмерной  
геометрии»,  
в 2018 году

Приводится в отношении публикаций, имеющих соответствующую ссылку на поддержку РФФ.

(заполняется отдельно на каждую публикацию, для формирования п.1.7 отчета)

В карточке публикации все данные приводятся на языке и в форме, используемой базами данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection), «Скопус» (Scopus) и/или РИНЦ, каждая статья упоминается только один раз (независимо от языков опубликования).

1

### 2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Григорьев С.Ю., Лакатош Б.В., Криворуков М.С., Жаховский В.В., Дьячков С.А., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., Иногамов Н.А., Виноходов А.Ю., Компанец В.О., Сидельников Ю.В, Кривцин В.М., Кошелев К.Н., Медведев В.В.

**на английском языке:** Grigoryev, S. Y.; Lakatosh, B. V.; Krivokorytov, M. S.; Zhakhovsky, V. V.; Dyachkov, S. A.; Ilnitsky, D. K.; Migdal, K. P.; Inogamov, N. A.; Vinokhodov, A. Y.; Kompanets, V. O.; Sidelnikov, Y. V.; Krivtsun, V. M.; Koshelev, K. N. & Medvedev, V. V.

**WoS Researcher ID (при наличии):** G-9560-2011

**Scopus AuthorID (при наличии):** 56847780800

### 2.2. Название публикации

Expansion and fragmentation of a liquid-metal droplet by a short laser pulse

### 2.3. Год публикации

2018

### 2.4. Ключевые слова

фрагментация металлических капель, короткие лазерные импульсы, SPH

### 2.5. Вид публикации

статья

### 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

PHYSICAL REVIEW APPLIED

**ISSN (при наличии):** 2331-7019

**e-ISSN (при наличии):** ---

**ISBN (при наличии):** ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: да

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

### 2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

10, 064009

**Месяц и год публикации:** 12.2018

**Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):**

---

## 2.8. DOI (при наличии)

10.1103/PhysRevApplied.10.064009

**Accession Number WoS (при наличии):** ---

**Scopus EID (при наличии):** ---

## 2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

да

**Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации:** ---

## 2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

## 2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

4.782

## 2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

## 2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

нет

## 2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

## 2.15. В публикации:

**В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:**

да

**Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:**

нет

## 2.16. Файл с текстом публикации

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

## 2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Егорова М.С., Григорьев С.Ю., Жаховский В.В., Медин С.А.

**на английском языке:** Dyachkov, S. A.; Parshikov, A. N.; Egorova, M. S.; Grigoryev, S. Y.; Zhakhovsky, V. V. & Medin, S.

A.

**WoS Researcher ID (при наличии):** G-9560-2011

**Scopus AuthorID (при наличии):** 56847780800

## 2.2. Название публикации

Explicit failure model for boron carbide ceramics under shock loading

## 2.3. Год публикации

2018

## 2.4. Ключевые слова

карбид бора, керамика, ударное воздействие

## 2.5. Вид публикации

статья

## 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

J. Appl. Phys.

ISSN (при наличии): 0021-8979

e-ISSN (при наличии): 1089-7550

ISBN (при наличии): ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

## 2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

124, 085902

Месяц и год публикации: 09.2018

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии): <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.5043418>

## 2.8. DOI (при наличии)

10.1063/1.5043418

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

## 2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

---

Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации: ---

## 2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

## 2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

2.176

## 2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

## 2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

## 2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

## 2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

**Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации):**

The work of S.A.D., M.S.E., S.Yu.G., and V.V.Z. was supported by the Russian Science Foundation under Grant No. 14-19-01599

- Работа С.А.Дьячкова, М.С.Егоровой, С.Ю.Григорьевой и В.В.Жаховского была поддержана Российским Научным

## 2.16. Файл с текстом публикации

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РНФ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

## 2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Жаховский В.В., Крюков А.П., Левашов В.Ю., Шишкова И.Н., Анисимов С.И.

**на английском языке:** V.V. Zhakhovsky, A.P. Kryukov, V.Yu. Levashov, I.N. Shishkova, S.I. Anisimov

**WoS Researcher ID (при наличии):** G-9560-2011

**Scopus AuthorID (при наличии):** 56847780800

## 2.2. Название публикации

Mass and heat transfer between evaporation and condensation surfaces: Atomistic simulation and solution of Boltzmann kinetic equation

## 2.3. Год публикации

2018

## 2.4. Ключевые слова

массо- теплоперенос, молекулярная динамика,

## 2.5. Вид публикации

обзор

## 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)

**ISSN (при наличии):** 0027-8424

**e-ISSN (при наличии):** ---

**ISBN (при наличии):** ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: да

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

## 2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

[www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1714503115](http://www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1714503115)

**Месяц и год публикации:** 03.2018

**Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):**

<http://www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1714503115>

## 2.8. DOI (при наличии)

10.1073/pnas.1714503115

**Accession Number WoS (при наличии):** ---

**Scopus EID (при наличии):** ---

## 2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

---

**Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации:** ---

## 2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

## 2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

6.09

## 2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

## 2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

нет

## 2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

## 2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

*Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации):*

S.I.A. was supported by Russian Science Foundation Grant 14-19-01599 - С.И. Анисимов поддержан Российским Научным Фондом, грант 14-19-0159

## 2.16. Файл с текстом публикации

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

---

4

---

## 2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

*на русском языке:* Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А.

*на английском языке:* Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogamov, N. A.

**WoS Researcher ID (при наличии):** G-9560-2011

**Scopus AuthorID (при наличии):** 56847780800

## 2.2. Название публикации

Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse. Part I: Plasmonics

## 2.3. Год публикации

2018

## 2.4. Ключевые слова

термомеханическая абляция, поверхностные плазмоны-поляритоны, ультракороткие лазерные импульсы

## 2.5. Вид публикации

статья

## 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Journal of Physics: Conf. Series

**ISSN (при наличии):** 1742-6596



**e-ISSN (при наличии):** 1742-6588

**ISBN (при наличии):** ---

**Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет**  
Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

**2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)**

1092, 012051

**Месяц и год публикации:** ---

**Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):**  
<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1092/1/012051/meta>

**2.8. DOI (при наличии)**

10.1088/1742-6596/1092/1/012051

**Accession Number WoS (при наличии):** G-9560-2011

**Scopus EID (при наличии):** 56847780800

**2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)**

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

---

**Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации:** ---

**2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection**

да

**2.11. Импакт-фактор издания**

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

---

**2.12. Издание индексируется базой данных Scopus**

да

**2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ**

да

**2.14. Публикация аффилирована с организацией:**

да

**2.15. В публикации:**

**В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:**

да

**Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:**

нет

**2.16. Файл с текстом публикации**

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

**2.1. Авторы публикации**

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А.

*на английском языке:* Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogamov, N. A.  
**WoS Researcher ID (при наличии):** G-9560-2011  
**Scopus AuthorID (при наличии):** 56847780800

## 2.2. Название публикации

Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse. Part II

## 2.3. Год публикации

2018

## 2.4. Ключевые слова

термомеханическая абляция, поверхностные плазмоны-поляритоны, ультракороткие лазерные импульсы

## 2.5. Вид публикации

статья

## 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Journal of Physics: Conf. Series

**ISSN (при наличии):** 1742-6596

**e-ISSN (при наличии):** 1742-6588

**ISBN (при наличии):** ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

## 2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

1092, 012052

**Месяц и год публикации:** ---

**Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):**  
<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1092/1/012052/meta>

## 2.8. DOI (при наличии)

10.1088/1742-6596/1092/1/012052

**Accession Number WoS (при наличии):** ---

**Scopus EID (при наличии):** ---

## 2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

---

**Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации:** ---

## 2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

## 2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

---

## 2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

## 2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

## 2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

### 2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

нет

### 2.16. Файл с текстом публикации

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РНФ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

---

6

---

### 2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А.

**на английском языке:** Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogamov N., A.

**WoS Researcher ID (при наличии):** Q-8112-2016

**Scopus AuthorID (при наличии):** 7004135519

### 2.2. Название публикации

Laser-induced formation of holograms for generation of plasmons

### 2.3. Год публикации

2018

### 2.4. Ключевые слова

поверхностные наноструктуры, плазмоны-поляритоны

### 2.5. Вид публикации

статья

### 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Journal of Physics: Conference Series

**ISSN (при наличии):** 1742-6588

**e-ISSN (при наличии):** 1742-6596

**ISBN (при наличии):** ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

### 2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

v. 1147

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):

---

### 2.8. DOI (при наличии)

---

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

### 2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

да

**Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации:** скачать

В формате pdf, до 3 Мб, в том числе электронное письмо.

## 2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

## 2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

---

## 2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

## 2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

нет

## 2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

## 2.15. В публикации:

**В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:**

да

**Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:**

нет

## 2.16. Файл с текстом публикации

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

## 2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Ильницкий Д.К., Дьячков С.А., Иногамов Н.А., Жаховский В.В.

**на английском языке:** Ilnitsky, D. K.; Dyachkov, S. A.; Inogamov, N. A. & Zhakhovsky, V. V.

**WoS Researcher ID (при наличии):** Q-8112-2016

**Scopus AuthorID (при наличии):** 7004135519

## 2.2. Название публикации

Mechanical anisotropy of energetic polycrystals as possible initiation mechanism

## 2.3. Год публикации

2018

## 2.4. Ключевые слова

высокоинвазивные кристаллы, дислокационная модель

## 2.5. Вид публикации

статья

## 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Journal of Physics: Conference Series

**ISSN (при наличии):** 1742-6588

**e-ISSN (при наличии):** 1742-6596

ISBN (при наличии): ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

**2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)**

v. 1147

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):

---

**2.8. DOI (при наличии)**

---

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

**2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)**

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

да

Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации: [скачать](#)

В формате pdf, до 3 Мб, в том числе электронное письмо.

**2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection**

да

**2.11. Импакт-фактор издания**

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

---

**2.12. Издание индексируется базой данных Scopus**

да

**2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ**

нет

**2.14. Публикация аффилирована с организацией:**

да

**2.15. В публикации:**

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

нет

**2.16. Файл с текстом публикации**

(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)

[скачать](#)

**2.1. Авторы публикации**

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Иногамов Н.А., Жаховский В.В. Хохлов В.А.

*на английском языке:* Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V. & Khokhlov, V. A.  
**WoS Researcher ID (при наличии):** Q-8112-2016  
**Scopus AuthorID (при наличии):** 7004135519

**2.2. Название публикации**

Laser ablation caused by geometrically constrained illumination and inventive target design

**2.3. Год публикации**

2018

**2.4. Ключевые слова**

thin film, short laser pulse

**2.5. Вид публикации**

статья

**2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)**

Journal of Physics: Conference Series

**ISSN (при наличии):** 1742-6588

**e-ISSN (при наличии):** 1742-6596

**ISBN (при наличии):** ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

**2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)**

V. 946, 012008

**Месяц и год публикации:** ---

**Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):**

<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/946/1/012008/meta>

**2.8. DOI (при наличии)**

10.1088/1742-6596/946/1/012008

**Accession Number WoS (при наличии):** 000446782200008

**Scopus EID (при наличии):** ---

**2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)**

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

---

**Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации:** ---

**2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection**

да

**2.11. Импакт-фактор издания**

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

---

**2.12. Издание индексируется базой данных Scopus**

да

**2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ**

нет

**2.14. Публикация аффилирована с организацией:**

да

### 2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

нет

### 2.16. Файл с текстом публикации

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

---

9

---

### 2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Иногамов Н.А., Жаховский В.В. Хохлов, В.А.

**на английском языке:** N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov

**WoS Researcher ID (при наличии):** Q-8112-2016

**Scopus AuthorID (при наличии):** 7004135519

### 2.2. Название публикации

Warm dense matter in extremely small volume - Hydrodynamics of nanofilms triggered by laser irradiation at diffraction limit

### 2.3. Год публикации

2018

### 2.4. Ключевые слова

горячее плотное вещество, гидродинамика нанопленок, фемтосекундный лазер

### 2.5. Вид публикации

статья

### 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

AIP Conference Proceedings

**ISSN (при наличии):** ---

**e-ISSN (при наличии):** ---

**ISBN (при наличии):** ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

### 2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

Volume 1979, Issue 1, 190002

**Месяц и год публикации:** 07.2018

**Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):**

<https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.5045044>

### 2.8. DOI (при наличии)

10.1063/1.5045044

**Accession Number WoS (при наличии):** ---

**Scopus EID (при наличии):** ---

### 2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях,

## положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

---

Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации: ---

### 2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

### 2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

---

### 2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

### 2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

### 2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

### 2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

нет

### 2.16. Файл с текстом публикации

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

---

10

---

### 2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А.

**на английском языке:** Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Khokhlov V.A.

**WoS Researcher ID (при наличии):** Q-8112-2016

**Scopus AuthorID (при наличии):** 7004135519

### 2.2. Название публикации

ДИНАМИКА АБЛЯЦИИ ЗОЛОТА В ВОДУ

### 2.3. Год публикации

2018

### 2.4. Ключевые слова

ультракороткие лазерные импульсы, лазерная абляция, абляция в жидкость

### 2.5. Вид публикации

статья

### 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики

**ISSN (при наличии):** 0044-4510

**e-ISSN (при наличии):** ---



ISBN (при наличии): ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

**2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)**

154, вып. 1 (7), стр. 92–123

Месяц и год публикации: 06.2018

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии): <http://jetp.ac.ru/cgi-bin/e/index/r/154/1/p92?a=list>

**2.8. DOI (при наличии)**

10.1134/S004445101807009X

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

**2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)**

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

---

Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации: ---

**2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection**

да

**2.11. Импакт-фактор издания**

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

0.946

**2.12. Издание индексируется базой данных Scopus**

да

**2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ**

да

**2.14. Публикация аффилирована с организацией:**

да

**2.15. В публикации:**

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

нет

**2.16. Файл с текстом публикации**

(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

**2.1. Авторы публикации**

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Иногамов Н.А., Хохлов В.А., Жаховский В.В.

**на английском языке:** Inogamov, N. A.; Khokhlov, V. V. Zhakhovsky, V. A.

WoS Researcher ID (при наличии): Q-8112-2016

Scopus AuthorID (при наличии): 7004135519

## 2.2. Название публикации

Формирование уединенной микроструктуры и абляция в прозрачный диэлектрик при субнаносекундном лазерном воздействии

## 2.3. Год публикации

2018

## 2.4. Ключевые слова

лазерная абляция в жидкость, поверхностные наноструктуры,

## 2.5. Вид публикации

статья

## 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Письма в ЖЭТФ

ISSN (при наличии): 0370-274X

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

## 2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

108(7), 470-477

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии): [http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2197/article\\_32928.shtml](http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2197/article_32928.shtml)

## 2.8. DOI (при наличии)

10.1134/S0370274X18190037

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

## 2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

---

Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации: ---

## 2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

## 2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

1.363

## 2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

## 2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

## 2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

### 2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

нет

### 2.16. Файл с текстом публикации

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РНФ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

---

12

---

### 2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Иногамов Н.А., Жаховский В.В, Хохлов В.А.

**на английском языке:** Inogamov, N.; Zhakhovsky, V. & Khokhlov, V.

**WoS Researcher ID (при наличии):** Q-8112-2016

**Scopus AuthorID (при наличии):** 7004135519

### 2.2. Название публикации

Laser ablation of metal into liquid: Near critical point phenomena and hydrodynamic instability

### 2.3. Год публикации

2018

### 2.4. Ключевые слова

лазерная абляция, абляция в жидкость, гидродинамическая неустойчивость

### 2.5. Вид публикации

статья

### 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

AIP Conference Proceedings

**ISSN (при наличии):** ---

**e-ISSN (при наличии):** ---

**ISBN (при наличии):** ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

### 2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

1979, 190001

**Месяц и год публикации:** 07.2018

**Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):**

<https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.5045043>

### 2.8. DOI (при наличии)

10.1063/1.5045043

**Accession Number WoS (при наличии):** ---

**Scopus EID (при наличии):** ---

### 2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

---

**Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации: ---**

## **2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection**

да

## **2.11. Импакт-фактор издания**

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

---

## **2.12. Издание индексируется базой данных Scopus**

да

## **2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ**

да

## **2.14. Публикация аффилирована с организацией:**

да

## **2.15. В публикации:**

**В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:**

да

**Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:**

нет

## **2.16. Файл с текстом публикации**

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РНФ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

---

13

---

## **2.1. Авторы публикации**

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Мигдал К.П., Петров Ю.В., Жаховский В.В., Иногамов Н.А.

**на английском языке:** Migdal, K. P.; Petrov, Y. V.; Zhakhovsky, V. V. & Inogamov, N. A.

**WoS Researcher ID (при наличии):** Q-8112-2016

**Scopus AuthorID (при наличии):** 7004135519

## **2.2. Название публикации**

Electrical resistivity of liquid expanded metals by Ziman approach

## **2.3. Год публикации**

2018

## **2.4. Ключевые слова**

транспортные свойства жидких металлов, квантовая молекулярная динамика

## **2.5. Вид публикации**

статья

## **2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)**

Journal of Physics: Conference Series

**ISSN (при наличии):** 1742-6588

**e-ISSN (при наличии):** 1742-6596

ISBN (при наличии): ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет  
Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

**2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)**

v. 1147

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):

---

**2.8. DOI (при наличии)**

---

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

**2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)**

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

да

Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации: [скачать](#)

В формате pdf, до 3 Мб, в том числе электронное письмо.

**2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection**

да

**2.11. Импакт-фактор издания**

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

---

**2.12. Издание индексируется базой данных Scopus**

да

**2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ**

нет

**2.14. Публикация аффилирована с организацией:**

да

**2.15. В публикации:**

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

нет

**2.16. Файл с текстом публикации**

(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)

[скачать](#)

**2.1. Авторы публикации**

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Мурзов С.А., Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Егорова М.С., Жаховский В.В.

*на английском языке:* S A Murzov, S A Dyachkov, A N Parshikov, M S Egorova and V V Zhakhovsky  
**WoS Researcher ID (при наличии):** G-9560-2011  
**Scopus AuthorID (при наличии):** 56847780800

## 2.2. Название публикации

Multiscale smoothed particle hydrodynamics simulation of detonation initiation

## 2.3. Год публикации

2018

## 2.4. Ключевые слова

контактная гидродинамика мягких частиц, мезоскопика, ударная инициация детонации

## 2.5. Вид публикации

статья

## 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Journal of Physics: Conference Series

**ISSN (при наличии):** 1742-6588

**e-ISSN (при наличии):** 1742-6596

**ISBN (при наличии):** ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

## 2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

v. 1147

**Месяц и год публикации:** ---

**Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):**

---

## 2.8. DOI (при наличии)

---

**Accession Number WoS (при наличии):** ---

**Scopus EID (при наличии):** ---

## 2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

да

**Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации:** скачать

В формате pdf, до 3 Мб, в том числе электронное письмо.

## 2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

## 2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

---

## 2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

## 2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

нет

## 2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

#### 2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

нет

#### 2.16. Файл с текстом публикации

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

---

15

---

#### 2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Хохлов В.А., Жаховский В.В., Петров Ю.В., Шепелев В.В., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., Иногамов Н.А.

**на английском языке:** Khokhlov, V. A.; Zhakhovsky, V. V.; Petrov, Y. V.; Shepelev, V. V.; Ilnitsky, D. K.; Migdal, K. P. & Inogamov, N. A.

**WoS Researcher ID (при наличии):** Q-8055-2016

**Scopus AuthorID (при наличии):** 36091200200

#### 2.2. Название публикации

Dynamics of ruthenium mirror under action of soft x-ray ultrashort laser pulse

#### 2.3. Год публикации

2018

#### 2.4. Ключевые слова

короткие лазерные импульсы мягкого рентгена, рутений, электронный спектр, ДФТ, двухтемпературная гидродинамика

#### 2.5. Вид публикации

статья

#### 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Journal of Physics: Conference Series

**ISSN (при наличии):** 1742-6588

**e-ISSN (при наличии):** 1742-6596

**ISBN (при наличии):** ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: нет

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

#### 2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

v. 1147

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):

---

#### 2.8. DOI (при наличии)

---

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

**2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)**

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

да

**Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации:** скачать

В формате pdf, до 3 Мб, в том числе электронное письмо.

**2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection**

да

**2.11. Импакт-фактор издания**

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

---

**2.12. Издание индексируется базой данных Scopus**

да

**2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ**

нет

**2.14. Публикация аффилирована с организацией:**

да

**2.15. В публикации:**

**В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:**

да

**Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:**

да

**Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации):**

Authors (KVA, ZVV, IDK, MKP, SVV, PYV, INA) thank Russian Science Foundation grant 14-19-01599 for support of investigations concerning theoretical background of absorption physics and for support of numerical simulations. - Авторы (Хохлов В.А., Жаховский В.В., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., Шепелев В.В., Петров Ю.В., Иногамов Н.А.) благодарят Российский Научный Фонд, грант 14-19-01599 за поддержку исследований, касающихся теоретических основ физики поглощения и поддержки численного моделирования.

**2.16. Файл с текстом публикации**

**(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФ; размер до 3 Мб в формате pdf)**

скачать

**2.1. Авторы публикации**

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

**на русском языке:** Егорова М.С., Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Жаховский В.В.

**на английском языке:** M.S.Egorova, S.A.Dyachkov, A.N. Parshikov, V.V. Zhakhovsky

**WoS Researcher ID (при наличии):** G-9560-2011

**Scopus AuthorID (при наличии):** 56847780800

**2.2. Название публикации**

Parallel SPH modeling using dynamic domain decomposition and load balancing displacement of Voronoi subdomains



### 2.3. Год публикации

2019

### 2.4. Ключевые слова

Voronoi dynamic domain decomposition,  
Load balancing,  
Particle methods,  
Massive parallel computing

### 2.5. Вид публикации

статья

### 2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Computer Physics Communications

ISSN (при наличии): 0010-4655

e-ISSN (при наличии): 1879-2944

ISBN (при наличии): ---

Издание индексируется базой данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus) и входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR: да

Принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>.

### 2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

V. 234, 112-125

Месяц и год публикации: 01.2019

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465518302765?via%3Dihub>

### 2.8. DOI (при наличии)

10.1016/j.cpc.2018.07.019

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): 1-s2.0-S0010465518302765

### 2.9. Принята к публикации (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

---

Письмо из редакции или издательства с извещением о принятии рукописи к публикации: ---

### 2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

### 2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

3.748

### 2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

### 2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

нет

### 2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

### 2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

нет

**2.16. Файл с текстом публикации**

*(материалы, доступные в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РНФ; размер до 3 Мб в формате pdf)*

скачать

Подпись руководителя проекта \_\_\_\_\_/С.И. Анисимов/

Итоговый отчет о выполнении проекта  
№ 14-19-01599  
«Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в трехмерной геометрии»

*(представляется в последний год практической реализации проекта вместе с отчетом о выполнении проекта)*

**5.1. Заявленный в проекте план работы на весь срок выполнения проекта, предлагаемые методы и подходы (в соответствии с исходной заявкой на участие в конкурсе)**

План работы на 2017 г.

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

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

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

[А] Оптические лазеры. Манипуляции интенсивностью:

высокие значения числовой апертуры  $NA > 0.5$ ;

фазовые пластинки;

электромагнитное поле, возникающее вследствие интерференции лазерной электромагнитной (ЭМ) волны с плазмон-поляритонными (ППР) модами.

Слова о манипуляции интенсивностью по пятну облучения означают, что пятно облучения мало (порядка одной или нескольких оптических длин волн), в пятне распределение поглощенной энергии существенно неоднородно, и можно управлять этой неоднородностью. Масштаб неоднородности порядка длины волны. Сложное поле действует на сложную мишень. Требуется определить финальную застывшую структуру с выраженными нанодетальями, которая возникает после протекания тепловых и динамических, запущенных воздействием, процессов. Тепловые процессы сопровождаются фазовыми переходами первого рода, которые сильно отражаются на движении вещества. Изучается, как детали нанометрового масштаба зависят от характеристик облучающего фотонного поля и исходной структуры мишени.

Сложными являются мишени с толстой пленкой, многослойные мишени, мишени в виде субмикронного шарика или субмикронного купола на плоской подложке; толстой называется пленка, толщина которой превышает толщину слоя прогрева  $d_T$ . Здесь неприменимо одномерное приближение, что сразу выводит задачу из разряда решенных на сегодня задач.

Близкая по духу задача дифракции лазерной ЭМ волны на частице субволнового размера, подсчета неоднородной по поверхности металлического шарика диссипации (радиус больше толщины скин-слоя) и последующей тепловой и механической реакции вынесены в отдельный раздел: см. раздел D ниже.

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

Для того, чтобы не было недоразумений, поясним. 3D структуры возникают и при воздействии на однородную плоскую мишень широким фокальным пятном (10-100 мкм и более), т.е. в «одномерной» по начальным данным ситуации, которая противопоставляется выше случаям сложное поле/сложная мишень с исходной трехмерностью. Имеется много экспериментальных работ, посвященных исследованиям этой ситуации. Первыми были экспериментальные работы [[6]] Анатолия Воробьева и Гуо из Рочестера, см. список дополнительной литературы в п. 1.3. Явление имеет много приложений: вариация смачиваемости поверхности (гидрофобные вещества превращаются в гидрофильные и наоборот), рукотворное изменение оптических и химических характеристик. Происхождение таких «спонтанно» 3D

структур было впервые выяснено в наших работах [[7]], см. также [[8,9]]. Наши результаты были подтверждены позже в исследованиях сильных групп: из США [[3,10]] и Урала [[11]]. Спонтанная трехмерность произрастает из случайных тепловых флуктуаций в растянутом расплаве на некоторой глубине под поверхностью. Такие флуктуации в точках их наибольшей амплитуды приводят к зарождению нанопузырьков паровой фазы (нуклеация). Эволюция после нуклеации прослежена в указанных выше работах [[7-9]]. Подчеркнем, что аналогичные хаотические 3D структуры формируются и после рентгеновского воздействия [[9]]. Это исключает сколько-нибудь доминирующую роль поверхностных плазмонов в их образовании.

Отметим также, что куполообразные вспучивания (бампы) тонких пленок были детально разобраны за 2.5 года выполнения проекта РНФ 14-19-01599, см. [1,4,6,7,13,15-18,24,25]; как говорилось, тонкими мы называем пленки с толщиной  $d_f$  меньше толщины  $d_T$  слоя прогрева; в таких пленках прогрев по толщине происходит задолго до того, как звук пробегает пленку; это обстоятельство упрощает движение по направлению нормали к пленке. До наших работ ни количественного описания динамики, ни качественного понимания не существовало, см. вводные замечания в работе [16].

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

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

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

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

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

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

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

[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.

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

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

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

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

План работы на 2018 г.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Заявка на продление и исполненный грант РФФИ 14-19-01599 тесно связаны как по физической проблематике, так и применяемым методам. Сюда относятся

- (1) исследования по физике состояний с возбужденными электронами [9,10,12,14,20];
- (2) двухтемпературная гидродинамика (одномерный лагранжев код: 2T-1D-HD) [11,12,14,25], в который встраиваются данные по двухтемпературной физике из предыдущего пункта;
- (3) отыскание межатомных потенциалов для последующего использования в молекулярно-динамическом (МД) коде;
- (4) распараллеленный МД код, опирающийся на динамическое разбиение по ячейкам Вороного [1,3,4-7,11,13,15-18,22-26]. Это подвижное разбиение, следующее за движущимся веществом, что позволяет экономить вычислительные ресурсы в задачах со струями, разрушением, фрагментацией или вспениванием. В этом преимущество нашей методики перед хорошо известным кодом LAMMPS (Molecular Dynamics Simulator, lammps.sandia.gov), в основе которого лежит разбиение, которое не меняется во времени. Поэтому загрузка процессоров в LAMMPS становится не оптимальной, когда в конденсированной среде появляются сильно разреженные объемы (пустоты) или увеличивается отношение площади свободной поверхности к объему, занятому плотной средой. МД код при необходимости применяется вместе с программой, которая с помощью алгоритма Монте-Карло (МК) учитывает теплопроводность среды. Такая комбинированная версия МД-МК позволяет решать задачи с исключительно важным в тепловом и динамическом плане фазовым переходом плавление – рекристаллизация; этот фазовый переход резко меняет механические характеристики среды и сильно сказывается на движении, см., например, [15-18];
- (5) SPH (smoothed particles hydrodynamics). Код позволяет аккуратно моделировать движения конденсированной среды с большими деформациями. Главное то, что этот код не имеет ограничений по числу атомов, в отличие от МД кода;
- (6) двухтемпературный код в двумерной геометрии (2T-2D). Данный код описывает перераспределение однородно или неоднородно поглощенной лазерной энергии по объемному образцу за счет теплопроводности. Вычисления осуществляются с учетом передачи энергии из горячих электронов ионам. Код описывает непрерывно и двухтемпературную, и однотемпературную стадии;
- (7) Методики аналитических и численных расчетов электромагнитных (ЭМ) полей для задач с  $NA > 0.5$  объективом, фазовой пластинкой, интерференцией между внешней ЭМ волной и плазмон-поляритонным (ППР) полем. ППР поле связано с неоднородностью мишени (наноантенна, шарик или купол на подложке).

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

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

Будет продолжено обобщение кода (1) на большие времена, когда давление, связанное с динамическим напором,

сильно уменьшается. И поэтому заметную роль начинает играть испарение и связанное с ним давление паров. Такое усовершенствование потребует замены сетки. По мере расширения объема области движения приходится наращивать лагранжеву сетку с одной стороны и уменьшать число узлов в ней за счет увеличения пространственного шага. Будет создан эффективный потенциал взаимодействия точечных молекул воды с целью воспроизведения ее механических свойств при сжатии, а также эффективный потенциал взаимодействия воды и атомов золота для расчетов методом МД. Такая модификация необходима для анализа устойчивости контакта золото-вода в задаче об абляции металла в жидкость.

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

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

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

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

## **5.2. Содержание фактически проделанной работы, полученные результаты (за все годы, не более 10 стр.)**

[A]

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 ([2] в списке литературы в разделе 5.5)

Рассмотрено воздействие ультракороткого лазерного импульса на тонкую пленку золота, нанесенную на стеклянную подложку, при фокусировке излучения в пятно размером около 1 мкм. Проанализированы движение и тепловая история пленки, отслоившейся в пятне нагрева вследствие ее расплава. Показано, что отслоившийся участок образует куполообразное вздутие, движение которого тормозится поверхностным натяжением. После остановки и поворота купола назад, в сторону подложки, в его вершине начинает расти струя. Одновременно из-за теплоотвода по пленке начинается процесс рекристаллизации расплава, который охватывает сначала купол, а затем струю. Жидкая часть струи растягивается и распадается на капли из-за развития неустойчивости Плато –Рэлея. Формирование сужения шейки и отрыв последней капли происходят в зоне затвердевания между кристаллической и жидкой частями струи, причем распространение зоны кристаллизации по струе опережает процесс сужения, поэтому разрыв шейки имеет место уже в твердотельной фазе в условиях неравновесной кристаллизации (температура расплава на сотни градусов ниже температуры плавления), предельных механических напряжений и высоких темпов деформации. В результате струя превращается в высокую иглу с ультрамалым радиусом заострения (единицы нанометров).

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 ([4])

Исследования сверхбыстрого лазерного воздействия на вещество важны для многих приложений. Такое воздействие порождает экстремальные физические процессы, локализованные в диапазоне от ~ 10 нм до микронных пространственных масштабов и развивающиеся в пикосекундно-наносекундном интервале времени. Поэтому экспериментальные наблюдения сложны, и необходимо применение методов численного моделирования и прикладной математики для понимания происходящих процессов. В этой работе представлены подходы к моделированию процессов плавления при лазерном воздействии на мишень, образованию жидкой струи и ее разрыва. Движение струи вызвано коротким импульсным лазерным воздействием длительностью ~0.1 - 1 пс на поверхность тонкой пленки толщиной 10 - 100 нм, нанесенной на подложку. Оно исследовано сочетанием последовательно двухтемпературного гидродинамического кода с молекулярно-динамическим моделированием с участием 192 млн. атомов. Прослежена динамика образования струи и изменения ее фазового состояния, обнаружено образование полиикосаэдральных кристаллических структур в замерзшей струе и появление очень острого кончика струи.

Иногамов Н.А., Хохлов В.А., Петров Ю.В., Жаховский В.В., Мигдал К.П., Ильницкий Д.К., Хасегава Н., Нишилино М., Ямагива М., Ишино М., Кавачи Т., Фаенов А.Я., Пикуз Т., Баба М., Минами И., Сиёмото Т. (Inogamov, N. A.; Khokhlov, 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 ([7])

Понимание физики взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с веществом важно для многих общепризнанных приложений от модификаций поверхности до биологии. Численно и экспериментально рассмотрено влияние воздействия субпикосекундного излучения титан-сапфирового лазера на пленки золота толщиной 60-100 нм, закрепленные на подложке из плавленого кварца. Энергия импульса достаточна для отрыва пленки. Впервые показано, что существуют разные режимы абляции, а формирование трехмерных структур зависит от величины поглощенного флюенса  $F_{abs}$  и адгезионной прочности между пленкой и подложкой. А именно, если адгезия слабая, существуют порог отслаивания  $F_{delam}$  и порог абляции  $F_{abl}$  ( $F_{delam} < F_{abl}$ ). Выше нижнего порога  $F_{delam}$ , вся пленка отслаивается от подложки. Выше верхнего порога  $F_{abl}$  тонкая пленка разрывается вблизи своей средней плоскости, внешняя половина пленки отлетает, а внутренняя половина остается на стеклянной подложке. Эти два порога  $F_{delam}$  и  $F_{abl}$  существуют для таких мишеней, как Au / стекло и Ag / стекло, потому что чистые золото и серебро слабо связаны со стеклом. Нижний порог  $F_{delam}$  исчезает в случае сильного адгезионного сцепления. Расслаивание в целом становится невозможным. Хотя разрыв пленки остается, потому что порог абляции  $F_{abl}$  не зависит от адгезии. Адгезия становится высокой, когда между золотом и стеклом находится промежуточный тонкий слой хрома. Скорость пленки после ее отделения от подложки низкая для диапазона флюенсов  $F_{delam} < F < F_{abl}$ , потому что акустический импеданс  $Z_{glass}$  стекла мал по сравнению с импедансом  $Z_{film}$  пленки золота. Поэтому во время движения пленки абсолютные значения (положительные или отрицательные) контактных давлений в несколько раз меньше, чем абсолютное давление в золотой пленке. Однако выше порога абляции  $F > F_{abl}$  скорость внешней части пленки становится в несколько раз больше, потому что скорость не зависит от акустического импеданса подложки. Эти обстоятельства объясняют, почему трехмерные структуры, такие как наноструи над микробампом появляются в случае слабой адгезии. Скорость должна быть не слишком большой, чтобы позволить поверхностному натяжению и кристаллизации остановить раздувание и разрушение микробампа.

Хохлов В.А., Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Ильницкий 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 ([16])

Рассмотрено действие ультракороткого одиночного лазерного импульса на тонкую металлическую пленку. Отрыв части свободно висящей пленки, быстро нагретой лазерным излучением, представляет простейшую модель лазерного термомеханического откола. Резкий порог по флюенсу  $F_{abl}$ , разделяет динамику отдельно стоящей пленки на два режима: ниже или выше порога  $F_{abl}$ . Проблема значительной важности такова: как изменится эта картина, когда пленка нанесена на подложку? Мы решили эту проблему. Найдено, что существуют два порога  $F_{delam} < F < F_{abl}$  и четыре режима движения относительно случая отдельно стоящей пленки. В диапазоне флюенсов  $0 < F < F_{delam}$  пленка колеблется, оставаясь на подложке. Колебания затухают во времени из-за излучения звуковых волн в субстрат. При  $F_{delam} < F < F_{abl} + \Delta F$  пленка отслаивается от подложки из-за того, что отрицательное давление (напряжение растяжения), распространяясь от границы с вакуумом вместе с акустической волной разрежения, достигает границы контакта пленка-подложка и преодолевает адгезионную прочность контакта. Добавка  $\Delta F$  к случаю свободно висящей пленки мала в том случае, когда отношение  $\eta$  акустических импедансов подложки и пленки невелико. Это случай золотых или серебряных пленок на стекле. Третий режим - сложный случай с взаимодействующими процессами расслаивания и откола при  $F \approx F_{abl} + \Delta F$ . В четвертом режиме  $F > F_{abl} + \Delta F$  происходит разрыв пленки на две половины. Внешняя половина отлетает, а внутренняя остается на подложке.

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 ([18])

Современные лазерные методы сочетают в себе сложные манипуляции с фотонным пучком с изысканным дизайном мишени. Пучок фотонов фемтосекундного (фс) лазерного импульса (длительность  $\sim 100$  фс) составляет всего десятки микрон в длину (вдоль лазерного луча) и около одного микрона в толщину (в направлении, поперечном лучу), когда он фокусируется на мишень в режиме дифракционного предела. В качестве мишеней рассмотрены пленки различной толщины (от десятков нм до сотен нм). Длительность лазерного импульса изменяется от 0.1 пс до десятков пс. В случае ультракороткого лазерного воздействия имеет место (i) сверхбыстрый изохорный перевод изначально твердого металла в теплое плотное состояние (WDM) и (ii) после этого расплавленный металл возвращается (медленнее) обратно в кристаллическое состояние (рекристаллизация происходит при импульсах любой длительности). Для изучения

эволюции этих мишеней в таких условиях лазерного воздействия был применен созданный нами пакет моделирования, состоящий из двухтемпературного (2Т) (2Т - потому что непосредственно во время и в течение некоторого времени после фемтосекундного импульса электроны намного горячее, чем решетка - таким образом, появляются две разные температуры для электронов и ионов) одномерного (1D) гидродинамического кода (код 2Т-HD) и трехмерного (3D) кода молекулярной динамики (MD) в сочетании с методом Монте-Карло (MC) (код MD-MC). Метод MC позволяет нам принять во внимание значительную теплопроводность металла, что важно для охлаждения и перекристаллизации расплавленного вещества. Применением программ пакета моделирования рассмотрены такие процессы, как поглощение лазерного излучения, плавление, капиллярная динамика горячей жидкости и ее замерзание в уединенную наноструктуру.

Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А. (Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogamov, N. A.) Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse. Part I: Plasmonics Journal of Physics: Conf. Series (2018 г.) WOS SCOPUS РИНЦ ([23])

Рассмотрена конфигурация электромагнитного поля, в которой ультракороткий импульс длительностью порядка пс лазера 1 в схеме Кречманна возбуждает волну поверхностного плазмонно-поляритона (SPP) в тонкой металлической пленке в области воздействия лазерным лучом 2, где SPP вместе с лазерным лучом 2 создает стоячую волну. Стоячая волна генерирует последовательность горячих и холодных мест в пленке. Формируется пространственно-периодическая схема нагрева с горячими точками вокруг пучностей и холодными точками вокруг узлов стоячей волны. Эта последовательность оказывает соответствующее влияние на наноструктурную трансформацию поверхности. Расстояние между двумя последующими узлами равно длине плазмонной волны ~ 0.7 мкм. Другим важным обстоятельством является ультракороткая продолжительность неоднородного нагрева, время которого короче акустического времени. Это означает, что механическая реакция пленки на нагрев задерживается во времени относительно стадии нагрева, что приводит к дозвуковому движению материала и большим создаваемым напряжениям, потому что они прямо пропорциональны объемной плотности поглощенной энергии. Быстрое замерзание движущейся расплавленной пленки фиксирует ее деформированную конфигурацию. Это открывает новый путь для изготовления желаемых наноразмерных структур.

Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А. (Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogamov, N. A.) Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse. Part II Journal of Physics: Conf. Series (2018 г.) WOS SCOPUS РИНЦ ([24])

Проведено электродинамическое моделирование бегущих поверхностных плазмон-поляритонов (SPP), возбуждаемых лазером 1 в металлической пленке в геометрии Кречманна, и интерференция волны SPP с лазерным пучком 2. Вследствие интерференции появляется стоячая волна с чередованием горячих (пучности) и холодных (узлов) мест в пленке. Электродинамическое моделирование задает распределение поглощенной энергии по горячему и холодному интервалам. Далее мы используем молекулярно-динамический код, объединенный с подходом Монте-Карло включения электронной теплопроводности металлов. Это позволило следить за гидродинамическим движением материала пленки после неоднородного вдоль поверхности нагрева, плавлением, быстрым охлаждением и перекристаллизацией.

Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А. (Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogamov, N. A.) Laser-induced formation of holograms for generation of plasmons Journal of Physics: Conference Series (2018 г.) WOS SCOPUS ([25])

Новые методы изготовления регулируемой поверхностной наноструктуры незаменимы для развития новых технологий. Различные методы структурирования поверхности в прошлом были сосредоточены на создании одиночных нанобугорков, случайных поверхностных структур и периодических поверхностных структур, индуцированных лазером. Мы рассмотрели физическую модель и проделали численное моделирование, позволяющие понять плазмонный процесс формирования гладкого периодического возмущения поверхности металлической пленки с периодом, равным длине поверхностного плазмон-поляритона на частоте лазерной волны. Такая структура поверхности представляет собой голограмму, созданную термомеханическим откликом на интерференцию падающей лазерной волны, отраженной лазерной волны и электромагнитного поля в плазмонно-поляритонной волне. Последующее облучение изготовленной голограммы лазером генерирует новую плазмон-поляритонную волну, идентичную той, что используется для формирования голограммы.

Кохумура И., Жаховский В., Такей Д., Сузуки И., Такеши А., Иноуэ И., Инубуши И., Иногамов Н., Ишикава Т., Ябаши 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 ([8])

Вихревые конфигурации электромагнитного поля в лазерном излучении, в том числе рентгеновского диапазона, имеют огромный потенциал для будущих применений, таких как наноскопия и нанотехнология. С нашим участием выполнен эксперимент с рентгеновским лазером на свободных электронах (XFEL) с фокусированным волновым фронтом вихря, который генерировал наноразмерные частицы с высоким аспектным отношением на многослойном образце Cr / Au. На этом образце была сформирована острая игла с типичной шириной и высотой 310 и 600 нм. Наблюдаемая ширина превышает дифракционный предел, но созданные на поверхности структуры явились наименьшими, когда-либо зарегистрированными при абляции с помощью XFEL. Мы обнаружили, что элементный состав наноигл показывает существенное отличие от такового у незатронутой области многослойного образца Cr / Au. Все эти результаты хорошо объясняются применением молекулярно-динамического моделирования, демонстрирующего механизм образования игл на сверхбыстрых временных масштабах.

[B]

Албертацци 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 ([1])

Прямой сверхбыстрый в реальном времени мониторинг динамического разрушения (откола) на атомной решетке с пикосекундным временным разрешением был за пределами охвата экспериментальной техники. Нами показано, что сочетание мощного греющего лазерного импульса оптического диапазона частот и фемтосекундного рентгеновского зондирующего импульса, генерируемого лазером на свободных электронах, позволяет обнаруживать динамику решетки в танталовой фольге при сверхвысоких скоростях деформации от  $2 \times 10^8$  до  $3.5 \times 10^8$  с<sup>-1</sup>. Максимальное падение плотности от 8 до 10%, связанное с началом откола при откольном напряжении ~ 17 ГПа, было непосредственно измерено с помощью дифракции рентгеновских лучей. Экспериментальные результаты эволюции плотности хорошо согласуются с крупномасштабным атомистическим моделированием распространения ударной волны и разрушения образца. Развитая экспериментальная методика открывает новый путь к исследованию сверхвысоких скоростей деформации в материалах на атомном уровне, включая динамику высокоскоростных трещин и полиморфные превращения в твердой фазе вещества.

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 ([15])

Представлен обзор наших систематических экспериментальных и теоретических исследований поверхностных модификаций, возникающих в результате воздействия как одиночных, так и многократных пикосекундных импульсов мягкого рентгеновского лазера (SXRL) на такие материалы, как золото (Au), медь (Cu), алюминий (Al) и фторид лития (LiF). Экспериментально показана возможность получения нанометровых структур (~ 10–40 нм) образованных на поверхности этих материалов при сверхнизких (~ 10–30 мДж / см<sup>2</sup>) значениях флюенса для одиночного пикосекундного импульса SXRL. Проведено сравнение экспериментальных результатов с атомистической моделью абляции, которая была разработана для взаимодействия одиночного лазерного импульса SXRL с диэлектриками и металлами. Проведено теоретическое описание поверхностных наноструктур и показано, что такие структуры образуются после воздействия лазерного излучения в процессе механического откалывания ультратонкого поверхностного слоя расплавленного металла. Расслоение сопровождается сильным вспениванием расплава, разрушением пены и замерзанием остатков пены. Эти остатки образуют хаотические наноструктуры, которые наблюдаются в экспериментах. Наши измерения показывают, что электронная температура вещества при облучении SXRL была ниже 1 эВ. Расчет по теоретической модели также предсказывает, что абляция, вызванная действием SXRL, может сопровождаться достаточно низкой температурой электронов. Наши результаты показывают, что напряжение растяжения, создаваемое в LiF и металлах коротким импульсом SXRL, может привести к откольной абляции мишени даже для радикально малых значениях флюенса, что открывает новые возможности для нанобработки материала.

Хохлов В.А., Жаховский В.В., Петров Ю.В., Шепелев В.В., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., Иногамов Н.А. (Khokhlov, V. A.; Zhakhovsky, V. V.; Petrov, Y. V.; Shepelev, V. V.; Ilnitsky, D. K.; Migdal, K. P. & Inogamov, N. A.) Dynamics of ruthenium mirror under action of soft x-ray ultrashort laser pulse Journal of Physics: Conference Series (2018 г.) WOS SCOPUS ([34])

Исследовано поведение мишеней из тугоплавкого металла рутения под действием рентгеновского излучения, для которого рутений используется в качестве материала зеркал. Электронный спектр рутения рассчитывался с

использованием теории функционала плотности. Вычислены термодинамические функции и кинетические коэффициенты рутения, необходимые для использования в гидродинамическом коде, описывающем динамику превращения образца рутения под действием фемтосекундного лазерного импульса. К числу этих термодинамических функций относятся давление и внутренняя энергия, а рассматриваемыми кинетическими коэффициентами являются электронная теплопроводность и коэффициент, отвечающий за обмен энергией между электронами с ионами. Все характеристики рассчитываются в двухтемпературной ситуации, когда температура электронов превышает температуру ионов. Коэффициент электрон-ионного теплообмена достаточно высок в Ru и убывает с ростом электронной температуры. Поэтому электрон-ионная релаксация протекает довольно быстро. Уравновешивание электронной и ионной температур занимает примерно одну пикосекунду. Температурная релаксация протекает в узком слое в случае наклонного освещения зеркала рентгеновским лазером, потому что глубина затухания очень мала (3,5 нм). Используя полученную информацию об уравнении состояния и электронных кинетических свойствах, мы изучили термические и гидродинамические процессы, инициируемые мягким рентгеновским импульсом в пленке рутения.

[C]

Проведены исследования роли электронного давления в динамических процессах в поверхностном слое облученной мишени.

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 ([1])

Понимание явлений разрушения материала при чрезвычайно высоких скоростях деформации является ключевым вопросом для широкого круга научных исследований в диапазоне от прикладной науки и технологических разработок до областей фундаментальной науки, таких, как взаимодействие лазерного излучения с веществом или геология. При этом исследование этого важного вопроса опирается на описание как атомных масштабов, так и макроскопических процессов. Наши исследования показывают, что на этом раннем интервале времени существенно влияние повышенного электронного давления, вызванного возникновением неравновесной двухтемпературной ситуации при поглощении ультракороткого лазерного импульса. Сочетание в эксперименте интенсивного греющего лазерного импульса оптического диапазона и фемтосекундного рентгеновского зондирующего импульса от лазера на свободных электронах, позволившее исследовать динамику решетки пленке тантала при сверхвысоких скоростях деформации, наглядно демонстрирует важность начальной стадии взаимодействия ультракороткого лазерного импульса с металлом, большую роль электронного давления в динамических процессах в поверхностном слое облученной мишени.

[D,E]

Мирошенко 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 ([11])

С использованием фундаментальных свойств рассеяния света строго доказано существование верхнего предела поглощения света рассеивателем конечных размеров для любой парциальной по мультипольности моды и рассчитан этот предел явно. Предел является некоей простой универсальной функцией исключительно волнового числа падающей световой волны и мультипольности соответствующей парциальной моды. Он не зависит от оптических постоянных рассеивателя, его размера или даже формы. Сначала мы получили этот результат для рассеяния сферической частицей. Затем мы обобщаем его на произвольный рассеиватель конечных размеров. Результаты справедливы для любой поляризации падающей волны, любого угла ее падения и любого типа рассеивателя (однородный, многослойный или с плавно изменяющимся показателем преломления). Мы также доказали, что максимальное сечение парциального поглощения для любого конечного рассеивателя не может превышать соответствующее значение для однородной сферы в трехмерном случае и кругового цилиндра в двумерном. В качестве примера, результаты применяются для максимизации сечения поглощения сферической структуры ядро-оболочка.

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 ([19])

Рассматривается проблема динамики золота, освещаемого через воду ультракоротким лазерным импульсом. Эта проблема интересна из-за своей сложности и важна для нанотехнологических приложений, связанных с чистым

способом (без химических реагентов) производства наночастиц, а также для создания функциональных поверхностей (например, для усиления поверхностного комбинационного рассеяния), которые отличаются от функциональных поверхностей, создаваемых освещением через вакуум или газ. Здесь неизбежны двухтемпературные явления, возникающие при использовании ультракороткого лазерного импульса. Проведено двухтемпературное (2Т) одномерное гидродинамическое (2Т-HD) моделирование, охватывающее очень большой (до 0,2 мкс) временной интервал. Такое моделирование важно, потому что именно в эти поздние времена давление на границе контакта между золотом и стеклом уменьшается до давления насыщенного пара золота. И давление насыщения начинает влиять на динамику вблизи контакта. Инерция воды - следующий важный фактор. Это замедляет контакт. В системе отсчета, связанной с контактом, замедление эквивалентно ускорению свободного падения в гравитационном поле. Это следует из принципа Эйнштейна эквивалентности гравитации / инерции. Это благоприятные условия для развития неустойчивости Рэлея -Тейлора (RTI), потому что тяжелая жидкость (золото) помещается над легкой (вода) в гравитационном поле. Мы получаем инкремент RTI из 2Т-HD 1D. Поверхностное натяжение и особенно вязкость значительно уменьшают RTI при замедлении. Мы используем крупномасштабное молекулярно-динамическое моделирование, чтобы прояснить ситуацию. Молекулярная динамика показывает, что происходит значительное усиление поверхностных возмущений. Эти возмущения начинаются только с тепловых колебаний и шума, создаваемого бомбардировкой «атмосферы» осколками пены. Возмущения усиливаются достаточно для того, чтобы отделить капли от RTI струй золота. Таким образом капли попадают в воду. Существует квазигидростатическое равновесие в золоте вблизи контакта. Поэтому мы используем слово «атмосфера». Лазерное воздействие должно быть достаточно сильным, чтобы производить наночастицы. Это значительно выше порога нуклеации  $F_{abl}$  для золота, термомеханически уносимого в вакуум. Поглощенный флюенс  $F_{abs}$  имеет порядок или выше порога испарения  $F_{abs|ev}$ , выше которого не может образоваться отколовшаяся пластина при расширении золота в вакуум. Создается очень широкая пенная зона. Расширение пены не «знает» о воде. Пена расширяется свободно, и скорость ее расширения начинает превышать скорость контакта, замедленного водой. Это вызывает срастание мембран пены и атмосферы, созданной благодаря замедлению. Молекулярно-динамическое моделирование наглядно демонстрирует этот поток с ударной волной в воде, «атмосферу, сидящую на воде», обширную пену, RTI контакта и накопление пены в атмосфере.

Иногамов Н.А., Хохлов В.А., Жаховский В.В. (Inogamov, N. A.; Khokhlov, V. V. Zhakhovsky, V. A.) Формирование уединенной микроструктуры и абляция в прозрачный диэлектрик при субнаносекундном лазерном воздействии Письма в ЖЭТФ (2018 г.) WOS SCOPUS РИНЦ ([30])

Выполнены новые расчеты абляции поглощающего лазерное излучение металла в прозрачную среду под действием субнаносекундного импульса. Предыдущие расчеты относились либо к ультракоротким импульсам, либо к абляции в вакуум. Подчеркнута важная роль надкритических состояний металла в последующем формировании наночастиц. В таких состояниях металл пребывает достаточно продолжительное время (наносекунды). При этом пропадают такие мощные ограничители перемешивания, как поверхностное натяжение и продолжительные колебания атомов в ямке потенциала до перескока. Это приводит к интенсификации взаимопроникновения и, следовательно, к повышению выхода числа наночастиц за импульс. Известно, что стоимость лазерных наночастиц оказывается высокой. В этих условиях создание теоретической модели, оптимизирующей параметры воздействия, представляет интерес. Показано, что структура потока с приконтактной атмосферой, ранее зафиксированная в случае ультракоротких лазерных импульсов, имеет место и при субнаносекундном воздействии. Атмосферой называется внешняя оболочка абляционного факела. Она находится в квазигидростатическом равновесии. Видимо, впервые обнаружено ограничение режимов, в которых имеется приконтактная атмосфера, таким режимом, в котором вместо атмосферы присутствует зачаток плазменной короны. Переход ко второму режиму происходит при существенном возрастании поглощенной энергии. Дано теоретическое объяснение процессам образования струи и микроструктуры при субнаносекундном воздействии, ранее наблюдавшимся в опытах. Согласие расчетов и опыта, особенно при сильном воздействии с поглощенным флюенсом  $F_{abs} = 897 \text{ мДж/см}^2$ , указывает на то, что разработанная модель в целом является адекватной, несмотря на имеющиеся на сегодня неопределенности, касающиеся коэффициента поглощения и теплопроводности в состояниях с зачатком короны и роли радиационных потерь.

Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. (Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Khokhlov V.A.) Динамика абляции золота в воду Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики (2018 г.) WOS SCOPUS РИНЦ ([29])

Рассмотрен процесс абляции поверхности золота в воду под действием фемтосекундного лазерного импульса, энергия которого поглощается в скин-слое золота после прохождения через прозрачную воду. Приводятся результаты двухтемпературных одномерных гидродинамических расчетов расширения сильно нагретого поверхностного слоя расплава золота в воду. Расширение приводит к нуклеации паровых полостей в расплаве. В результате возникает слой двухфазной смеси жидкой и паровой фаз золота. Торможение водой расширения золота приводит к формированию

контактного слоя золота, в котором происходит возвращение двухфазной смеси в однофазное состояние. Однофазный контактный слой золота граничит с водой, по которой распространяется ударная волна. В неинерциальной системе координат, связанной с контактом, торможение эквивалентно воздействию гравитационного поля. Таким образом, более плотный расплав золота оказывается в состоянии, в котором расплав поддерживается в поле тяжести давлением жидкости малой плотности. Такие состояния, как известно, являются неустойчивыми. Контактная граница между золотом и водой сильно деформируется вследствие развития неустойчивости Рэлея – Тейлора. Представлены результаты крупномасштабного молекулярно-динамического моделирования абляции золота в воду, которые полностью подтверждают возможность развития неустойчивости Рэлея – Тейлора. Неустойчивость приводит к формированию наночастиц золота капиллярного масштаба при фрагментации струй жидкого золота.

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 ([3])

Субволновые структуры (метаатомы) с искусственно созданной диэлектрической проницаемостью демонстрируют многообещающие возможности по управлению и контролю над потоками электромагнитной энергии на наноуровне. Сверхбыстрая лазерная нанопечать становится перспективной одноэтапной, экологически чистой и гибкой технологией изготовления массивов метаатомов на большой площади с помощью трансляционной или абляционной модификации тонких пленок благородных металлов. Сверхбыстрое выделение энергии лазерного излучения в пленках благородных металлов дает необратимое сложное наноразмерное трансляционное перераспределение массы вещества лазерной мишени после рекристаллизации гидродинамических возмущений расплава. Такое массовое перераспределение приводит к образованию радиально-симметричных замороженных наноструктур на поверхности, которые сильно влияют на оптический отклик и могут быть использованы в плазмонном зондировании и нелинейно-оптических приложениях. Показано, что электронная микроскопия и ионно-пучковая диагностика вместе с электронной рентгеновской дисперсионной микроскопией низкой энергии дает точную информацию о трехмерной картине поперечного распределения массы мишени. Такие наноразмерные затвердевшие структуры были теоретически смоделированы, учитывая основные физические процессы, связанные с поглощением лазерной энергии, электронно-ионным обменом энергией, акустической релаксацией и гидродинамическим движением. Был применен теоретический подход, разделяющий медленные и быстрые физические процессы и включающий гибридные аналитические двухтемпературные расчеты, масштабируемое молекулярно-динамическое моделирование и полуаналитическую модель тонкой оболочки. Эти передовые подходы необходимы для детального моделирования возникающих структур, что прокладывает путь к полностью автоматизированному поточному контролю при высокопроизводительном и крупномасштабном лазерном производстве. Такое теоретическое моделирование обеспечивает точное предсказание масштабов и топографии созданных лазерным воздействием метаатомов и метаповерхностей.

Григорьев С.Ю., Лакатош Б.В., Криворуков М.С., Жаховский В.В., Дьячков С.А., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., Иногамов Н.А., Виноходов А.Ю., Компанец В.О., Сидельников Ю.В., Кривцин В.М., Кошелев К.Н., Медведев В.В. (Grigoryev, S. Y.; Lakatos, B. V.; Krivokorytov, M. S.; Zhakhovsky, V. V.; Dyachkov, S. A.; Ilnitsky, D. K.; Migdal, K. P.; Inogamov, N. A.; Vinokhodov, A. Y.; Kompanets, V. O.; Sidelnikov, Y. V.; Krivtsun, V. M.; Koshelev, K. N. & Medvedev, V. V.) Expansion and fragmentation of a liquid-metal droplet by a short laser pulse Physical Review Applied (2018 г.) WOS SCOPUS Q1 ([20])

Проведено экспериментальное и численное исследование механизмов фрагментации металлической капли микронных размеров, облучаемой ультракороткими лазерными импульсами. Результаты эксперимента показывают, что быстрый односторонний нагрев такой капли может привести к симметричному или асимметричному расширению с последующими различными сценариями фрагментации. Чтобы раскрыть основные процессы, ведущие к фрагментации, выполнено моделирование расширения капли жидкого олова, вызванного начальными условиями, аналогичными условиям эксперимента, с использованием численного метода «smooth particle hydrodynamics» (SPH). Моделирование показывает, что тонкий подогрев тонкого поверхностного слоя генерирует сверхкороткую ударную волну, распространяющуюся от фронтальной стороны к задней стороне капли. Сходимость такой ударной волны с последующим разгрузочным хвостом к центру капли приводит к кавитации материала внутри центральной зоны, вызванной сильным растягивающим напряжением. Отражение ударной волны от задней стороны капли производит другую область сильно растянутого материала, где может произойти откол, создавая тонкий отслоившийся слой, движущийся со скоростью, превышающей скорость расширения жидкой оболочки вокруг центральной полости. Экспериментально и численно показано, что пороговая интенсивность лазерного излучения, необходимая для откола,

выше порога, необходимого для создания кавитационной полости, близкой к центру капли. Таким образом, режим асимметричного расширения реализуется, если интенсивность лазера превышает порог откола с задней стороны капли. Скорости поперечного и продольного расширения, полученные в SPH моделировании различных режимов расширения, хорошо согласуются с нашими экспериментальными данными.

Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Егорова М.С., Григорьев С.Ю., Жаховский В.В., Медин С.А. (Dyachkov, S. A.; Parshikov, A. N.; Egorova, M. S.; Grigoryev, S. Y.; Zhakhovsky, V. V. & Medin, S. A.) Explicit failure model for boron carbide ceramics under shock loading J. Appl. Phys. (2018 г.) WOS SCOPUS РИНЦ ([21])

Керамические материалы имеют длительный устойчивый промышленный спрос из-за их высокой механической твердости и химической и температурной стойкости. Однако они хрупкие и имеют тенденцию терять прочность при больших нагрузках, что усложняет разработку комплексной модели материалов для моделирования инженерных прототипов, содержащих керамические детали. Мы разработали улучшенную модель разрушения керамики, основанную на известном подходе Джонсона-Холмквиста. Новое уравнение скорости разрушения с упрощенной общей пластической деформацией в полностью поврежденном материале может быть решено явно на каждом этапе моделирования. Модель реализована в нашем собственном коде SPH с использованием неитерационного алгоритма. Модель разрушения хорошо подтверждена SPH моделированием профилей скорости раздела, полученных в ударных экспериментах с двумя различными видами карбида бора. Модель обеспечивает хорошее согласие со всеми характеристиками, наблюдаемыми в экспериментальных профилях, включая ведущий упругий предвестник, за которым следует пластический фронт (фронт разрушения). Разработанная модель разрушения применима для многих керамических материалов, демонстрирующих снижение прочности при высоких нагрузках, таких как карбид кремния SiC и нитрид алюминия AlN. Таким образом, модель, встроенная в вычислительный код, может описывать конкретную керамику путем корректировки параметров разрушения, но без пересмотра самой модели.

Ильницкий Д.К., Дьячков С.А., Иногамов Н.А., Жаховский В.В. (Ilnitsky, D. K.; Dyachkov, S. A.; Inogamov, N. A. & Zhakhovsky, V. V.) Mechanical anisotropy of energetic polycrystals as possible initiation mechanism Journal of Physics: Conference Series (2018 г.) WOS SCOPUS ([26])

Дислокационная модель использована для оценки пластической деформации для кристаллического взрывчатого вещества при относительно низких скоростях удара. Из-за анизотропного распределения в ориентации кристаллических зерен наблюдается локализация тепловыделения. При определенных скоростях удара этого нагрева достаточно, чтобы вызвать химические реакции с выделением энергии. Нами показано, что процесс взрывной процесс может быть инициирован локализацией пластической трансформации взрывчатого вещества за счет анизотропии кристаллов.

Мурзов С.А., Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Егорова М.С., Жаховский В.В. (S A Murzov, S A Dyachkov, A N Parshikov, M S Egorova and V V Zhakhovsky) Multiscale smoothed particle hydrodynamics simulation of detonation initiation Journal of Physics: Conference Series (2018 г.) ([33])

Явление инициирования детонации в конденсированных взрывчатых веществах требует разработки методов многомасштабного моделирования. Нами применен метод гидродинамики сглаженных частиц ("smoothed particle hydrodynamics", SPH) для мезоскопического моделирования инициирования детонации в пористом веществе пентаэритритол тетранитрат (PETN) низкой плотности. В взрывчатом веществе возбуждается ударная волна, сопровождающаяся коллапсом пор, происходит компактизация вещества. Рост давления в ударной волне, энергетическое выделение вызывает инициирование детонации в пористом взрывчатом веществе. Инициирование детонации происходит в той части взрывчатого вещества, которая уже уплотнена. Наше моделирование возбуждения ударных волн приводит к завышению расстояния пробега до детонации по сравнению с кривой Пополато в PETN. Обсуждается согласованность моделирования пористой мезоскопической структуры с использованием метода SPH и макроскопической кинетики прессованного PETN.

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 ([10])

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

Егорова М.С., Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Жаховский В.В. (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 Communications (2019 г.) WOS SCOPUS Q1 ([35])

Разработан высокоадаптивный алгоритм балансировки нагрузки для параллельного моделирования, когда используются методы частиц, такие как молекулярная динамика и гидродинамика сглаженных частиц (SPH). Наш алгоритм основан на динамической пространственной декомпозиции образцов моделируемого материала между поддоменами Вороного, где каждый поддомен со всеми его частицами обрабатывается одним вычислительным процессом, который обычно выполняется на одном ядре многопроцессорного вычислительного кластера. Алгоритм смещает позиции соседних поддоменов Вороного в соответствии с локальным дисбалансом нагрузки между соответствующими процессами. Это приводит к переносу частиц от процессов с высокой нагрузкой к процессам с меньшей нагрузкой. Итерация алгоритма приводит в соответствие нагрузки процессора. Высокая адаптивность алгоритма балансировки к условиям моделирования иллюстрируется SPH-моделированием динамического поведения материалов в экстремальных условиях, которые характеризуются большими градиентами давления и скорости, в результате чего пространственное распределение частиц сильно изменяется во времени. Более высокая параллельная эффективность нашего алгоритма в таких условиях демонстрируется сравнением с соответствующей статической декомпозицией вычислительной области. Наш алгоритм демонстрирует практически идеальную сильную масштабируемость в тестах, использующих от десятков до нескольких тысяч процессов.

F,G]

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 ([19])

При рассмотрении динамики золота, подвергнутого через воду воздействию ультракороткого лазерного импульса, нами использовано крупномасштабное молекулярно-динамическое моделирование. С его помощью оказалось возможным проследить за развитием возмущений поверхности золота вследствие релей-тейлоровской неустойчивости. Показано усиление возмущений до отрыва капель золота и попадания их в воду. Важнейшим элементом молекулярно-динамического моделирования являются потенциалы взаимодействия участвующих в моделировании частиц. Нами созданы адекватно описывающие взаимодействие потенциалы для пар частиц золото-золото, вода-золото, вода-вода.

Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. (Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Khokhlov V.A.) Динамика абляции золота в воду Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики (2018 г.) WOS SCOPUS РИНЦ ([29])

Рассмотрение процесса абляции поверхности золота в воду под действием фемтосекундного лазерного импульса на его поздней стадии проведено применением крупномасштабного молекулярно-динамического моделирования, в результате чего продемонстрировано развитие неустойчивости Рэлея–Тейлора. Эта неустойчивость приводит к фрагментации струй жидкого золота и формированию наночастиц золота капиллярного масштаба. Для молекулярно-динамического моделирования созданы межчастичные потенциалы для взаимодействия золото-золото, золото-вода, вода-вода.

Мигдал К.П., Петров Ю.В., Жаховский В.В., Иногамов Н.А. (Migdal, K. P.; Petrov, Y. V.; Zhakhovsky, V. V. & Inogamov, N. A.) Electrical resistivity of liquid expanded metals by Ziman approach Journal of Physics: Conference Series (2018 г.) WOS SCOPUS ([32])

Транспортные свойства металлов вблизи критических точек были интенсивно изучаются. Рассмотрена структура жидкого алюминия и меди при высоких температурах с использованием методов теории функционала плотности и квантовой молекулярной динамики. С другой стороны, проведено классическое молекулярно-динамическое моделирование с использованием созданных нами межатомных потенциалов метода «погруженного атома» для нахождения структурного фактора этих жидкостей. Оба подхода предоставляют данные для расчетов удельного сопротивления на основе приближения Зимана – Эванса. Результаты этих расчетов показывают слабую зависимость от используемых методов расчета структуры ионов. Показано, что для обоих жидких металлов влияние температуры электронов в эффективном электрон-ионном потенциале взаимодействия, используемом в приближении Займана-Эванса, очень мало при температуре электронов меньше 30 000 К.

Жаховский В.В., Крюков А.П., Левашов В.Ю., Шишкова И.Н., Анисимов С.И. (V.V. Zhakhovsky, A.P. Kryukov, V.Yu. Levashov, I.N. Shishkova, S.I. Anisimov) Mass and heat transfer between evaporation and condensation surfaces: Atomistic simulation and solution of Boltzmann kinetic equation Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS) (2018 г.) WOS SCOPUS Q1 ([22])



Граничные условия, необходимые для численного решения кинетического уравнения Больцмана для массо- или теплопереноса между паром и конденсированной поверхностью анализируются путем сравнения результатов, полученных с помощью кинетического уравнения и молекулярно-динамического моделирования. Потенциал Леннарда-Джонса с параметрами, соответствующими твердому аргону, используется для моделирования испарения из горячего конденсированного вещества, неравновесного потока пара с числом Кнудсена около 0.02, и конденсации на холодном конденсированном веществе. Равновесная плотность пара, полученная в молекулярно-динамическом моделировании фазового сосуществования, используется в расчетах по кинетическому уравнению для согласованности результатов таких расчетов с данными молекулярной динамики. Эффективное сечение столкновений атомов в модели твердых сфер также регулируется для обеспечения теплового потока в паре, совпадающего с тем, что наблюдается при молекулярно-динамическом моделировании. Молекулярная динамика испарения в направлении не отражающей поглощающей границы показывает, что энергии связи атомов, испаренных из слоя между объемной конденсированной фазой и паром намного меньше энергии когезии в конденсированной фазе. Рассчитанная температура и профили плотности в межфазном слое указывают на то, что усредненная кинетическая энергия атомов остается почти постоянной с уменьшением плотности почти до края межфазной области. С использованием согласованных кинетического и молекулярно-динамического подходов получены профили плотности газа, массовой скорости и температуры вместе с функцией распределения по скоростям в зазоре между поверхностями испарения и конденсации, составляющем много средних длин свободного пробега пути между поверхностями испарения и конденсации. Показано, что наилучшее соответствие результатов по кинетическому уравнению с результатами молекулярно-динамического моделирования может быть достигнуто при коэффициентах испарения и конденсации, обоих близких к единице.

**Все планируемые работы выполнены полностью:**

да

### **5.3. Основные результаты выполнения проекта (не более 10 стр.)**

[A]

Численно и экспериментально рассмотрено влияние воздействия субпикосекундного излучения титан-сапфирового лазера на пленки золота толщиной 60-100 нм, закрепленные на подложке из плавленого кварца. Энергия импульса достаточна для отрыва пленки. Впервые показано, что существуют разные режимы абляции, а формирование трехмерных структур зависит от величины поглощенного флюенса  $F_{abs}$  и адгезионной прочности между пленкой и подложкой. А именно, если адгезия слабая, существуют порог отслаивания  $F_{delam}$  и порог абляции  $F_{abl}$  ( $F_{delam} < F_{abl}$ ). Выше нижнего порога  $F_{delam}$ , вся пленка отслаивается от подложки. Выше верхнего порога  $F_{abl}$  тонкая пленка разрывается вблизи своей средней плоскости, внешняя половина пленки отлетает, а внутренняя половина остается на стеклянной подложке. Эти два порога  $F_{delam}$  и  $F_{abl}$  существуют для таких мишеней, как Au / стекло и Ag / стекло, потому что чистые золото и серебро слабо связаны со стеклом. Нижний порог  $F_{delam}$  исчезает в случае сильного адгезионного сцепления. Расслаивание в целом становится невозможным. Хотя разрыв пленки остается, потому что порог абляции  $F_{abl}$  не зависит от адгезии. Адгезия становится высокой, когда между золотом и стеклом находится промежуточный тонкий слой хрома. Скорость пленки после ее отделения от подложки низкая для диапазона флюенсов  $F_{delam} < F < F_{abl}$ , потому что акустический импеданс  $Z_{glass}$  стекла мал по сравнению с импедансом  $Z_{film}$  пленки золота. Поэтому во время движения пленки абсолютные значения (положительные или отрицательные) контактных давлений в несколько раз меньше, чем абсолютное давление в золотой пленке. Однако выше порога абляции  $F > F_{abl}$  скорость внешней части пленки становится в несколько раз больше, потому что скорость не зависит от акустического импеданса подложки. Эти обстоятельства объясняют, почему трехмерные структуры, такие как наноструи над микроампмом появляются в случае слабой адгезии. Скорость должна быть не слишком большой, чтобы позволить поверхностному натяжению и кристаллизации остановить раздувание и разрушение микроамппа.

Рассмотрено воздействие ультракороткого лазерного импульса на тонкую пленку золота, нанесенную на стеклянную подложку, при фокусировке излучения в пятно размером около 1 мкм на всех стадиях такого воздействия, вплоть до рекристаллизации расплава. Проанализированы движение и тепловая история пленки, отслоившейся в пятне нагрева вследствие ее расплава. Показано, что отслоившийся участок образует куполообразное вздутие, движение которого тормозится поверхностным натяжением. После остановки и поворота купола назад, в сторону подложки, в его вершине начинает расти струя. Одновременно из-за теплоотвода по пленке начинается процесс рекристаллизации расплава,

который охватывает сначала купол, а затем струю. Жидкая часть струи растягивается и распадается на капли из-за развития неустойчивости Плато –Рэлея. Формирование сужения шейки и отрыв последней капли происходят в зоне затвердевания между кристаллической и жидкой частями струи, причем распространение зоны кристаллизации по струе опережает процесс сужения, поэтому разрыв шейки имеет место уже в твердотельной фазе в условиях неравновесной кристаллизации (температура расплава на сотни градусов ниже температуры плавления), предельных механических напряжений и высоких темпов деформации. В результате струя превращается в высокую иглу с ультрамалым радиусом заострения (единицы нанометров). Обнаружено образование полиикосаэдральных кристаллических структур в замерзшей струе.

Исследован неоднородный нагрев металлической пленки в условиях, когда ультракороткий импульс длительностью порядка пс лазера 1 в конфигурации Кречманна возбуждает волну поверхностного плазмонно-поляритона (SPP) в тонкой металлической пленке в области воздействия лазерным лучом 2, где SPP вместе с лазерным лучом 2 создает стоячую волну. Стоячая волна генерирует последовательность горячих и холодных мест в пленке. Формируется пространственно-периодическая схема нагрева с горячими точками вокруг пучностей и холодными точками вокруг узлов стоячей волны. Эта последовательность оказывает соответствующее влияние на наноструктурную трансформацию поверхности. Расстояние между двумя последующими узлами равно длине плазмонной волны  $\sim 0.7$  мкм. Другим важным обстоятельством является ультракороткая продолжительность неоднородного нагрева, время которого короче акустического времени. Это означает, что механическая реакция пленки на нагрев задерживается во времени относительно стадии нагрева, что приводит к дозвуковому движению материала и большим создаваемым напряжениям, потому что они прямо пропорциональны объемной плотности поглощенной энергии. Быстрое замерзание движущейся расплавленной пленки фиксирует ее деформированную конфигурацию. Такая структура поверхности представляет собой голограмму, созданную термомеханическим откликом на интерференцию падающей лазерной волны, отраженной лазерной волны и электромагнитного поля в плазмонно-поляритонной волне. Последующее облучение изготовленной голограммы лазером генерирует новую плазмон-поляритонную волну, идентичную той, что используется для формирования голограммы. Это открывает новый путь для изготовления желаемых наноразмерных структур.

С нашим участием выполнен эксперимент с рентгеновским лазером на свободных электронах (XFEL, Япония) с фокусированным волновым фронтом вихря, который генерировал наноразмерные частицы с высоким аспектным отношением на многослойном образце  $\text{Cr} / \text{Au}$ . На этом образце была сформирована острая игла с типичной шириной и высотой 310 и 600 нм. Наблюдаемая ширина превышает дифракционный предел, но созданные на поверхности структуры явились наименьшими, когда-либо зарегистрированными при абляции с помощью XFEL. Мы обнаружили, что элементный состав наноигл показывает существенное отличие от такового у незатронутой области многослойного образца  $\text{Cr} / \text{Au}$ . Все эти результаты хорошо объясняются применением молекулярно-динамического моделирования, демонстрирующего механизм образования игл на сверхбыстрых временных масштабах.

[B]

Нами показано, что сочетание мощного греющего лазерного импульса оптического диапазона частот и фемтосекундного рентгеновского зондирующего импульса, генерируемого лазером на свободных электронах, позволяет обнаруживать динамику решетки в танталовой фольге при сверхвысоких скоростях деформации от  $2 \times 10^8$  до  $3.5 \times 10^8$  с<sup>-1</sup>. Максимальное падение плотности от 8 до 10%, связанное с началом откола при откольном напряжении  $\sim 17$  ГПа, было непосредственно измерено с помощью дифракции рентгеновских лучей.

Экспериментальные результаты эволюции плотности хорошо согласуются с крупномасштабным атомистическим моделированием распространения ударной волны и разрушения образца. Развитая экспериментальная методика открывает новый путь к исследованию сверхвысоких скоростей деформации в материалах на атомном уровне, включая динамику высокоскоростных трещин и полиморфные превращения в твердой фазе вещества.

Проведены экспериментальные и теоретические исследования поверхностных модификаций, возникающих в результате воздействия как одиночных, так и многократных пикосекундных импульсов мягкого рентгеновского лазера на такие материалы, как золото (Au), медь (Cu), алюминий (Al) и фторид лития (LiF). Экспериментально показана возможность получения нанометровых структур ( $\sim 10$ – $40$  нм) образованных на поверхности этих материалов при сверхнизких ( $\sim 10$ – $30$  МДж / см<sup>2</sup>) значениях флюенса для одиночного пикосекундного импульса рентгеновского лазера. Проведено сравнение экспериментальных результатов с атомистической моделью абляции, которая была разработана для взаимодействия одиночного рентгеновского лазерного импульса с диэлектриками и металлами. Проведено теоретическое описание поверхностных наноструктур и показано, что такие структуры образуются после воздействия лазерного излучения в процессе механического откалывания ультратонкого поверхностного слоя

расплавленного металла. Расслоение сопровождается сильным вспениванием расплава, разрушением пены и замерзанием остатков пены. Эти остатки образуют хаотические наноструктуры, которые наблюдаются в экспериментах. Наши измерения показывают, что электронная температура вещества при облучении рентгеновским лазером была ниже 1 эВ. Расчет по теоретической модели также предсказывает, что абляция, вызванная действием рентгеновского лазера, может сопровождаться достаточно низкой температурой электронов. Наши результаты показывают, что напряжение растяжения, создаваемое в LiF и металлах коротким импульсом рентгеновского излучения, может привести к откольной абляции мишени даже для радикально малых значениях флюенса, что открывает новые возможности для нанобработки материала.

Исследовано поведение мишеней из тугоплавкого металла рутения под действием рентгеновского излучения, для которого рутений используется в качестве материала зеркал. Электронный спектр рутения рассчитывался с использованием теории функционала плотности. Вычислены термодинамические функции и кинетические коэффициенты рутения, необходимые для использования в гидродинамическом коде, описывающем динамику превращения образца рутения под действием фемтосекундного лазерного импульса. К числу этих термодинамических функций относятся давление и внутренняя энергия, а рассматриваемыми кинетическими коэффициентами являются электронная теплопроводность и коэффициент, отвечающий за обмен энергией между электронами с ионами. Все характеристики рассчитываются в двухтемпературной ситуации, когда температура электронов превышает температуру ионов. Коэффициент электрон-ионного теплообмена достаточно высок в Ru и убывает с ростом электронной температуры. Поэтому электрон-ионная релаксация протекает довольно быстро. Уравновешивание электронной и ионной температур занимает примерно одну пикосекунду. Температурная релаксация протекает в узком слое в случае наклонного освещения зеркала рентгеновским лазером, потому что глубина затухания очень мала (3,5 нм). Используя полученную информацию об уравнении состояния и электронных кинетических свойствах, мы изучили термические и гидродинамические процессы, инициируемые мягким рентгеновским импульсом в пленке рутения.

[C]

Проведены исследования роли электронного давления в динамических процессах в поверхностном слое облученной мишени. Они показывают, что на ранней стадии лазерной абляции существенно влияние повышенного электронного давления, вызванного возникновением неравновесной двухтемпературной ситуации при поглощении ультракороткого лазерного импульса. Сочетание в проведенных с нашим участием экспериментах интенсивного греющего лазерного импульса оптического диапазона и фемтосекундного рентгеновского зондирующего импульса от лазера на свободных электронах, позволившее исследовать динамику решетки в пленке тантала при сверхвысоких скоростях деформации, наглядно демонстрирует важность начальной стадии взаимодействия ультракороткого лазерного импульса с металлом, большую роль электронного давления в динамических процессах в поверхностном слое облученной мишени.

[D,E]

С использованием фундаментальных свойств рассеяния света строго доказано существование верхнего предела поглощения света рассеивателем конечных размеров для любой парциальной по мультипольности моды и рассчитан этот предел явно. Предел является некой простой универсальной функцией исключительно волнового числа падающей световой волны и мультипольности соответствующей парциальной моды. Он не зависит от оптических постоянных рассеивателя, его размера или даже формы. Сначала мы получили этот результат для рассеяния сферической частицей. Затем мы обобщаем его на произвольный рассеиватель конечных размеров. Результаты справедливы для любой поляризации падающей волны, любого угла ее падения и любого типа рассеивателя (однородный, многослойный или с плавно изменяющимся показателем преломления). Мы также доказали, что максимальное сечение парциального поглощения для любого конечного рассеивателя не может превышать соответствующее значение для однородной сферы в трехмерном случае и кругового цилиндра в двумерном. В качестве примера, результаты применяются для максимизации сечения поглощения сферической структуры ядро-оболочка.

Рассмотрена динамика золота, подвергнутого через воду действию ультракороткого лазерного импульса. Эта задача сложна и важна для нанотехнологических приложений, связанных с чистым способом (без химических реагентов) производства наночастиц, а также для создания функциональных поверхностей (например, для усиления поверхностного комбинационного рассеяния), которые отличаются от функциональных поверхностей, создаваемых лазерным воздействием через вакуум или газ. Здесь неизбежны двухтемпературные явления, возникающие при использовании ультракороткого лазерного импульса. Проведено двухтемпературное (2Т) одномерное гидродинамическое (2Т-1D) моделирование, охватывающее очень большой (до 0,2 нс) временной интервал. Такое моделирование важно, потому что именно в эти поздние времена давление на границе контакта между золотом и

стеклом уменьшается до давления насыщенного пара золота. И давление насыщения начинает влиять на динамику вблизи контакта. Инерция воды - следующий важный фактор. Это замедляет контакт. В системе отсчета, связанной с контактом, замедление эквивалентно ускорению свободного падения в гравитационном поле. Это следует из принципа Эйнштейна эквивалентности гравитации / инерции. Это благоприятные условия для развития неустойчивости Рэлея-Тейлора (RTI), потому что тяжелая жидкость (золото) помещается над легкой (вода) в гравитационном поле. Мы получили инкремент RTI из 2T-HD 1D. Поверхностное натяжение и особенно вязкость значительно уменьшают RTI при замедлении. Мы используем крупномасштабное молекулярно-динамическое моделирование, чтобы прояснить ситуацию. Молекулярная динамика показывает, что происходит значительное усиление поверхностных возмущений. Эти возмущения начинаются только с тепловых колебаний и шума, создаваемого бомбардировкой «атмосферы» осколками пены. Возмущения усиливаются достаточно для того, чтобы отделить капли от RTI струй золота. Таким образом капли попадают в воду. Существует квазигидростатическое равновесие в золоте вблизи контакта. Поэтому мы используем слово «атмосфера». Лазерное воздействие должно быть достаточно сильным, чтобы производить наночастицы. Это значительно выше порога нуклеации  $FabI$  для золота, термомеханически уносимого в вакуум. Поглощенный флюенс  $Fabs$  имеет порядок или выше порога испарения  $Fabs |_{ev}$ , выше которого не может образоваться отколовшаяся пластина при расширении золота в вакуум. Создается очень широкая пенная зона. Расширение пены не «знает» о воде. Пена расширяется свободно, и скорость ее расширения начинает превышать скорость контакта, замедленного водой. Это вызывает срастание мембран пены и атмосферы, созданной благодаря замедлению. Молекулярно-динамическое моделирование наглядно демонстрирует этот поток с ударной волной в воде, «атмосферу, сидящую на воде», обширную пену, RTI контакта и накопление пены в атмосфере.

Показано, что сверхбыстрое выделение энергии лазерного излучения в пленках благородных металлов дает необратимое сложное наноразмерное трансляционное перераспределение массы вещества лазерной мишени после рекристаллизации гидродинамических возмущений расплава. Такое массовое перераспределение может приводить к образованию радиально-симметричных замороженных наноструктур на поверхности, которые сильно влияют на оптический отклик и могут быть использованы в плазмонном зондировании и нелинейно-оптических приложениях. Показано, что электронная микроскопия и ионно-пучковая диагностика вместе с электронной рентгеновской дисперсионной микроскопией низкой энергии дает точную информацию о трехмерной картине поперечного распределения массы мишени. Такие наноразмерные затвердевшие структуры были теоретически смоделированы, учитывая основные физические процессы, связанные с поглощением лазерной энергии, электронно-ионным обменом энергией, акустической релаксацией и гидродинамическим движением. Был применен теоретический подход, разделяющий медленные и быстрые физические процессы и включающий гибридные аналитические двухтемпературные расчеты, масштабируемое молекулярно-динамическое моделирование и полуаналитическую модель тонкой оболочки. Эти передовые подходы необходимы для детального моделирования возникающих структур, что прокладывает путь к полностью автоматизированному поточному контролю при высокопроизводительном и крупномасштабном лазерном производстве. Такое теоретическое моделирование обеспечивает точное предсказание масштабов и топографии созданных лазерным воздействием метаатомов и метаповерхностей.

Проведено экспериментальное и численное исследование механизмов фрагментации металлической капли микронных размеров, облучаемой ультракороткими лазерными импульсами. Результаты эксперимента показывают, что быстрый односторонний нагрев такой капли может привести к симметричному или асимметричному расширению с последующими различными сценариями фрагментации. Чтобы раскрыть основные процессы, ведущие к фрагментации, выполнено моделирование расширения капли жидкого олова, вызванного начальными условиями, аналогичными условиям эксперимента, с использованием численного метода «smooth particle hydrodynamics» (SPH). Моделирование показывает, что тонкий подогрев тонкого поверхностного слоя генерирует сверхкороткую ударную волну, распространяющуюся от фронтальной стороны к задней стороне капли. Сходимость такой ударной волны с последующим разгрузочным хвостом к центру капли приводит к кавитации материала внутри центральной зоны, вызванной сильным растягивающим напряжением. Отражение ударной волны от задней стороны капли производит другую область сильно растянутого материала, где может произойти откол, создавая тонкий отслоившийся слой, движущийся со скоростью, превышающей скорость расширения жидкой оболочки вокруг центральной полости. Экспериментально и численно показано, что пороговая интенсивность лазерного излучения, необходимая для откола, выше порога, необходимого для создания кавитационной полости, близкой к центру капли. Таким образом, режим асимметричного расширения реализуется, если интенсивность лазера превышает порог откола с задней стороны капли. Скорости поперечного и продольного расширения, полученные в SPH моделировании различных режимов расширения, хорошо согласуются с нашими экспериментальными данными.

Разработана улучшенная модель разрушения керамики, основанная на известном подходе Джонсона-Холмквиста. Новое уравнение скорости разрушения с упрощенной общей пластической деформацией в полностью поврежденном материале может быть решено явно на каждом этапе моделирования. Модель реализована в нашем собственном коде SPH с использованием неитерационного алгоритма. Модель разрушения хорошо подтверждена SPH моделированием профилей скорости раздела, полученных в ударных экспериментах с двумя различными видами карбида бора. Модель обеспечивает хорошее согласие со всеми характеристиками, наблюдаемыми в экспериментальных профилях, включая ведущий упругий предвестник, за которым следует пластический фронт (фронт разрушения). Разработанная модель разрушения применима для многих керамических материалов, демонстрирующих снижение прочности при высоких нагрузках, таких как карбид кремния SiC и нитрид алюминия AlN. Таким образом, модель, встроенная в вычислительный код, может описывать конкретную керамику путем корректировки параметров разрушения, но без пересмотра самой модели.

Дислокационная модель использована для оценки пластической деформации для кристаллического взрывчатого вещества при относительно низких скоростях удара. Из-за анизотропного распределения в ориентации кристаллических зерен наблюдается локализация тепловыделения. При определенных скоростях удара этого нагрева достаточно, чтобы вызвать химические реакции с выделением энергии. Нами показано, что процесс взрывной процесс может быть инициирован локализацией пластической трансформации взрывчатого вещества за счет анизотропии кристаллов.

Метод гидродинамики сглаженных частиц ("smoothed particle hydrodynamics", SPH) применен для мезоскопического моделирования инициирования детонации в пористом веществе пентаэритритол тетранитрат (PENT) низкой плотности. В взрывчатом веществе возбуждается ударная волна, сопровождающаяся коллапсом пор, происходит компактизация вещества. Рост давления в ударной волне, энергетическое выделение вызывает инициирование детонации в пористом взрывчатом веществе. Инициирование детонации происходит в той части взрывчатого вещества, которая уже уплотнена. Наше моделирование возбуждения ударных волн приводит к завышению расстояния пробега до детонации по сравнению с кривой Пополато в PETN. Обсуждается согласованность моделирования пористой мезоскопической структуры с использованием метода SPH и макроскопической кинетики прессованного PETN.

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

Разработан высокоадаптивный алгоритм балансировки нагрузки для параллельного моделирования, когда используются методы частиц, такие как молекулярная динамика и гидродинамика сглаженных частиц (SPH). Наш алгоритм основан на динамической пространственной декомпозиции образцов моделируемого материала между поддоменами Вороного, где каждый поддомен со всеми его частицами обрабатывается одним вычислительным процессом, который обычно выполняется на одном ядре многопроцессорного вычислительного кластера. Алгоритм смещает позиции соседних поддоменов Вороного в соответствии с локальным дисбалансом нагрузки между соответствующими процессами. Это приводит к переносу частиц от процессов с высокой нагрузкой к процессам с меньшей нагрузкой. Итерация алгоритма приводит в соответствие нагрузки процессора. Высокая адаптивность алгоритма балансировки к условиям моделирования иллюстрируется SPH-моделированием динамического поведения материалов в экстремальных условиях, которые характеризуются большими градиентами давления и скорости, в результате чего пространственное распределение частиц сильно изменяется во времени. Более высокая параллельная эффективность нашего алгоритма в таких условиях демонстрируется сравнением с соответствующей статической декомпозицией вычислительной области. Наш алгоритм демонстрирует практически идеальную сильную масштабируемость в тестах, использующих от десятков до нескольких тысяч процессов.

F,G]

Созданы необходимые для молекулярно-динамического моделирования потенциалы взаимодействия частиц золото-золото, вода-золото, вода-вода, а также в аргоне, алюминии и меди.

Рассмотрена структура жидкого алюминия и меди при высоких температурах с использованием методов теории функционала плотности и квантовой молекулярной динамики. С другой стороны, проведено классическое молекулярно-динамическое моделирование с использованием созданных нами межатомных потенциалов метода «погруженного атома» для нахождения структурного фактора этих жидкостей. Оба подхода предоставляют данные для расчетов удельного сопротивления на основе приближения Займана – Эванса. Результаты этих расчетов показывают слабую

зависимость от используемых методов расчета структуры ионов. Показано, что для обоих жидких металлов влияние температуры электронов в эффективном электрон-ионном потенциале взаимодействия, используемом в приближении Займана-Эванса, очень мало при температуре электронов меньше 30 000 К.

Проведено молекулярно-динамическое моделирование испарения из горячего конденсированного вещества, получающегося неравновесного потока пара с числом Кнудсена около 0.02, и его конденсации на холодном конденсированном веществе. Равновесная плотность пара, полученная в молекулярно-динамическом моделировании фазового сосуществования, используется в расчетах по кинетическому уравнению для согласованности результатов таких расчетов с данными молекулярной динамики. Эффективное сечение столкновений атомов в модели твердых сфер также регулируется для обеспечения теплового потока в паре, совпадающего с тем, что наблюдается при молекулярно-динамическом моделировании. Молекулярная динамика испарения в направлении не отражающей поглощающей границы показывает, что энергии связи атомов, испаренных из слоя между объемной конденсированной фазой и паром намного меньше энергии когезии в конденсированной фазе. Рассчитанная температура и профили плотности в межфазном слое указывают на то, что усредненная кинетическая энергия атомов остается почти постоянной с уменьшением плотности почти до края межфазной области. С использованием согласованных кинетического и молекулярно-динамического подходов получены профили плотности газа, массовой скорости и температуры вместе с функцией распределения по скоростям в зазоре между поверхностями испарения и конденсации, составляющем много средних длин свободного пробега пути между поверхностями испарения и конденсации. Показано, что наилучшее соответствие результатов по кинетическому уравнению с результатами молекулярно-динамического моделирования может быть достигнуто при коэффициентах испарения и конденсации, обоих близких к единице.

**Все запланированные научные результаты достигнуты:**

да

#### **5.4. Описание выполненных работ и полученных научных результатов (в том числе степень выполнения проекта) для публикации на сайте РНФ**

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

[А] Модификация поверхности под действием лазерного излучения определяется распределением поглощаемой лазерной энергии по поверхности, что, в свою очередь, определяется конфигурацией электромагнитного поля в области поглощения. Поэтому большое внимание было уделено исследованию важных в приложении конфигураций электромагнитных полей, вызывающих нагрев поверхности лазерной мишени.

Было рассмотрено распределение интенсивности лазерного импульса пикосекундной длительности в металлической пленке, лежащей на стеклянной призме в схеме Кречманна, в которой другим импульсом были возбуждены поверхностные плазмон-поляритонные колебания. Образующаяся стоячая волна генерирует последовательность горячих и холодных мест в пленке и формирует пространственно-периодическую картину нагрева с горячими точками вокруг пучностей и холодными точками вокруг узлов стоячей волны. Эта последовательность оказывает соответствующее влияние на наноструктурную трансформацию поверхности. Быстрое замерзание движущейся расплавленной пленки фиксирует ее деформированную конфигурацию. Такая структура поверхности представляет собой голограмму, созданную термомеханическим откликом на интерференцию падающей лазерной волны, отраженной лазерной волны и электромагнитного поля в плазмонно-поляритонной волне. Это открывает новый путь для изготовления желаемых наноразмерных структур.

Большой интерес имеют электромагнитные поля лазерного излучения в конфигурации электромагнитных вихрей. Мы рассмотрели взаимодействие рентгеновского вихря с фокусированным волновым фронтом вихря от рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL) с многослойным образцом Сг/Аи. Экспериментально обнаружено образование

на поверхности многослойного образца острых игл с высотой несколько сотен нм. Наблюдаемая ширина игл превышает дифракционный предел, но является наименьшей из когда-либо до этого зарегистрированных при исследовании абляции с помощью XFEL. Все эти результаты хорошо объясняются молекулярно-динамическим моделированием, демонстрирующим механизм образования игл на сверхбыстрых временных масштабах.

Сверхбыстрое лазерное воздействие на вещество порождает экстремальные физические процессы, локализованные в диапазоне от  $\sim 10$  нм до микронных пространственных масштабов и развивающиеся в пикосекундно-наносекундном интервале времени. Поэтому экспериментальные наблюдения сложны, и необходимо применение физических моделей и методов численного моделирования для понимания происходящих процессов.

Гидродинамическим и молекулярно-динамическим моделированием рассмотрено действие ультракороткого одиночного лазерного импульса на тонкую металлическую пленку. Найдено, что, в отличие от случая свободно висящей пленки, существуют два порога для поверхностной плотности энергии  $F$  (флюенсу)  $F_{delam}$  и  $F_{abl}$  и четыре режима движения. В диапазоне  $0 < F < F_{delam}$  пленка колеблется, оставаясь на подложке. Колебания затухают во времени из-за излучения звуковых волн в субстрат. При  $F_{delam} < F < F_{abl} + \Delta F$  пленка отслаивается от подложки из-за отрицательного давления на границе контакта пленка-подложка, преодолевающего адгезионную прочность контакта. Добавка  $\Delta F$  к случаю свободно висящей пленки мала в том случае, когда отношение акустических импедансов подложки и пленки невелико. Это случай золотых или серебряных пленок на стекле. Третий режим - сложный случай с взаимодействующими процессами расслаивания и откола при  $F \approx F_{abl} + \Delta F$ . В четвертом режиме  $F > F_{abl} + \Delta F$  происходит разрыв пленки на две половины. Внешняя половина отлетает, а внутренняя остается на подложке.

Проанализированы движение и тепловая история пленки, отслоившейся в пятне нагрева вследствие ее расплава. Показано, что отслоившийся участок образует куполообразное вздутие, движение которого тормозится поверхностным натяжением. После остановки и поворота купола назад, в сторону подложки, в его вершине начинает расти струя. Одновременно из-за теплоотвода по пленке начинается процесс рекристаллизации расплава, который охватывает сначала купол, а затем струю. Жидкая часть струи растягивается и распадается на капли из-за развития неустойчивости Плато – Рэлея. Формирование сужения шейки и отрыв последней капли происходят в зоне затвердевания между кристаллической и жидкой частями струи, причем распространение зоны кристаллизации по струе опережает процесс сужения, поэтому разрыв шейки имеет место уже в твердотельной фазе в условиях неравновесной кристаллизации (температура расплава на сотни градусов ниже температуры плавления), предельных механических напряжений и высоких темпов деформации. В результате струя превращается в высокую иглу с ультрамалым радиусом заострения (единицы нанометров).

[В] В исследованиях лазерной модификации поверхности важное место принадлежит лазерам рентгеновского диапазона и как нагревающим поверхность, и как диагностическим, вследствие малой величины длины волны их излучения. Нами показано, что сочетание мощного греющего лазерного импульса оптического диапазона частот и фемтосекундного рентгеновского зондирующего импульса, генерируемого лазером на свободных электронах, позволяет обнаруживать динамику решетки в танталовой фольге при сверхвысоких скоростях деформации от  $2 \times 10^8$  до  $3.5 \times 10^8$  с<sup>-1</sup>. Максимальное падение плотности от 8 до 10%, связанное с началом откола при откольном напряжении  $\sim 17$  ГПа, было непосредственно измерено с помощью дифракции рентгеновских лучей. Экспериментальные результаты эволюции плотности хорошо согласуются с крупномасштабным молекулярно-динамическим моделированием распространения ударной волны и разрушения образца. Развитая экспериментальная методика открывает новый путь к исследованию сверхвысоких скоростей деформации в материалах на атомном уровне, включая динамику высокоскоростных трещин и полиморфные превращения в твердой фазе вещества.

Проведены экспериментальные и теоретические исследования поверхностных модификаций, возникающих в результате воздействия как одиночных, так и многократных пикосекундных импульсов лазера мягкого рентгеновского диапазона на такие материалы, как золото (Au), медь (Cu), алюминий (Al) и фторид лития (LiF). Экспериментально показана возможность получения нанометровых структур ( $\sim 10$ – $40$  нм), образованных на поверхности этих материалов при сверхнизких ( $\sim 10$ – $30$  мДж /см<sup>2</sup>) значениях флюенса для одиночного пикосекундного импульса. Проведено сравнение экспериментальных результатов с атомистической моделью абляции, которая была разработана для взаимодействия одиночного рентгеновского лазерного импульса с диэлектриками и металлами. Проведено теоретическое описание поверхностных наноструктур и показано, что такие структуры образуются после воздействия лазерного излучения в процессе механического откалывания ультратонкого поверхностного слоя расплавленного металла. Расслоение сопровождается сильным вспениванием расплава, разрушением пены и замерзанием остатков

пены. Эти остатки образуют хаотические наноструктуры, которые наблюдаются в экспериментах. Наши результаты показывают, что напряжение растяжения, создаваемое в LiF и металлах коротким рентгеновским импульсом, может привести к откольной абляции мишени даже для радикально малых значениях флюенса, что открывает новые возможности для нанообработки материала.

Материалом зеркал для света рентгеновского диапазона служат тугоплавкие металлы, поэтому важно исследование их поведение под действием рентгеновского излучения. Нами исследовано поведение мишеней из рутения под действием ультракороткого рентгеновского импульса. Электронный спектр рутения рассчитан с использованием теории функционала плотности. Вычислены термодинамические функции и кинетические коэффициенты рутения, необходимые для использования в гидродинамическом коде, описывающем динамику превращения образца. К числу этих термодинамических функций относятся давление и внутренняя энергия, а рассматриваемыми кинетическими коэффициентами являются электронная теплопроводность и коэффициент, отвечающий за обмен энергией между электронами с ионами. Все характеристики рассчитываются в двухтемпературной ситуации, когда температура электронов превышает температуру ионов. Коэффициент электрон-ионного теплообмена достаточно высок в Ru, и убывает с ростом электронной температуры. Поэтому электрон-ионная релаксация протекает довольно быстро. Уравновешивание электронной и ионной температур занимает примерно одну пикосекунду. Температурная релаксация протекает в узком слое в случае наклонного освещения зеркала рентгеновским лазером, потому что глубина затухания очень мала (3,5 нм). Используя полученную информацию об уравнении состояния и электронных кинетических свойствах, мы изучили термические и гидродинамические процессы, инициируемые мягким рентгеновским импульсом в пленке рутения.

[C] Понимание явлений разрушения материала при чрезвычайно высоких скоростях деформации является ключевым вопросом для широкого круга научных исследований в диапазоне от прикладной науки и технологических разработок до областей фундаментальной науки, таких, как взаимодействие лазерного излучения с веществом или геология. При этом исследование этого важного вопроса опирается на описание как атомных масштабов, так и макроскопических процессов. Наши исследования показывают, что на этом раннем интервале времени существенно влияние повышенного электронного давления, вызванного возникновением неравновесной двухтемпературной ситуации при поглощении ультракороткого лазерного импульса. Сочетание в эксперименте интенсивного греющего лазерного импульса оптического диапазона и фемтосекундного рентгеновского зондирующего импульса от лазера на свободных электронах, позволившее исследовать динамику решетки в пленке тантала при сверхвысоких скоростях деформации, наглядно демонстрирует важность начальной стадии взаимодействия ультракороткого лазерного импульса с металлом, большую роль электронного давления в динамических процессах в поверхностном слое облученной мишени.

[D,E] Важное место при рассмотрении воздействия лазерного излучения на конденсированное вещество принадлежит исследованию фрагментированного вещества как до, так и после взаимодействия.

С использованием фундаментальных свойств рассеяния света строго доказано существование верхнего предела поглощения света рассеивателем конечных размеров для любой парциальной по мультипольности моды, и рассчитан этот предел явно. Предел является некоторой простой универсальной функцией исключительно волнового числа падающей световой волны и мультипольности соответствующей парциальной моды. Он не зависит от оптических постоянных рассеивателя, его размера или даже формы. Мы также доказали, что максимальное сечение парциального поглощения для любого конечного рассеивателя не может превышать соответствующее значение для однородной сферы в трехмерном случае и кругового цилиндра в двумерном.

Рассмотрен процесс абляции поверхности золота в воду под действием фемтосекундного лазерного импульса, энергия которого поглощается в скин-слое золота после прохождения через прозрачную воду. Проведены двухтемпературные одномерные гидродинамические расчеты расширения сильно нагретого поверхностного слоя расплава золота в воду. Расширение приводит к нуклеации паровых полостей в расплаве. В результате возникает слой двухфазной смеси жидкой и паровой фаз золота. Торможение водой расширения золота приводит к формированию контактного слоя золота, в котором происходит возвращение двухфазной смеси в однофазное состояние. Однофазный контактный слой золота граничит с водой, по которой распространяется ударная волна. В неинерциальной системе координат, связанной с контактом, торможение эквивалентно воздействию гравитационного поля. Таким образом, более плотный расплав золота оказывается в состоянии, в котором расплав поддерживается в поле тяжести давлением жидкости малой плотности. Контактная граница между золотом и водой сильно деформируется вследствие развития неустойчивости Рэлея – Тейлора. Представлены результаты крупномасштабного молекулярно-динамического моделирования абляции золота в воду, которые полностью подтверждают возможность развития неустойчивости Рэлея – Тейлора.



Неустойчивость приводит к формированию наночастиц золота капиллярного масштаба при фрагментации струй жидкого золота.

Проведено экспериментальное и численное исследование механизмов фрагментации металлической капли микронных размеров, облучаемой ультракороткими лазерными импульсами. Результаты эксперимента показывают, что быстрый односторонний нагрев такой капли может привести к симметричному или асимметричному расширению с последующими различными сценариями фрагментации. Выполнено моделирование расширения капли жидкого олова, вызванного начальными условиями, аналогичными условиям эксперимента, с использованием численного метода «smooth particle hydrodynamics» (SPH). Моделирование показывает, что быстрый подогрев тонкого поверхностного слоя генерирует сверхкороткую ударную волну, распространяющуюся от фронтальной стороны к задней стороне капли. Сходимость такой ударной волны с последующим разгрузочным хвостом к центру капли приводит к кавитации материала внутри центральной зоны, вызванной сильным растягивающим напряжением. Отражение ударной волны от задней стороны капли производит другую область сильно растянутого материала, где может произойти откол, создавая тонкий отслоившийся слой, движущийся со скоростью, превышающей скорость расширения жидкой оболочки вокруг центральной полости.

Эффективный численный метод SPH применен нами для исследования разрушения керамик (карбида бора, карбида кремния и нитрида алюминия), а также для изучения инициирования детонации в пористых взрывчатых веществах, в отличие от другой (дислокационной) использованной нами модели для рассмотрения детонации в поликристаллических взрывчатых веществах. С учетом того, что в наших численных расчетах широко используются параллельные вычисления, разработан высокоадаптивный алгоритм балансировки нагрузки для параллельного моделирования, когда используются методы частиц, такие как молекулярная динамика и гидродинамика сглаженных частиц (SPH). Наш алгоритм основан на динамической пространственной декомпозиции образцов моделируемого материала между поддоменами Вороного, где каждый поддомен со всеми его частицами обрабатывается одним вычислительным процессом, который обычно выполняется на одном ядре многопроцессорного вычислительного кластера.

[F,G] В широко используемом в наших численных расчетах молекулярно-динамическом моделировании важное значение имеет адекватное описание межчастичных взаимодействий, которые в металлах имеют существенно многочастичный характер. В проведенных нами расчетах массо- и теплопереноса между паром и конденсированным состоянием в аргоне, а также при рассмотрении процесса абляции поверхности золота в воду под действием фемтосекундного лазерного импульса нами были созданы потенциалы взаимодействия аргон-аргон, золото-золото, вода-золото и вода-вода. Нами исследована проводимость жидких металлов, для нахождения структурного фактора которых были построены учитывающие многочастичные эффекты межатомные потенциалы взаимодействия в алюминии и меди.

В сети Интернет создан специальный сайт, посвященный проекту <http://laser.itp.ac.ru/RNF-14-19-01599/index.html>

#### ***на английском языке***

[A] The surface modification under the action of laser radiation is determined by the distribution of the absorbed laser energy over the surface, which, in turn, is determined by the configuration of the electromagnetic field in the absorption region. Therefore, much attention was paid to the study of the configurations of electromagnetic fields important in the application, which cause the heating of the laser target surface.

The distribution of the intensity of a picosecond laser pulse in a metal film lying on a glass prism in the Kretschmann scheme, in which surface plasmon-polariton oscillations were excited with another pulse, was considered. The resulting standing wave generates a sequence of hot and cold places in the film and forms a spatially periodic pattern of heating with hot points around the antinodes and cold points around the nodes of the standing wave. This sequence has a corresponding effect on the nanostructure transformation of the surface. The fast freezing of a moving molten film fixes its deformed configuration. This surface structure is a hologram created by a thermomechanical response to the interference of an incident laser wave, a reflected laser wave and an electromagnetic field in a plasmon-polariton wave. This opens up a new path for the manufacture of the desired nanoscale structures.

Of great interest are the electromagnetic fields of laser radiation in the configuration of electromagnetic vortices. We considered the interaction of an X-ray vortex with a focused vortex wave front from an X-ray free electron laser (XFEL) with a

Cr / Au multilayer sample. The formation of sharp needles with a height of several hundred nm was experimentally observed on the surface of a multilayer sample. The observed needle width exceeds the diffraction limit, but is the smallest ever recorded in the study of ablation using XFEL. All these results are well explained by molecular dynamics simulations that demonstrate the mechanism of needle formation on ultrafast time scales.

Ultrafast laser action onto the substance generates extreme physical processes localized in the range from ~ 10 nm to micron spatial scales and developing in the picosecond-nanosecond time interval. Therefore, experimental observations are complex, and it is necessary to use physical models and methods of numerical modeling to understand the processes taking place.

The effect of an ultrashort single laser pulse on a thin metal film is considered by hydrodynamic and molecular dynamics simulation. It was found that, in contrast to the case of a free-hanging film, there are two thresholds for the surface energy density  $F$  (fluence)  $F_{delam}$  and  $F_{abl}$  and four modes of motion. In the range of  $0 < F < F_{delam}$ , the film oscillates while remaining on the substrate. Oscillations decay in time due to the emission of sound waves into the substrate. When  $F_{delam} < F < F_{abl} + \Delta F$ , the film peels off the substrate due to the negative pressure at the interface of the film-substrate, overcoming the adhesive strength of the contact. The addition of  $\Delta F$  to the case of a free-hanging film is small in the case when the ratio of the acoustic impedances of the substrate and the film is small. This is the case of gold or silver films on glass. The third mode is a complex case with interacting processes of delamination and spalling at  $F \approx F_{abl} + \Delta F$ . In the fourth mode,  $F > F_{abl} + \Delta F$ , the film breaks into two halves. The outer half flies away, and the inner one remains on the substrate.

The motion and thermal history of the film exfoliated in the heating spot due to its melt are analyzed. It is shown that the delaminated part forms a dome-shaped swelling, the movement of which is inhibited by surface tension. After stopping and turning the dome back towards the substrate, a jet begins to grow at its top. At the same time, due to the heat sink along the film, the process of recrystallization of the melt begins, which covers the dome first and then the jet. The liquid part of the jet is stretched and disintegrates into droplets due to the development of Plato – Rayleigh instability. The neck narrowing and the last drop are separated in the solidification zone between the crystalline and liquid parts of the jet, and the spread of the crystallization zone along the jet is ahead of the narrowing process. Therefore, rupture of the neck occurs already in the solid phase under non-equilibrium crystallization conditions (the melt temperature is hundreds of degrees below the melting temperature), the ultimate mechanical stresses and high rates of deformation. As a result, the jet turns into a high needle with an ultra-small radius of taper (units of nanometers).

[B] In studies of laser surface modification, an important place belongs to X-ray lasers as both heating the surface and diagnostic as a result of the small value of the wavelength of their radiation. We have shown that the combination of a powerful heating laser pulse in the optical frequency range and a femtosecond X-ray probe pulse generated by a free electron laser can detect the lattice dynamics in tantalum foil at ultrahigh strain rates from  $2 \times 10^8$  to  $3.5 \times 10^8$  s<sup>-1</sup>. The maximum drop in density from 8 to 10%, associated with the onset of spalling at a spall stress of ~ 17 GPa, was directly measured using x-ray diffraction. The experimental results of the density evolution are in good agreement with large-scale molecular dynamics modeling of shock wave propagation and sample destruction. The developed experimental technique opens up a new path to the study of ultrahigh strain rates in materials at the atomic level, including the dynamics of high-velocity cracks and polymorphic transformations in the solid phase of a substance.

Experimental and theoretical studies of surface modifications resulting from the action of both single and multiple picosecond pulses of a soft X-ray laser on such materials as gold (Au), copper (Cu), aluminum (Al) and lithium fluoride (LiF) have been carried out. The possibility of obtaining nanometer structures (~ 10–40 nm) formed on the surface of these materials at ultralow (~ 10–30 mJ / cm<sup>2</sup>) fluence values for a single picosecond pulse was experimentally shown. The experimental results were compared with the atomic model of ablation, which was developed for the interaction of a single x-ray laser pulse with dielectrics and metals. A theoretical description of surface nanostructures has been carried out and it has been shown that such structures are formed after exposure to laser radiation in the process of mechanical spallation of an ultrathin surface layer of molten metal. Lamination is accompanied by strong foaming of the melt, destruction of the foam and freezing of foam residues. These residues form chaotic nanostructures that are observed in experiments. Our results show that the tensile stress created in LiF and metals by a short X-ray pulse can lead to spall ablation of the target even for radically small fluence values, which opens up new possibilities for the material nano-processing.

Refractory metals serve as the material of mirrors for X-ray light, therefore it is important to study their behavior under the action of X-rays. We have investigated the behavior of ruthenium targets under the action of an ultrashort x-ray pulse. The electronic spectrum of ruthenium is calculated using density functional theory. The thermodynamic functions and kinetic

coefficients of ruthenium, which are necessary for use in a hydrodynamic code describing the dynamics of sample transformation, are calculated. These thermodynamic functions include pressure and internal energy, and the kinetic coefficients under consideration are the electron thermal conductivity and the coefficient responsible for the energy exchange between electrons and ions. All characteristics are calculated in a two-temperature situation when the temperature of the electrons exceeds the temperature of the ions. The coefficient of electron-ion heat transfer is quite high in Ru, and decreases with increasing electron temperature. Therefore, electron-ion relaxation proceeds rather quickly. Equalization of the electron and ion temperatures takes about one picosecond. Temperature relaxation takes place in a narrow layer in the case of oblique illumination of the mirror with an X-ray laser, because the depth of attenuation is very small (3.5 nm). Using the obtained information on the equation of state and electronic kinetic properties, we studied the thermal and hydrodynamic processes initiated by a soft X-ray pulse in a ruthenium film.

[C] Understanding the phenomena of material destruction at extremely high strain rates is a key issue for a wide range of scientific research ranging from applied science and technological developments to areas of basic science, such as the interaction of laser radiation with matter or geology. In this case, the study of this important issue is based on the description of both atomic scales and macroscopic processes. Our studies show that in this early time interval, the effect of increased electron pressure caused by the appearance of a non-equilibrium two-temperature situation during the absorption of an ultrashort laser pulse is significant. The combination in the experiment of an intense heating laser pulse of the optical range and a femtosecond X-ray probe pulse from a free electron laser, which made it possible to investigate the lattice dynamics in a tantalum film at ultrahigh strain rates, clearly demonstrates the importance of the initial stage of the interaction of an ultrashort laser pulse with a metal, the large role of electron pressure in dynamic processes in the surface layer of the irradiated target.

[D, E] An important place when considering the effects of laser radiation on a condensed substance belongs to the study of fragmented substances both before and after the interaction.

Using the fundamental properties of light scattering, it is strictly proved that there is an upper limit of light absorption by a particle of finite size for any partial multipolarity, and this limit has been explicitly calculated. The limit is some simple universal function exclusively of the wave number of the incident light and the multipolarity of the corresponding partial mode. It does not depend on the optical constants of the scattering particle, its size or even shape. We also proved that the maximum partial absorption cross section for any scatterer cannot exceed the corresponding value for a homogeneous sphere in the three-dimensional case and a circular cylinder in the two-dimensional case.

The process of ablation of the gold surface into water under the action of a femtosecond laser pulse, whose energy is absorbed in the skin layer of gold after passing through transparent water, is considered. Two-temperature one-dimensional hydrodynamic calculations of the expansion of a strongly heated surface layer of gold melt into water were carried out. Expansion leads to the nucleation of steam cavities in the melt. As a result, a layer of a two-phase mixture of liquid and vapor gold phases appears. Braking the expansion of gold with water leads to the formation of a contact layer of gold, in which the two-phase mixture returns to a single-phase state. A single-phase gold contact layer is bordered by water through which a shock wave propagates. In a non-inertial coordinate system associated with a contact, inhibition is equivalent to the effect of a gravitational field. Thus, the denser gold melt is in a state in which the melt is maintained in the field of gravity by the pressure of a liquid of low density. The contact boundary between gold and water is strongly deformed due to the development of Rayleigh – Taylor instability. The results of large-scale molecular-dynamics modeling of ablation of gold into water are presented, which fully confirm the possibility of developing the Rayleigh-Taylor instability. The instability leads to the formation of gold nanoparticles of capillary scale during the fragmentation of jets of liquid gold.

An experimental and numerical study of the mechanisms of fragmentation of a micron-sized metal droplet irradiated with ultrashort laser pulses was carried out. Experimental results show that rapid one-sided heating of such a drop may lead to symmetrical or asymmetric expansion, followed by various fragmentation scenarios. A simulation of the expansion of a drop of liquid tin, caused by initial conditions similar to the experimental conditions, was performed using the “smooth particle hydrodynamics” (SPH) numerical method. Simulations show that fast heating of a thin surface layer generates an ultrashort shock wave propagating from the front side to the back side of the drop. The convergence of such a shock wave with subsequent discharge tail to the center of the drop leads to material cavitation within the central zone, caused by a strong tensile stress. The reflection of the shock wave from the back side of the drop produces another area of highly stretched material where spalling may occur, creating a thin exfoliated layer moving at a speed exceeding the expansion speed of the liquid shell around the central cavity.

We used the effective numerical SPH method to study the destruction of ceramics (boron carbide, silicon carbide and aluminum nitride), as well as to study the initiation of detonation in porous explosives, unlike the other (dislocation) model we used to consider detonation in polycrystalline explosives. Considering the fact that parallel computations are widely used in our numerical calculations, a highly adaptive load balancing algorithm has been developed for parallel modeling when particle methods such as molecular dynamics and hydrodynamics of smoothed particles (SPH) are used. Our algorithm is based on the dynamic spatial decomposition of samples of the simulated material between Voronoi subdomains, where each subdomain with all its particles is processed by one computing process, which is usually performed on one core of a multiprocessor computing cluster.

[F, G] In the molecular dynamics modeling widely used in our numerical calculations, an adequate description of interparticle interactions, which in metals have an essentially multi-particle character, is of great importance. In our calculations of mass and heat transfer between vapor and condensed state in argon, as well as considering the process of ablation of the gold surface into water under the action of a femtosecond laser pulse, we created argon-argon, gold-gold, water-gold and water-water interaction potentials. We have studied the conductivity of liquid metals, to find the structural factor of which we constructed interatomic interaction potentials taking into account many-particle effects in aluminum and copper.

A special website has been created on the Internet dedicated to the project <http://laser.itp.ac.ru/RNF-14-19-01599/index.html>

##### **5.5. Перечень публикаций по проекту за весь срок выполнения проекта (заполняется автоматически на основании форм 2о)**

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.)

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 острогофокусированным лазерным пучком** Квантовая Электроника (2017 г.)

3. Ванг К.В., Кучмижак А.А., Ли, К., Йюдказиз 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.)

4. 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.)

5. 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.)

6. 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.)

7. Иногамов Н.А., Хохлов В.А., Петров Ю.В., Жаховский В.В., Мигдал К.П., Ильнитский Д.К., Хасегава Н., Нишилино М., Ямагиwa М., Ишино М., Кавачи Т., Фаенов А.Я., Пикуз Т., Баба М., Минами И., Суемото Т. (Inogamov, N. A.; Khokhlov, 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.)

8. Кохумура И., Жаховский В., Такей Д., Сузуки И., Такеши А., Иноуе И., Инубуши И., Иногамов Н., Ишикава Т., Ябаши 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.)

9. Кохумура И., Жаховский В., Такей Д., Сузуки И., Такеши А., Иноуе И., Инубуши И., Иногамов Н., Ишикава Т., Ябаши 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**

- 
10. 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.)
- 
11. Мирошенко 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.)
- 
12. 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.)
- 
13. 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.)
- 
14. Свяковский С.Е., Терновский В.В., Трибельский М.И. (Svyakhovskiy, S. E.; Ternovskiy, 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.)
- 
15. Фаенов А., Пикуз Т, Ишино М., Иногамов Н., Жаховский В., Скобелев И., Хасегава Н., Нишикино М., Кандо М., Кодама Р., Кавачи, Т (Faenov, A.; Píkuz, T.; Ishino, M.; Inogatov, 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.)
- 
16. Хохлов В.А., Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Ильнитский Д.К., Мигдал К.П., Шепелев В.В. (Khokhlov, V. A.; Inogatov, N. A.; Zhakhovsky, V. V.; Il'nitsky, D. K.; Migdal, K. P., Shepelev, V. V.) **Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation** AIP Conference Proceedings (2017 г.)
- 
17. 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.)
- 
18. Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. (Inogatov, 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.)
- 
19. Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. (Inogatov, 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.)
- 
20. Григорьев С.Ю., Лакатош Б.В., Криворуков М.С., Жаховский В.В., Дьячков С.А., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., Иногамов Н.А., Виноходов А.Ю., Компанец В.О., Сидельников Ю.В, Кривцин В.М., Кошелев К.Н., Медведев В.В. (Grigoryev, S. Y.; Lakatos, B. V.; Krivokorytov, M. S.; Zhakhovsky, V. V.; Dyachkov, S. A.; Il'nitsky, D. K.; Migdal, K. P.; Inogatov, N. A.; Vinokhodov, A. Y.; Kompanets, V. O.; Sidelnikov, Y. V.; Krivtsov, V. M.; Koshelev, K. N. & Medvedev, V. V.) **Expansion and fragmentation of a liquid-metal droplet by a short laser pulse** PHYSICAL REVIEW APPLIED (2018 г.)
- 
21. Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Егорова М.С., Григорьев С.Ю., Жаховский В.В., Медин С.А. (Dyachkov, S. A.; Parshikov, A. N.; Egorova, M. S.; Grigoryev, S. Y.; Zhakhovsky, V. V. & Medin, S. A.) **Explicit failure model for boron carbide ceramics under shock loading** J. Appl. Phys. (2018 г.)
- 
22. Жаховский В.В., Крюков А.П., Левашов В.Ю., Шишкова И.Н., Анисимов С.И. (V.V. Zhakhovsky, A.P. Kryukov, V.Yu. Levashov, I.N. Shishkova, S.I. Anisimov) **Mass and heat transfer between evaporation and condensation surfaces: Atomistic simulation and solution of Boltzmann kinetic equation** Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS) (2018 г.)
- 
23. Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А. (Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogatov, N. A.) **Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse. Part I: Plasmonics** Journal of Physics: Conf. Series (2018 г.)
- 
24. Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А. (Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogatov, N. A.) **Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse. Part II** Journal of Physics: Conf. Series (2018 г.)
- 
25. Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликин А.М., Иногамов Н.А. (Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogatov N., A.) **Laser-induced formation of holograms for generation of plasmons** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)

- 
26. Ильницкий Д.К., Дьячков С.А., Иногамов Н.А., Жаховский В.В. (Ilnitsky, D. K.; Dyachkov, S. A.; Inogamov, N. A. & Zhakhovsky, V. V.) **Mechanical anisotropy of energetic polycrystals as possible initiation mechanism** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)
- 
27. 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** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)
- 
28. Иногамов Н.А., Жаховский В.В. Хохлов, В.А. (N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov) **Warm dense matter in extremely small volume - Hydrodynamics of nanofilms triggered by laser irradiation at diffraction limit** AIP Conference Proceedings (2018 г.)
- 
29. Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. (Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Khokhlov V.A.) **ДИНАМИКА АБЛЯЦИИ ЗОЛОТА В ВОДУ** Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики (2018 г.)
- 
30. Иногамов Н.А., Хохлов В.А., Жаховский В.В. (Inogamov, N. A.; Khokhlov, V. V. Zhakhovsky, V. A.) **Формирование уединенной микроструктуры и абляция в прозрачный диэлектрик при субнаносекундном лазерном воздействии** Письма в ЖЭТФ (2018 г.)
- 
31. 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** AIP Conference Proceedings (2018 г.)
- 
32. Мигдал К.П., Петров Ю.В., Жаховский В.В., Иногамов Н.А. (Migdal, K. P.; Petrov, Y. V.; Zhakhovsky, V. V. & Inogamov, N. A.) **Electrical resistivity of liquid expanded metals by Ziman approach** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)
- 
33. Мурзов С.А., Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Егорова М.С., Жаховский В.В. (S A Murzov, S A Dyachkov, A N Parshikov, M S Egorova and V V Zhakhovsky) **Multiscale smoothed particle hydrodynamics simulation of detonation initiation** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)
- 
34. Хохлов В.А., Жаховский В.В., Петров Ю.В., Шепелев В.В., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., Иногамов Н.А. (Khokhlov, V. A.; Zhakhovsky, V. V.; Petrov, Y. V.; Shepelev, V. V.; Ilnitsky, D. K.; Migdal, K. P. & Inogamov, N. A.) **Dynamics of ruthenium mirror under action of soft x-ray ultrashort laser pulse** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)
- 
35. Егорова М.С., Дьячков С.А., Паршикова А.Н., Жаховский В.В. (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 Communications (2019 г.)
- 

5.6. Возникли исключительные права на результаты интеллектуальной деятельности (РИД), созданные при выполнении проекта:

Нет

### 5.7. Публикационные показатели реализации проекта

(нарастающим итогом, данные формируются автоматически)

Показатели публикационной активности приводятся в отношении публикаций, имеющих соответствующую ссылку на поддержку Российского научного фонда.

Плановые значения указываются только для показателей, предусмотренных соглашением.

Показатели	Единица измерения	2017 г.		2017-2018 г.	
		план	факт	план	факт
Количество публикаций по проекту членов научного коллектива в рецензируемых российских и зарубежных научных изданиях, индексируемых в базах данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (SCOPUS)	Ед.	5	15	17	31
Число цитирований публикаций по проекту членов научного коллектива в научных журналах, индексируемых в международной базе данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) в отчетном году	Ед.		35		54
Количество публикаций по проекту членов научного коллектива в изданиях, учитываемых в базе данных «РИНЦ»	Ед.	5	13	17	20
Количество монографий по проекту членов научного коллектива	Ед.		0		0
Количество зарегистрированных результатов интеллектуальной деятельности по проекту членов научного коллектива	Ед.		0		0

**5.8. Научным коллективом опубликовано с указанием на получение финансовой поддержки от Фонда по направлению научного исследования не менее 10 публикаций в изданиях, индексируемых в базах данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus), не менее 10 публикаций в изданиях, учитываемых в Российском индексе научного цитирования:**

да

**Сведения о публикациях требуют корректировки (в том числе имеется дублирование)**

да

**Пояснения о необходимых изменениях в публикациях, представленных в отчетах прошлых лет\*:**

\* В случае корректировок указать название публикации.

1. 1. (здесь и далее номер в 5.5). 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

Q1

2. Опубликованы:

10. 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.) Т.18, вып. 1. <http://chemphys.edu.ru/issues/2017-18-1/articles/697/>

Опубликованы фактически в 2018 году:

5. 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., 2018, V. 946, 012008, DOI: 10.1088/1742-6596/946/1/012008,

<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/946/1/012008/pdf>

8-9 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 Appl. Phys. Lett., 2018, V. 112, 123103,

DOI: 10.1063/1.5020318

Приложение (Supplementary material)

[ftp://ftp.aip.org/epaps/appl\\_phys\\_lett/E-APPLAB-112-019813](ftp://ftp.aip.org/epaps/appl_phys_lett/E-APPLAB-112-019813)

Опечатка в фамилии первого автора. Должно быть: Коумура И., Жаховский В., Такей Д., Сузуки И., Такеши А., Иноуе И., Инобуши И., Иногамов Н., Ишикава Т., Ябаши М.

11-12. Мирошенко А. Е. и Трибельский М. И. (Miroshnichenko, A. E. & Tribelsky, M. I.) Ultimate Absorption in Light Scattering by a Finite Obstacle, Physical Review Letters, 2018, V. 120(3), 033902,

DOI: 10.1103/PhysRevLett.120.033902,

Приложение (Supplementary material)

<https://journals.aps.org/authenticate?rt=/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.120.033902>

21. Григорьев С.Ю., Лакатош Б.В., Криворуков М.С., Жаховский В.В., Дьячков С.А., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., Иногамов Н.А., Виноходов А.Ю., Компанец В.О., Сидельников Ю.В., Кривцин В.М., Кошелев К.Н., Медведев В.В. (Grigoryev, S. Y.; Lakatos, B. V.; Krivokorytov, M. S.; Zhakhovsky, V. V.; Dyachkov, S. A.; Ilnitsky, D. K.; Migdal, K. P.; Inogamov, N. A.; Vinokhodov, A. Y.; Kompanets, V. O.; Sidelnikov, Y. V.; Krivtsun, V. M.; Koshelev, K. N. & Medvedev, V. V.) Expansion and fragmentation of a liquid-metal droplet by a short laser pulse, PHYSICAL REVIEW APPLIED, V. 10, 064009,

DOI: 10.1103/PhysRevApplied.10.064009

3. Публикации с приложениями 8-9 и 11-12 можно считать как одну публикацию и приложения (9 и 12, в списке как не индексируемые публикации) убрать как дублирующие.

**5.9. Возможность практического использования результатов проекта в экономике и социальной сфере (при наличии, в том числе формировании научных и технологических заделов, обеспечивающих экономический рост и социальное развитие Российской Федерации, создание новой или усовершенствование производимой продукции (товаров, работ, услуг), создание новых или усовершенствование применяемых технологий)**

Настоящим подтверждаю:

- самостоятельность и авторство текста отчета о выполнении проекта;
- что при обнародовании результатов, полученных в рамках реализации поддержанного РНФ проекта, научный коллектив ссылался на получение финансовой поддержки проекта от РНФ и на организацию, на базе которой выполнялось исследование;
- свое согласие с опубликованием РНФ сведений из итогового отчета о выполнении проекта, в том числе в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»;
- что проект не имел других источников финансирования;
- что проект не являлся аналогичным\*\*\*\* по содержанию проекту, одновременно финансируемому из других источников.

---

\*\*\*\* Проекты, аналогичные по целям, задачам, объектам, предметам и методам исследований, а также ожидаемым результатам. Экспертиза на совпадение проводится экспертным советом Фонда.

---

Подпись руководителя проекта \_\_\_\_\_/С.И. Анисимов/



## Изменения в составе участников

Жаховский Василий Викторович

Иногамов Наиль Алимович

Петров Юрий Васильевич