

## 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</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>+7 9165194694, anisimov@itp.ac.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 2015 г.: <b>1800 тыс. руб.</b>	Год начала проекта: <b>2014</b>	Год окончания проекта: <b>2016</b>
	Объем финансирования, запрашиваемый на 2016 год: <b>1800 тыс. руб.</b> (для продолжающихся проектов)	
Перечень приложений к отчету	1. Копии публикаций в соответствии с Formой 2о - 7 шт. на 14 стр. в 1 экз. <i>К печатному экземпляру отчета прикладываются только копии первой (с указанием авторов) страницы и страницы со ссылкой на поддержку отРНФ.</i>  2. Иллюстрированный текст, приложенный в п. 1.6 на 35 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 декабря 2015 г.</b>
Подпись руководителя организации Либо уполномоченного представителя, действующего на основании доверенности. В случае подписания форм уполномоченным представителем организации (в т.ч. – руководителем филиала) к печатному экземпляру отчета прилагается доверенность (копия доверенности, заверенная печатью организации).  _____ /		
Печать организации		

Отчет о выполнении проекта  
№ 14-19-01599  
«Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в  
трехмерной геометрии»,  
в 2015 году

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

Формируется в соответствии с заявкой.

1). Важной составляющей работы по гранту РНФ являются исследования наноструктурирования поверхности мишеней в результате воздействия ультракороткого лазерного импульса (УКЛИ). Эти работы имеют широкий круг приложений, например, изменение оптических характеристик обработанной поверхности или резкое изменение смачиваемости – после обработки гидрофильная поверхность превращается в гидрофобную. В 2015 г. будет закончен цикл работ по изучению трансформации наноструктур в зависимости от размера пятна фокусировки на поверхности мишени. Морфология структур качественно меняется при уменьшении пятна воздействия, так сказать некоторые формы просто «не помещаются» в малых пятнах. Будет изучено, каким образом параметры мишени, речь идет о пленках, напыленных на подложки, сказываются на характере наноструктур. Поскольку темп остывания определяет темп рекристаллизации структур, а от соотношения между скоростью рекристаллизации и гидродинамическими скоростями зависит морфология, то ясно, что меняя параметры тепловой задачи можно управлять формированием структур. Такой подход потенциально может иметь важные последствия для будущих технологий выращивания наноструктур заданного вида.

2). Будет продолжена деятельность по изучению свойств веществ в состояниях с возбужденной электронной подсистемой. Термализация электронов при сильных возбуждениях (температуры электронной подсистемы единицы эВ) происходит быстро, за несколько фемтосекунд, поэтому можно говорить о горячих электронах и о двухтемпературной системе. Наши предыдущие исследования опирались на решение кинетического уравнения в приближении времени релаксации. Новым при этом было то, что не предполагалась малость электронной температуры по сравнению с энергией Ферми. При этом использовались результаты нашего моделирования с помощью теории функционала плотности (DFT, Density Functional Theory) для определения электронного спектра, вычислялась плотность электронных состояний конкретных металлов. Параметры спектра входили в решение кинетического уравнения. В 2015 г. будут применены новые методики, которые используют технику квантовой молекулярной динамики (QMD, Quantum Molecular Dynamics), обобщенную на двухтемпературный (2Т) случай (2Т-QMD).

Пока работы в этом направлении, которые мы считаем весьма перспективными, можно пересчитать по пальцам. Они ведутся только 1-2-мя коллективами, которые являются крупными специалистами по DFT и QMD. Нам предстоит выяснить влияние ионной упорядоченности (нагрев, плавление) на двухтемпературное уравнение термодинамического состояния. И сверить полученные данные с нашими и другими литературными данными, которые были получены в обычно молчаливо предполагавшемся предположении о независимости электронной и ионной подсистем (1 - электронный спектр реагирует на плотность, но не на упорядоченность, а значит ионную температуру; 2 – межатомное взаимодействие слабо реагирует на электронную температуру).

Другая важнейшая составляющая – это вычисление с помощью QMD и формулы Кубо-Гринвуда проводимости и теплопроводности двухтемпературного вещества в твердом и жидком

состояниях. Требуется вычислить проводимость и теплопроводность и сверить полученное с нашими предыдущими вычислениями с помощью кинетической теории и тау-приближения. С одной стороны это проверка наших предыдущих вычислений, с другой это серьезный способ расчета транспортных свойств двухтемпературной конденсированной фазы.

3). Много сил потрачено в отчетном году на молекулярно-динамические расчеты ударных волн (в основном алюминий и никель) двухступенчатой формы (упругий и пластический скачки). С другой стороны, были проведены гидродинамические расчеты по двум моделям пластичности (модель Прадтля-Рейса и дислокационная модель). В 2015 г. эта работа будет продолжена, в результате будут получены эмпирические параметры, входящие в эти модели в условиях, которые характерны для лазерных экспериментов.

4). Будут выполнены гидродинамические и тепловые расчеты с помощью разностных (не МД) многомерных кодов. Коды были разработаны и приспособлены к условиям лазерного эксперимента в течение предыдущего этапа выполнения гранта РФФИ. Теперь предстоит применить их для практических расчетов. Это позволит нам анализировать существенно неоднородные ситуации на больших временах порядка наносекунд, до которых нелегко «дотянуть» МД моделирование.

Данный подход позволит нам исследовать важные явления инкубации при нескольких последовательных лазерных выстрелах. Кроме того, будет видно, как устроены зона, в которой поглощенный флюенс пересекает порог абляции.

5). Будут выполнены расчеты разогрева, перехода в двухтемпературное состояние, двухтемпературной релаксации электронной и ионной подсистем, вместе с описанием гидродинамического расширения сферической наночастицы после воздействия на неё УКЛИ. Мы изучим как случай расширения в вакуум, так и случай, когда наночастица погружена в окружающую среду. Окружающая среда будет либо жидкой (эмульсия наночастиц), либо твердой (твердый раствор наночастиц). Это важная для практики часть нашей работы в 2015 г. Дело в том, что такие воздействия уже применяются в опытах для изменения распределения наночастиц по размерам или для их разрушения.

6). Будет продолжено решение задачи об абляции твердой мишени в конденсированную (твердую или жидкую) среду. На сегодня с такого рода абляцией связан основной способ производства наночастиц.

7). Будет разработан новый EAM (Embedded Atom Model) потенциал железа. МД расчеты полиморфных превращений в ударных волнах в железе невозможны без потенциала, который корректен в области альфа – эpsilon перехода. EAM потенциал основан на нахождении трех функций. Эти функции в нашем подходе аппроксимируются рациональными функциями. Подгонка коэффициентов трех рациональных функций EAM будет осуществляться с помощью метода подгонки напряжений (stress-matching method) по базе данных напряжений рассчитанных из первых принципов. В базу данных будут вноситься компоненты тензора напряжений, рассчитанных при однородном и трех одноосных сжатиях кристалла в широком диапазоне давлений при абсолютном нуле температуры. Известные давления, при которых происходят фазовые переходы ОЦК решетки железа в ГПУ и ГЦК решетки, также будут использованы в качестве условий подгонки. Кроме того, в базу данных будут входить такие экспериментальные величины как упругие постоянные, энергия связи кристалла, и энергия образования вакансии.

8) В план 2015 г. вносится также новая задача, которая не входила в первоначальную заявку на

грант РФФИ. Речь идет о генерации ударной волны лазерным импульсом и явлениях, которые возникают на тыльной стороне пленки. Лазер воздействует на фронтальную сторону пленки. Пленка имеет две границы – фронтальную и тыльную. Тыльная сторона может быть контактом с вакуумом или с конденсированной средой (твердой или жидкой). Воздействие лазера создает ударную волну, которая распространяется от фронтальной стороны к тыльной границе.

Выход ударной волны на тыльную границу изучался ранее в наших работах и работах других авторов. При этом первоначально тыльная граница была гладкой (идеальная плоскость без возмущений). Новая интересная постановка, которая будет исследована в 2015 г., связана с постановкой, в которой на тыльной границе имеются начальные (т.е. до прихода ударной волны) возмущения. Это обобщение классической задачи о гидродинамической неустойчивости Рихтмайера-Мешкова на случай лазерной инициации ударной волны и конденсированных сред. Интерес представляет разрушение возмущенной границы и генерация твердых или жидких наночастиц.

## **1.2. Заявленные научные результаты на конец года**

Формируется в соответствии с заявкой.

1). Будут описаны все динамические режимы эволюции пленки на подложке. Изучение этой задачи интересно само по себе и в связи с проблемой формирования наноструктур под действием УКЛИ. Хотя имеется достаточно работ по эволюции пленок (первыми, кстати, были работы нашей группы), но там речь шла о свободных пленках. В них свободными (т.е. границами с вакуумом) были и фронтальная, и тыльная поверхности. При контакте одной из границ с конденсированной средой (пленка на подложке) ситуация меняется качественно. В 2015 г. соответствующие явления будут детально описаны.

Задача об эволюции пленки на подложке решается также в связи с проблемой наноструктурирования пленок. Будут проведены серии расчетов, которые позволят изучить механизмы наноструктурирования и то, каким образом вариация параметров задачи сказывается на конечных структурах.

2). Будут выполнены расчеты уравнения состояния и транспортных коэффициентов веществ в двухтемпературных состояниях. Для этого будут использованы пакеты прикладных программ QMD. Результаты будут сопоставлены с нашими предыдущими результатами, в которых использовались решения кинетического уравнения в тау-приближении в двухтемпературной среде при произвольном отношении электронной температуры и энергии Ферми.

3). Будут детально сопоставлены гидродинамические решения для ударных волн с учетом упругости и пластичности среды и результаты МД моделирования. Это позволит определить совокупность настроечных параметров, используемых в полуфеноменологических моделях пластичности в гидрокодах. Речь идет об анализе генерации реальных ударно-волновых структур под действием лазерного воздействия.

4). Будут выполнены гидродинамические и тепловые расчеты с помощью разностных многомерных (в 2015 г. в двумерной геометрии) кодов. Коды были разработаны и приспособлены к условиям лазерного эксперимента в течение предыдущего этапа выполнения гранта РФФИ. Теперь они будут применены для анализа лазерных опытов.

5). Будут выполнены расчеты облучения наночастиц в виде шариков УКЛИ. Будут рассмотрены случаи (1) наночастицы в вакууме, (2)

наночастицы в твердого растворе и (3) наночастицы в составе эмульсии. Расчеты с помощью гидрокода будут включать полную двухтемпературную модель. Кроме того, будут проведены МД расчеты реакции наночастиц на быстрый нагрев.

6). Будет решена задача об абляции твердой мишени в конденсированную (твердую или жидкую) среду.

7). Будет разработан новый EAM (Embedded Atom Model) потенциал железа. Будут проведены МД расчеты полиморфных превращений в ударных волнах в железе. Результаты будут сопоставлены с данными гидродинамического моделирования таких волн. Конечной целью является анализ уже проведенных в лаборатории М.Б. Аграната экспериментов по лазерной генерации ударных волн в железе.

8) В 2015 г. будет решена задача о выходе лазерной ударной волны на шероховатую тыльную границу. Будет изучено развитие неустойчивости Рихтмайера-Мешкова в конденсированных средах. Будут рассмотрены случаи как средних, так очень сильных ударных волн, за фронтом которых происходит плавление твердой среды. Будет изучено разрушение тыльной границы и формирование облака наночастиц вследствие такого разрушения.

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

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

Благодаря поддержке РФФИ удалось выполнить все запланированные на 2015 год работы и по большинству из них опубликовать или послать в печать полученные результаты. Разберем по пунктам.

1). Большой цикл исследований закончен по наноструктурам. Такие структуры возникают на облученной поверхности в результате воздействия ультракороткого лазерного импульса. Данные исследования продолжаются второй год. Прошлогодний этап подытожен в большой статье [1]. Важнейшим новым (по сравнению с [1]) достижением отчетного года является создание и применение комбинированного алгоритма МД+МК для моделирования формирования "нанобампов" или "микробампов" - уединенных структур на поверхности тонких пленок металлов в виде вспучивания пленки. Для наглядности, примеры таких структур, взятые из современных экспериментальных работ, приведены на рис. 1 и 2 в приложенном п. 1.6 файле. Комбинированный алгоритм представляет собой алгоритм, составленный из молекулярно-динамического (МД) кода MPD3 (доп. лит. [9]) и кода Монте-Карло (МК; поэтому МД+МК). Добавление МК блока позволило нам решить очень существенную проблему теплопроводностного охлаждения пленки и её кристаллизации в пятне возникновения нанобампа после расплавления пленки в пятне лазерного нагрева. Именно затвердевание определяет окончательную форму бампа. Отметим, что МД код MPD3 (доп. лит. [9]) обладает значительными преимуществами (по распределению атомов между процессорами и по быстродействию) перед программой LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov/>) при решении задач лазерного воздействия. Подчеркнем также, что впервые МД код переписан в сочетании с МК кодом для лазерных проблем. Это позволяет решить вопросы, связанные с потоками тепла по веществу, геометрическая форма которого сложна и меняется во времени. В нашей задаче с бампом, когда форма бампа меняется, имеют место растяжение (с уменьшением толщины оболочки) и утолщение оболочки в её центральной части, происходят разрывы оболочки. Тепловой поток огибает разрывы, проходит через участки тонкой или толстой пленки, и все это отслеживается МД+МК кодом совместно с описанием процесса динамической деформации бампа. Для решения сложнейшей задачи реального эксперимента,

представление о котором дают рисунки 1 и 2 в приложенном п. 1.6 файле, использовано много новинок. Эти новинки вместе с результатами, которые объясняют результаты опытов, описаны в подготовленных публикациях за 2015 год. Проанализировано также влияние размера пятна облучения на характер поверхностных структур [2-4] (это номера наших работ, выполненных в 2015 г. в рамках проекта РНФ, список внизу). Полученные новые существенные результаты докладывались на российских и основных международных конференциях по ударно-волновой, вычислительной и лазерной тематике, которые состоялись в 2015 г. Вот их перечень:

Эльбрус. Россия. <http://www.ihed.ras.ru/elbrus15/>

SCCM. Tampa, Florida, USA, June 14-19, 2015. <http://msl.cas.usf.edu/sccm-2015/>

PIERS. Prague, Czech Republic, 06-09 July, 2015. <http://www.piers.org/piers2015Prague/>

COLA. The 13th Conference on Laser Ablation (COLA-2015) Cairns, Australia, 31 August – 4 September 2015. <http://cola2015.org/>

ICCSP. International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond. September 6-10, 2015, Moscow, Russia. <http://csp2015.ac.ru/>

EMN.ultrafast. EMN Meeting on Ultrafast Research. Energy Materials Nanotechnology. November 16-19, 2015 Las Vegas, NV USA. <http://www.emnmeeting.org/ultrafast/>

NPP. Scientific-Coordination Workshop "Non-ideal Plasma Physics". November 27-28, 2015. Moscow. [http://www.ihed.ras.ru/npp2015/main/first\\_announcement\\_npp2015.php](http://www.ihed.ras.ru/npp2015/main/first_announcement_npp2015.php)

Статьи с благодарностью РНФ отправленные в редакцию:

[1-4] (это номера в списке статей, опубликованных в 2015 г. рамках данного проекта РНФ, см. в конце раздела)

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*.

N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Y.V. Petrov, et.al. "Rarefaction after fast laser heating of thin metal film on a glass mount," *AIP Conference Proceedings* .

V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, D.K. Ilitsky, K.P. Migdal, and V.V. Shepelev, "Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation," *AIP Conference Proceedings*.

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. Ser.*

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 Lett.*

В приложенном п. 1.6 файле рис. 3 и 4 приведено несколько иллюстраций, взятых из перечисленных выше работ. На левом из рисунков 3 представлена схема моделирования. Имеется сфокусированное на дифракционном пределе пятно нагрева. Показано отделение пленки от подложки внутри пятна нагрева. Движение этой области пленки под действием начальных скоростей (инерция) и капиллярных сил приводит к формированию бампа. Бамп принимает конечную форму, видимую в электронный микроскоп (см. рис. 1, 2 в файле п. 1.6), в результате быстрого затвердевания. Затвердевание связано с теплоотводом по пленке на холодную периферию или по пленке и с пленки, оставшейся в контакте, на подложку. Именно для описания охлаждения за счет электронной теплопроводности и рекристаллизации нам понадобился блок Монте-Карло. Из-за капиллярной "фокусировки" появляется поток вещества пленки в приосевую область, см. цитированные выше работы. В результате появляется возвышение над оболочкой бампа. Высота этого возвышения определяется темпом рекристаллизации. При быстрой рекристаллизации и малых скоростях успевают сформироваться только зародыш будущего приосевого образования, см. рис.3 (правая панель). Расчеты позволили понять процессы, происходящие на интервале времен от долей пикосекунды (длительности лазерных импульсов находятся в интервале от нескольких десятков фс до нескольких пс) до десятков нс, когда заканчиваются процессы отвердевания. Созданная физическая модель и проведенные расчеты позволили ставить вопросы об оптимизации лазерного воздействия с целью создания желаемых

структур.

В предстоящем 2016 г. году предстоит совместная работа с экспериментаторами в направлении конкретного сопоставления данных теории и опытов (см. пп. 3.1, 3.2 отчета).

2). За отчетный период нами продолжались работы по исследованию характеристик веществ в двухтемпературных состояниях. Как известно, указанные работы имеют исключительное значение для количественного численного моделирования ультракороткого лазерного воздействия. Кроме того, эти работы представляют самостоятельный интерес. Например, в настоящее время ведутся исследования по генерации терагерцового излучения при фемтосекундном воздействии. Причем генерация происходит именно на двухтемпературной стадии, когда температура электронов велика. Кроме того, высказываются идеи «проскочить» во время двухтемпературной стадии в такое термодинамическое состояние (возможно метастабильное) системы (новая кристаллическая модификация), которое недоступно, если пытаться достичь его термодинамически. Дело в том, что потенциал межатомного взаимодействия может существенно измениться из-за возбуждения электронов. На этом основаны уже известные явления нетеплового плавления и инициации когерентных фононных осцилляций. Правда, указанные поиски ведутся в классах сложных соединений (например, высокотемпературные сверхпроводники или топологические изоляторы). Но в любом случае (т.е. и в случае сложных, и в случае химически простых веществ) исследование изменения термодинамических и транспортных характеристик при возбуждении электронов в конденсированном состоянии необходимо вести, поскольку это определяет оптические свойства (а значит важный для баланса энергии коэффициент поглощения) и механический отклик вещества.

В 2015 году по направлению исследований термодинамических и кинетических свойств металлов в двухтемпературном состоянии с применением теории функционала плотности (DFT) и квантовой молекулярной динамики (QMD) были получены следующие результаты.

Проведён расчёт электронных внутренней энергии и давления с помощью DFT пакета VASP (описан в ссылках [10,11] дополнительной литературы) для золота и меди. Расчёт проведён для металлов с идеальной ГЦК решёткой с помощью метода PAW (доп.лит. [12]) для представления одноэлектронных волновых орбиталей - решений уравнения Кона-Шэма с функционалом обменно-корреляционного взаимодействия PBE (доп.лит. [13]). На основе данных из этого расчёта построены зависимости электронных давления и внутренней энергии от электронной температуры и плотности вещества в диапазоне плотности от 7.6 до 9.4 г/см<sup>3</sup> (медь, 19.4 - 22.7 г/см<sup>3</sup> для золота) и электронной температуры до 55 000 К. Также с помощью DFT получены сведения об изменении электронной структуры меди и золота при гидростатическом сжатии-растяжении и электронном нагреве. Эти данные были использованы при построении варианта двухпараболической модели для электронной структуры, исходно сформулированного в работе (доп.лит. [14]). Эта модель была использована для расчётов электронного коэффициента теплопроводности меди и золота, а также электрон-фононного теплообмена согласно теории Каганова-Лифшица-Танатарова, в модифицированном варианте согласно работе (доп.лит. [14]). Полученная электронная теплопроводность золота для случая комнатной ионной температуры и равновесной плотности 19.28 г/см<sup>3</sup> находится в согласии с данными П.А. Жилиева и др. (доп.лит. [15]). Данные DFT расчёта термодинамических и кинетических свойств для меди использованы при решении задачи о релаксации электронного возбуждения, вызванного фемтосекундным лазерным нагревом ультратонкой (70 нм) медной фольги. Эта задача была изучена в эксперименте по анализу поглощённого ультракороткого рентгеновского импульса, пропущенного через медную нанофольгу, нагретую фемтосекундным оптическим импульсом с умеренным вложением энергии на единицу площади (доп.лит. [16]). В результате проведённого двухтемпературного гидродинамического расчёта для медной нанофольги с параметрами, соответствующими экспериментальным (доп.лит. [16]), обнаружено хорошее согласие с

экспериментальными данными по времени электрон-ионной релаксации.

Более масштабное исследование термодинамики и кинетики твердой и расплавленной меди в двухтемпературном состоянии было проведено с помощью квантового молекулярно-динамического расчёта, проведённого в пакете VASP. Было рассмотрено поведение ячейки, содержащей 32 атома меди в периодических граничных условиях. Метод, определявший представление одноэлектронных орбиталей - решений уравнения Кона-Шэма, и вид обменно-корреляционного функционала были выбраны такими же, как в предыдущем исследовании. Для корректного воспроизведения фазового состояния ячейки использовались два метода термостатирования, различающиеся по методу нагрева ячейки из 32 атомов. При этом использовался термостат Нозе-Хувера. Дополнительно полученные с помощью термостатирования состояния выдерживались при постоянной энергии без термостата. Такая техника получения необходимых в дальнейших расчётах термодинамических состояний позволила более точно определить фазовое состояние меди при произвольных электронной и ионной температурах, а также плотности. Рассматривались электронная температура до 55 000 К, ионная температура до 15 000 К и плотность от 7.6 до 9.4 г/см<sup>3</sup>. В результате были получены данные о поведении электронного и ионного тепловых давлений в меди в указанном диапазоне плотности. Обнаружено изменение границы фазового перехода из твёрдого в жидкое состояние. Получены наборы конфигураций атомов при различных электронной и ионной температурах и плотностях, среди которых благодаря двум методам термостатирования обнаружены пары с разными фазовыми состояниями, одно из которых метастабильно.

Эти наборы были использованы для проведения расчёта электронных кинетических коэффициентов для двухтемпературной жидкой меди согласно теории Кубо-Гринвуда. Для проведения данного расчёта был использован пакет VASP. Поскольку для меди в указанных термодинамических условиях расчёт по данному методу проводился впервые для проверки использовались пакеты ABINIT [17,18] и Elk[19]. В пакете Elk реализован метод полноэлектронных расчётов электронной структуры FP-LAPW, что позволяет учесть более точно отклик всех электронных зон, а не только валентных зон в металлах, при воспроизведении электронной структуры в DFT пакетах, где использован метод псевдопотенциала (ABINIT, VASP). Проведено исследование на чувствительность к таким параметрам, как число атомов в ячейке, число незаполненных электронных состояний, тип функционала обменно-корреляционного взаимодействия (PBE и LDA). В результате расчёта электронной теплопроводности меди согласно теории Кубо-Гринвуда с помощью пакетов Elk, ABINIT и VASP обнаружено, что величина коэффициента теплопроводности многократно завышается в расчётах с помощью кодов, где используется псевдопотенциалы (ABINIT, VASP) по сравнению с полноэлектронным расчётом.

Получено качественное согласие для электронной теплопроводности жидкой меди при равновесной плотности на изобаре нулевого давления в точке плавления между данными полноэлектронного расчёта и полуаналитической модели, опирающейся на решения кинетического уравнения. Обнаружено, что электропроводимость меди практически не зависит от электронной температуры, что было обнаружено ранее Д.В. Князевым и П.Р. Левашовым для алюминия [20]. Показано, что результаты полноэлектронного расчёта для электронной теплопроводности и электропроводности позволяют обобщить закон Видемана-Франца на случай электрон-ионного неравновесия путём замены равновесной температуры на электронную в одноимённом соотношении. Изложенные в результаты квантовых молекулярно-динамических расчётов и расчётов согласно теории Кубо-Гринвуда были представлены на конференциях: COLA-2015 (Кэрнс, Австралия, 31 августа - 4 сентября 2015 г., постерный доклад Effect of electron subsystem on spallation dynamics of copper nanofoil, K.P. Migdal, Yu.V. Petrov, D.K. Ilnit'sky, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, D.V. Knyazev, P.R. Levashov) и Non-Ideal Plasma Physics - 2015 (Москва, устный доклад "Transport properties of solid and liquid copper with hot electrons", Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, D.V. Knyazev, P.R. Levashov). На основе материалов выступления на конференции COLA-2015 подготовлена и отправлена в



редакцию журнала

Applied Physics A статья "Thermodynamics and kinetics of d-band metals in two-temperature states" K.P. Migdal, Yu.V. Petrov, D.K. Il'it'sky, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, D.V. Knyazev, P.R. Levashov. На рис.5 в файле п. 1.6 (левая панель), взятом из этой статьи, показано влияние сжатия и нагрева электронной подсистемы на электронный спектр меди. Как можно увидеть, сжатие уширяет d-зону меди. Наоборот, повышение электронной температуры приводит к уменьшению ширины d-зоны. Вычисления с помощью QMD методики и формулы Кубо-Гринвуда представлены на правой панели этого рисунка.

Был рассмотрен вопрос нагрева электронной подсистемы пикосекундным импульсом мягкого рентгеновского лазера (длина волны 13.9 нм). В качестве мишени были использованы LiF, Al и Cu. Была поставлена задача – оценить нагрев электронной подсистемы по вспышке излучения от нагретой поверхности мишени. Энергия импульса была достаточна, чтобы вызвать ясно видимые повреждения поверхности. Но эмиссионный сигнал в видимом спектре оказался слабее порога чувствительности использованной аппаратуры. Исходя из данных о пороге чувствительности и представлений двухтемпературной теории, была выполнена оценка максимальной электронной температуры. Из этих расчетов было получено, что в примененном диапазоне флюенсов температура электронов меньше одного эВ. Это согласуется с выполненными нами двухтемпературными расчетами, согласно которым на пороге абляции (когда уже имеются повреждения поверхности) температура электронов должна быть порядка одного эВ [5] (это номер в списке статей, опубликованных в 2015 г. рамках данного проекта РФФ, см. в конце раздела).

Новые ультракороткие жесткие (УФ, рентген) лазеры позволяют селективно возбуждать электроны внутренних оболочек. В работе изучен отклик простого металла (Al,  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$ ) на возбуждение 2p дырок. Расчеты ведутся средствами молекулярной динамики. В течение того времени, которое существует дырка, изменяется потенциал межатомного взаимодействия. Изменение потенциала вычислено с помощью кода WIEN2k. Показано, что процесс плавления после возбуждения дырок по-прежнему определяется в основном электрон-фононной динамикой. Эффект изменения межатомного потенциала ограничен во времени временем жизни дырки порядка 100 фс. Это время порядка дебаевского времени для решетки [6] (это номер в списке статей, опубликованных в 2015 г. рамках данного проекта РФФ, см. в конце раздела). В принципе, изменение межатомного потенциала взаимодействия между атомом и атомом с дыркой является новым каналом разогрева ионной подсистемы. Как говорилось выше, сближение температур горячих электронов и холодных ионов - это важнейший процесс двухтемпературной физики. Этот процесс определяет продолжительность двухтемпературной стадии, на которой формируется слой нагрева в случае объемных мишеней.

Поэтому статья [6] представляется существенной. Стандартный канал сближения температур  $T_e$  и  $T_i$  связан с черенковским излучением фононов сверхзвуковыми горячими электронами, принадлежащими зоне проводимости. Эти электроны нагреты лазерным импульсом. Таким образом, в случае с дырками имеются два канала разогрева ионной подсистемы: стандартный и новый. В конкретных условиях алюминия для образования 2p-дырки необходим достаточно жесткий фотон, поскольку энергетическая щель  $E_g$ , отделяющая L-оболочку от зоны проводимости, составляет примерно 70 эВ. Тогда, для интересующих нас умеренных разогревов электронов  $T_e$  порядка единиц эВ, концентрация дырок (относительно атомной концентрации) невелика, порядка  $T_e/E_g$ . К тому же дырка живет короткое время. В этих условиях численно вклад нового канала в убыстрение двухтемпературной релаксации (сближение температур  $T_e$  и  $T_i$ ) невелик по сравнению со стандартным каналом.

Проведены DFT вычисления двухтемпературного уравнения состояния золота. Подобраны аналитические аппроксимации, которые с хорошей точностью аппроксимируют электронный вклад в давление и энергию. Показано, что часто применяемые чисто фермиевские приближения вносят существенную погрешность – результаты отличаются в разы при электронных

температурах 40-60 кК [7]. Эти результаты существенны при конкретном динамическом моделировании, поскольку, во-первых, существенно уточнены выражения для электронных давления и энергии, и, во-вторых, представлена аналитическая аппроксимация, удобная для применения в коде.

3). Важным является изучение генерации ударных волн с помощью ультракороткого лазерного импульса. В 2010 г. в этой области нами совместно с высококвалифицированными лазерщиками из лаборатории М.Б. Аграната ОИВТ РАН были получены неизвестные ранее результаты относительно существования далекого продолжения упругой адиабаты в область сжатий до десяти процентов (ранее считалось, что ударная волна переходит в пластический режим при сжатиях 0.5-1 %). Тогда опыты велись на алюминиевых пленках. Теория предсказывала существование мощнейших упругих предвестников, которые действительно были обнаружены в лазерных экспериментах. Теория опиралась на молекулярно-динамические (МД) расчеты.

МД расчеты являются весьма затратными в отношении требуемых компьютерных ресурсов. Возникла идея, для упрощения и ускорения моделирования, перенести закономерности, обнаруженные путем МД моделирования, на феноменологические модели, традиционно применяемые в гидрокодах. За отчетный период была проведена большая работа в этом направлении. Серии МД расчетов сравнивались с данными гидрокодов.

В результате молекулярно-динамических расчетов был обнаружен упруго-пластический коллапс сверхупругой ударной волны в монокристаллах металлов. Именно череда таких коллапсов и излучаемые при этом волны определяют механизм поддержания амплитуды мощного упругого предвестника. Промежутки времени между последовательными коллапсами флуктуируют около среднего значения. Поэтому в разрабатываемую феноменологическую модель вставлен фактор с элементом случайности.

Режим распространения двойного скачка с флуктуирующими возле среднего упругой и пластической ударными волнами моделировался в гидродинамических расчетах с использованием двух моделей пластичности (Прандтля-Рейса и дислокационной). Было показано, что классическая модель пластичности при данной нагрузке не описывает образование упругого предвестника. В дислокационную модель был добавлен член, отвечающий за гомогенную нуклеацию дислокаций. Причем резкий выброс плотности дислокаций производился вероятностным способом, в зависимости от времени, которое лагранжева частица провела под нагрузкой. Было получено хорошее согласие результатов молекулярно-динамических расчетов с гидродинамическими расчетами с подправленной таким образом дислокационной моделью пластичности. На рис. 6 в приложенном п. 1.6 файле показано распространение ударной волны согласно классической модели Прандтля-Рейса и в новой модели, которая вероятностным образом учитывает спонтанные выбросы дислокаций во время упруго-пластических коллапсов. Как видим, новая модель ухватывает формирование упругого предвестника. Результаты готовятся к публикации.

4). За отчетный период создан ряд многомерных программ. Имеется двумерная программа, описывающая двумерное поглощение лазерной энергии электронами, двумерное распространение тепла по электронной подсистеме вместе с одновременно протекающей электрон-ионной релаксацией. То есть это программа двумерной двухтемпературной модели. Имеются несколько многомерных гидродинамических программ, которые были проверены на выполнение задач физики взаимодействия излучения с веществом. Постановка задачи приведена на схеме на рис. 7 и ур. (1, 2) в приложенном п. 1.6 файле. На полупространство воздействует ультракороткий лазерный импульс. Если распределение поглощенной лазерной энергии однородно по горизонтальной оси  $y$  на этом рисунке, то задача является одномерной по оси  $x$ . В обратном случае необходимо решать неоднородную задачу. Пример расчета с периодической модуляцией поверхностной плотности поглощенной энергии показан на рис. 8 в приложенном п. 1.6 файле.

Моделирование отклика вещества на импульс объёмного энерговыделения производилось в плоской двумерной постановке. Консервативная конечно-разностная расчётная схема строилась в лагранжевых переменных на треугольной сетке. Схема второго порядка точности по пространству, явная, с искусственной вязкостью. Схема достаточно полно и строго описывает динамику упруго-пластической среды при импульсном нагружении. Объёмное энерговыделение от внешнего источника (лазер) учитывалось как источниковый член в уравнении баланса энергии. Термодинамические величины (давление, энергия, плотность) приписываются к центрам треугольных разностных ячеек, кинематические (скорость и координата) приписываются к узлам разностной сетки. Для определения момента перехода материала из упругого в пластическое состояние используется условие текучести Мизеса.

Был разработан двумерный конечно-разностный код, решающий гидродинамические уравнения с учетом теплопроводности. Была проведена серия тестовых расчетов и некоторые практические задачи в простейшей постановке. Пример с поглощением лазерного излучения металлом показан на рис. 9 в приложенном п. 1.6 файле. Металл заполняет полупространство справа на этом рисунке. Мишень из металла прикрыта пластиной из диэлектрика. В расчете на этом рисунке в качестве диэлектрика выбрано стекло. Лазерный пучок проходит через прозрачное стекло и поглощается в скин-слое металла. Далее поглощенная энергия распространяется в объем металла. Резкий подъем температуры сопровождается резким подъемом давления. Подъем давления приводит вещество мишени и пластины в движение. Теплопроводностью стеклянного слоя пренебрегаем. На рис. 9 в приложенном п. 1.6 файле рассматривается случай, когда пятно освещения имеет конечный размер. Пока результаты не доведены до уровня публикации.

За отчетный период закончены подготовительные мероприятия по задачам 5 и 6 плана. Разработана сферически симметричная версия двухтемпературной гидродинамической программы. Подготовлены цилиндрический и сферический варианты МД кода. Подготовлен EAM (Embedded Atom Method) потенциал межмолекулярного взаимодействия в квази-воде. Без такого потенциала невозможно начинать молекулярно-динамические расчеты. Потенциал воды создан самостоятельно в нашей группе. Он воспроизводит механические свойства воды при значительных амплитудах воздействия. А именно, воспроизводятся плотность, акустический импеданс, скорость звука в воде в широком диапазоне сжатий. На данный момент это охватывает диапазон требований, которые требуется выполнить для моделирования реакции водной среды на абляцию металла в воду. Следует отметить, что новый потенциал не предназначен для расчета фазовых переходов и тепловых свойств воды. EAM потенциал был построен за отчетный период методом согласования по давлениям и по данным об ударной адиабате воды из литературы.

Мы провели атомистические и гидродинамические расчеты расширения в вакуум жидкого оловянного цилиндра и сферы малого размера. Результаты расчетов для цилиндрического случая представлены на рис. 10 и 11 в приложенном п. 1.6 файле. Предполагалось, что лазерный прогрев происходит мгновенно и температура успеет однородно распределиться по малому объекту до начала расширения. Было обнаружено, что гидродинамическое подобие между МД и SPH расчетами сохраняется даже после начала процесса кавитации и фрагментации центральной части капли. В частности, профили плотности и давления, построенные в одинаковые нормированные времена, практически совпадают в обоих методах, как показано на рис. 11 в приложенном п. 1.6 файле. Как и в MD моделировании, в SPH расчете сходящаяся волна разрежения стартует со свободной поверхности цилиндра и движется к центру. Вскоре после 0.5 наносекунд отрицательное давление возникает в хвосте этой волны. Процесс откола в олове начинается, когда растягивающее напряжение превышает 1,7 ГПа. Отметим, что данный процесс не идентичен кавитации (нуклеации пузырьков) в жидком олове моделируемом методом MD, поскольку отсутствует учет поверхностного натяжения в SPH коде. Откол в SPH расчете связан с

механической неустойчивостью при растяжении частиц за спиноподальную линию (спиноподальная декомпозиция). В этом случае SPH частицы начинают терять соседей, что приводит к нарушению сплошности среды и образованию пор. Тем не менее, такие откольные явления очень похожи на фрагментацию олова через кавитацию и распад пены наблюдаемые в MD расчете. Аналогичное подобие также наблюдается при расширении однородно прогретого оловянного шара.

7). Очень большой объем работ выполнен за отчетный период по разработке нового EAM потенциала такого сложного материала как железо. Вместе с этими работами завершен цикл исследований по лазерной генерации ударных волн в железе. Это вопрос особенно интересен в связи с альфа-эпсилон полиморфным превращением в железе. Спрашивается, как в случае ультракороткого лазерного воздействия будет протекать данный переход? Наши предыдущие работы 2010 г. выявили важные особенности упруго-пластических ударных волн при их лазерной инициации. Но там рассматривался пример алюминия.

В последнее десятилетие быстрый рост доступных вычислительных ресурсов сделал возможным атомистическое моделирование больших систем имеющих размеры нескольких микрометров, что приближается к масштабу экспериментов с воздействием фемтосекундных лазеров на плёнки микрометровой толщины. Таким образом, стало возможно прямое молекулярно-динамическое (МД) моделирование ударно-волновых явлений, включая упруго-пластическую трансформацию и фазовые переходы в материалах, вызванных высокоскоростной деформацией. В настоящее время МД исследования подобных явлений могут быть проведены на образцах микрометрового размера в течение нескольких наносекунд.

Потенциальные возможности присущие атомистическому моделированию настолько велики, что способны привести к более глубокому пониманию разнообразных физических явлений вызванных высокоскоростной деформацией, которая может быть вызвана сверхбыстрым выделением или переносом энергии в металлах под действием лазерного импульса, под действием электрического разряда или во фронте ударной волны (УВ). Все подобные воздействия на материалы создают экстремальные градиенты давления ( $\sim 1$  ГПа/нм) и температуры ( $\sim 100$  К/нм), которые приводят к сложным сильно-неравновесным течениям вещества с возможными фазовыми переходами и нарушением сплошности в виде пузырей и трещин. Стоит отметить, что в отличие от МД, подходы, основанные на механике сплошной среды и уравнении состояния и которые широко используются в моделировании, внутренне не способны описать физику всех разнообразных высокоскоростных неравновесных процессов, таких как кавитация, трещинообразование и откол, возникновение дислокаций и упруго-пластическую трансформацию, а также кинетику неравновесных фазовых переходов. В наши дни МД метод становится серьёзным конкурентом гидродинамическим методам при моделировании явлений, где возникают большие градиенты физических величин, приводящие к быстрым деформациям и превращениям вещества.

Достоверность межатомного потенциала, используемого в таких экстремальных условиях, является критическим условием, необходимым для предсказательной силы МД моделирования. Примером одного из самых успешных подходов для МД моделирования металлов является подход с моделью погруженного атома (EAM). Это многочастичный потенциал. Многочастичность необходима для моделирования металлической связи. Первое поколение EAM потенциалов основывалось на простых аналитических функциях зарядовой плотности и энергии, имеющих физические основания в теории функционала плотности. Указанные выше работы дают потенциалы, оптимизированные только на общие свойства металлов, такие как равновесная плотность, энергия когезии и упругие константы при нормальных условиях вблизи нулевого давления и комнатной температуры.

Большинство интенсивно используемых современных EAM потенциалов были разработаны без связи с теоретическими представлениями о межатомных силах в твёрдом теле ради того, чтобы получить больше свободы при подгонке к экспериментальным данным и перво-

принципным квантовомеханическим расчётам. Поэтому эти потенциалы второго поколения, имеющие форму таблиц или набора сплайнов, являются более точными в своей области определения, чем ранее предложенные потенциалы первого поколения. Однако вне области параметров, где проводилась подгонка, потенциалы второго поколения часто не способны правильно описать свойства вещества. Поскольку интересующие нас физические процессы - такие как упруго-пластическая трансформация при ударном нагружении, неравновесные фазовые переходы в твердой фазе и плавление в УВ фронте, сильные растяжения, приводящие к кавитации в жидкой фазе и отколу в твердой, - происходят в результате экстремальных условий вызванных сверхбыстрым локализованным выделением энергии, то для заслуживающего доверия МД моделирования этих процессов необходимы потенциалы разработанные специально для применения в широком диапазоне давлений и температур.

Нами был разработан и протестирован новый EAM потенциал для железа с помощью метода подгонки напряжений (Zhakhovsky:2016, Ashitkov:2016)); см. в конце данного абзаца. Этот метод имеет целью конструирование EAM потенциалов специально настроенных на достоверное воспроизведение поведения материалов в широком диапазоне давлений и температур. В основе построения подгоночной базы данных лежит выбор атомных конфигураций соответствующих состояниям вещества возникающих при непрерывном холодном сжатии. Таким образом, в основе базы данных лежит *ab initio* уравнение состояния вещества при абсолютном нуле температуры, а именно кривая холодного давления  $P(V)$  при однородном сжатии/растяжении и компоненты тензора напряжений (тензора давлений)  $\sigma_{\{\alpha\beta\}}(V) = -P_{\{\alpha\beta\}}(V)$  при одноосных деформациях кристалла вдоль основных кристаллографических осей. Такой выбор конфигураций для подгоночной базы данных гарантирует, что построенный потенциал будет правильно описывать механический отклик твердого тела на различные деформации при больших сжатиях/растяжениях. Более того, гладкость потенциальной функции и построенных на ней холодных кривых тензора давлений гарантирует хорошее согласие не только с точками из подгоночной базы данных, но и между ними вдоль всех гладкой базовой кривой  $P_{\{\alpha\beta\}}(V)$ . С учетом того, что тепловая энергия и тепловое давление малы по сравнению с потенциальной энергией взаимодействия атомов и холодным давлением в плотной конденсированной фазе, можно ожидать, что потенциал даст также разумное термодинамическое поведение вещества вплоть до температур близких к критической.

(Zhakhovsky:2016) V. V. Zhakhovsky, K. P. Migdal, N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, "MD simulation of steady shock-wave fronts with phase transition in single-crystal iron," AIP Conference Proceedings (2016). (Благодарность РНФ. Отправлено в редакцию)

(Ashitkov:2016) S. I. Ashitkov, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, P. S. Komarov, M. B. Agranat, G. I. Kanel. "The behavior of iron under ultrafast shock loading driven by a femtosecond laser," AIP Conference Proceedings (2016). (Благодарность РНФ. Отправлено в редакцию)

Для вычисления на основе теории функционала плотности компонент тензора напряжений, а также плотности электронных состояний в холодном железе был использован код VASP. Эти данные, включенные в подгоночную базу данных, использовались в минимизации целевой функции, которая представляет собой сумму по базе данных взвешенных квадратов отклонений расчетных величин, полученных для EAM потенциала с пробным набором коэффициентов. Каждый член суммы имеет определенный вес, отражающий его важность для целей будущего МД моделирования. Кроме того, включенные в подгоночную базу экспериментальный параметр решетки, упругие константы, и давления фазовых переходов в твердом железе имели наивысший приоритет/вес в целевой функции. Меньший вес был приписан энергии образованию вакансии и энергии когезии холодного кристалла. DFT холодные кривые давления имели наименьшие веса, зависящие от степени сжатия, в особенности для сильных одноосных сжатий, которые практически недостижимы в экспериментальных условиях в силу развития пластических деформаций под действием сильных сдвиговых напряжений.

Помимо экспериментальных и DFT данных, в формулу целевой функции входили

дополнительные члены, необходимые для учета специальных требований, налагаемых на поведение холодных кривых и энтальпий ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток. Эти члены существенно увеличивали целевую функцию при нарушении этих требований, что заставляло алгоритм поиска минимума избегать несоответствующих пробных потенциалов. В частности, таким образом было учтено требование роста скорости звука со сжатием ОЦК решетки, а именно было наложено условие  $\partial c_0 / \partial V = \partial^2 p_{\{\alpha\}} / \partial V^2 > 0$ , как для объемного, так и для одноосных сжатий. Это условие применяется не только по точкам/узлам, включенным в подгоночную базу данных, но также и между ними на достаточно плотной сетке с малым шагом  $dV$  по степени сжатия  $V/V_0$ . Это условие исключает возможное появление нефизических осцилляций в кривой  $P(V)$  между узлами, что гарантирует желаемое гладкое поведение  $P(V)$ . Игнорирование условия роста скорости звука со сжатием при разработке потенциала может приводить нефизическому поведению вещества. В частности ЕАМ потенциал Менделева нельзя применять при давлениях превышающих 100 ГПа, как это видно из рис. 12 в приложенном п. 1.6 файле. Другой пример дополнительного условия, накладываемого на алгоритм минимизации целевой функции, следующий. Требуем, чтобы энтальпия холодной ГЦК фазы была выше энтальпии ГПУ фазы при любых сжатиях, см. рис. 13 в приложенном п. 1.6 файле. Это условие следует из известной экспериментальной фазовой диаграммы железа, где равновесная ГЦК фаза существует только при высоких температурах.

Минимизация целевой функции осуществлялась комбинированным методом, включающим в себя метод катящегося многогранника и метод случайного блуждания. Локальный минимум, обнаруженный подпрограммой АМОЕВА, возмущается вектором случайного смещения, с которого вновь начинается поиск нового локального минимума. Этот процесс повторяется до тех пор, пока поиск находит все более глубокие локальные минимумы. После того как глубина вновь обнаруживаемых локальных минимумов не растет в течение примерно часа, поиск останавливается. Затем процедура повторяется с новыми начальными коэффициентами, которые соответствуют некоторому не патологическому ЕАМ потенциалу. После нескольких таких попыток лучший среди всех потенциал считается найденным и поиск прекращается. Описанный выше последовательный алгоритм в действительности реализован в параллельной программе поиска, в которой каждый процессор независимо ищет свой лучший минимум, а мастер-процессор сравнивает их и сохраняет оптимальный. Используя сотни процессоров, программа способна гораздо подробнее просканировать многомерное пространство и найти лучший вариант, чем последовательная программа за отведенное время. Но, даже используя параллельный код, мы не гарантированы, что найден глобальный минимум, задача по поиску которого колоссально трудна. К счастью, решение этой задачи не является нашей целью.

Кривые холодного давления рассчитанные новым ЕАМ потенциалом приведены на рисунках 12, 14 и 15 в приложенном п. 1.6 файле. Среднее относительное отклонение вычисленных компонент напряжений от DFT данных составило около 9%. Область применимости нового потенциала ограничена сжатиями до  $V/V_0=0.5$  и максимальным давлением около 800 ГПа (такие высокие давления не показаны на рисунках). Там же приведены для сравнения кривые, полученные из потенциала Менделева. Вблизи равновесия оба потенциала практически совпадают, однако при сжатии выше 50 ГПа расхождения нарастают, и потенциал Менделева становится неприменим при сжатиях выше 100 ГПа. Другое важное отличие этого потенциала состоит в том, что он дает фазовый переход из ОЦК в ГПУ решетку при 57.1 ГПа, что значительно выше экспериментального значения 14.26 ГПа в монокристалле железа.

Верификация разработанного нового потенциала (или кандидатов на лучший потенциал) является частью процесса поиска наилучшего потенциала (победителя). Хороший кандидат, найденный в процессе подгонки к свойствам холодного кристалла может в действительности оказаться не столь хорошим при воспроизведении свойств горячего материала, например температуры плавления при нормальных условиях (или кривой плавления как функции давления). Как было показано выше, предварительный отбор по температуре плавления, расчет которой

требует незначительного времени, дал нам один хороший потенциал, который мы выбрали для дальнейшей проверки.

Поскольку целью разработки нового потенциала является предсказательное МД моделирование прохождения ударных волн и структуры их фронта в железе, то финальной проверкой является сравнение рассчитанной ударной адиабаты с экспериментальной. Рисунок 16 в приложенном п. 1.6 файле показывает результаты МД моделирования УВ методом подвижного окна (MW – Moving Window) в монокристаллах железа ориентированных вдоль кристаллических осей [100] и [110]. Согласие с экспериментальными данными вполне хорошее, несмотря на то что поликристаллические образцы железа были использованы в экспериментах занесенных в базу данных по свойствам материалов. Небольшое завышение ударной адиабаты  $P_{xx}(V)$  возможно из-за отсутствия релаксации сдвигового напряжения в расчетах в направлении [100], как демонстрируется на рис. 17 в приложенном п. 1.6 файле. Этот рисунок указывает, что фазовый переход ОЦК  $\rightarrow$  ГПУ происходит с большой скоростью на расстоянии примерно 15 нм после фронта, что соответствует времени около 4 пс. Это происходит так быстро потому, что после сжатия во фронте УВ плоскости [110] кристалла стали похожи на плотноупакованные атомные плоскости ГПУ решетки. Сдвиговое напряжение индуцировало согласованное скользящее движение этих плоскостей, что привело к формированию новой ГПУ фазы за такое короткое время. Подобный механизм фазового перехода в железе уже был описан в литературе. При этом монокристаллическое железо разбивается на домены ГПУ фазы, между которыми сосредоточено значительное сдвиговое напряжение в диапазоне 2-4 ГПа, в то время как внутри зерен сдвиговое напряжение оказывается около нуля, а также отсутствует образование дислокаций. Как показывают расчеты, с увеличением поперечного сечения расчетной ячейки размеры зерен пропорционально увеличиваются.

Рисунок 17 в приложенном п. 1.6 файле показывает структуру одиночной двухзонной УВ, движущейся со скоростью 6.5 км/с в монокристалле железа ориентированного вдоль оси [110] ОЦК решетки. В отличие от рассмотренного выше случая, здесь имеется ярко выраженная упругая зона (упругий нос), в котором вещество находится в метастабильном одноосно сжатом состоянии под значительным сдвиговым напряжением около 8.7 ГПа. Однако фазовый переход в ГПУ фазу не развивается вследствие того, что плотноупакованные плоскости при такой относительно малой одноосной деформации еще не сформировались. За упругим носом следует с той же скоростью пластический ударный фронт, в котором происходят одновременно фазовый переход и пластические деформации с рождением и размножением дислокаций. Это приводит к быстрой релаксации сдвигового напряжения, которое затем медленно уменьшается до конца расчетной ячейки. На медленную релаксацию в пластической зоне УВ указывает также рост температуры вещества на протяжении примерно 150 нм после пластического фронта. Вероятно, из-за быстрой пластической трансформации крупные зерна ГПУ фазы не могут образоваться, как в случае более слабой УВ в [100] направлении.

8). При выходе ударной волны на поверхность с микрометровыми бороздками, возникшими из-за механической обработки, происходит пыление вещества, обусловленное образованием микроскопических кумулятивных струй. В экспериментальных работах по исследованию процесса пыления показано, что характеристики струй непосредственно связаны со свойствами вещества, размером неоднородности и амплитудой ударной волны. Однако эволюция струи, в частности, распределение массы и скорости вещества в струе при её формировании и при распаде на отдельные фрагменты, исследована недостаточно.

Получение временной развертки процессов формирования струи и дальнейшей ее фрагментации в эксперименте затруднено на микрометровых масштабах и временах порядка нескольких наносекунд. По этой причине явление активно исследуется теоретически, методами гидродинамического (ГД) и молекулярно-динамического (МД) моделирования. ГД подход применим в широком диапазоне амплитуд неоднородности, однако имеет проблемы, связанные с

определением модели разрушения и учётом влияния поверхностного натяжения. В отличие от ГД подхода, термодинамические и кинетические характеристики вещества в молекулярной динамике определяются только выбором межатомного потенциала взаимодействия, что позволяет избежать вышеуказанных проблем. Однако размер образца в МД расчетах ограничен сверху величиной порядка 1000 нм, которая определяется доступной вычислительной мощностью и временем расчета. Тем не менее, при достаточно большом количестве атомов в МД реализуется ГД режим, что позволяет масштабировать МД расчеты на большие размеры, характерные для реальных поверхностей.

Для ГД моделирования пыления мы выбрали метод SPH (SPH – Smoothed Particle Hydrodynamics, или "метод сглаженных частиц"). Он имеет то преимущество, что явление кумуляции сложно воспроизвести с помощью сеточных методов. Эйлеравы сеточные схемы требуют отслеживания контактных поверхностей и свободных границ, что является основным источником погрешности при моделировании этими методами. Для лагранжевых сеточных схем необходимы специальные методики перепланировки сетки в области формирования струи, приводящие к значительной численной диффузии импульса и энергии в зоне перепланировки, что чревато потерей мелкомасштабных физических процессов, происходящих при струеобразовании. Бессеточный метод SPH оптимально пригоден для моделирования таких физических явлений, как струеобразование, вращательные и сдвиговые течения сжимаемых сред, фрагментация расчётной области на части вследствие эффектов разрушения.

Для проверки подобия атомарного и гидродинамического процессов пыления мы провели расчеты образцов из олова, а также отдельный расчет с образцом из меди [8] (см. внизу список публ., выполненных за отчетный год). Гидродинамическое моделирование проводилось в реальных масштабах эксперимента, а молекулярно-динамическое выполнялось с сохранением пропорций в масштабе, допустимом по вычислительным ресурсам. В качестве сравнительных характеристик рассматривались профили скорости, плотности, а также масса выброшенного вещества в зависимости от размера неоднородностей на гофрированной поверхности материала. Результаты МД расчетов демонстрируют хорошее масштабирование на микрометровые размеры, характерные для эксперимента. В частности, показано, что распределения скоростей вдоль струй, полученные в МД и ГД, хорошо совпадают.

В расчете с медью использовался образец с треугольным вырезом и значительно большей амплитудой ударной волны, чем в олове. В результате отражения ударных волн от свободной поверхности формируется дополнительное течение, которое приводит к образованию малой струи. Эта особенность представлена на рис. 19 в приложенном п. 1.6 файле. Аналогичное образование струй наблюдается в ГД моделировании методом SPH, показанному на рис. 20 в приложенном п. 1.6 файле. Таким образом, качественная картина при SPH-моделировании близка к результатам, получаемым в MD-моделировании. Исключением является обстоятельство, что в головной части струй при MD-моделировании всегда формируется капля.

Публикации за 2015 г., выполненные в рамках проекта РНФ 14-19-01599

[1] Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А., "Струеобразование при отрыве металлической пленки от подложки в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса," ЖЭТФ, том 147, выпуск 1, стр. 20-56 (2015)

[2] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, and V.A. Khokhlov, "Three Dimensional Ablation Flow Produced by Ultrashort Laser Pulse from Perfectly Flat Target," Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS) Proceedings (ISSN 1559-9450), Prague, Czech Republic, July 6-9, 2015, pp. 2413-2417 (2015). <http://piers.org/piersproceedings/piers2015PragueProc.php>

[3] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, D.K. Il'inskiy, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eyama, N. Kakimoto, T. Tomita, M. Baba, Y. Minami, T. Suemoto, and T. Kawachi, "Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump-X-ray probe



experiment," Appl. Phys. B v. 119, pp. 413-419 (2015)

[4] V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, D.K. Ilitsky, K.P. Migdal, and V.V. Shepelev, "Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation," APS proc. (Труды конференции SCCM, June, 2015. Tampa, USA. Имеет благодарность РФФИ. Принято в печать)

[5] M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, M. Yamagiwa, "Low electron temperature in ablating materials formed by picosecond soft x-ray laser Pulses," SPIE Proceedings, Vol. 9589, 958904-1 (2015).

X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications XI, edited by Annie Klisnick, Carmen S. Menoni, Proc. of SPIE Vol. 9589, 958904. doi: 10.1117/12.2186053

[6] Y. Rosandi, F.C. Kabeer, Y. Cherednikov, E.S. Zijlstra, M.E. Garcia, N.A. Inogamov, and H.M. Urbassek, "Melting of Al Induced by Laser Excitation of 2p Holes," Mater. Res. Lett., vol. 3(3), pages 149-155 (2015). doi:10.1080/21663831.2015.1033564

[7] Yu. Petrov, K. Migdal, N. Inogamov, V. Zhakhovsky, "Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse," Appl. Phys. B vol. 119, pp. 401-411 (2015). doi:10.1007/s00340-015-6048-6

[8] S.A. Dyachkov, A.N. Parshikov, V.V. Zhakhovsky, "Shock-produced ejecta from Tin: comparative study by molecular dynamics and smoothed particle hydrodynamics methods," J. Phys. Conf. Ser. vol. 653, 012043 (2015)

Дополнительная литература (подробнее в файле, приложенном п. 1.6)

[1] Емельянов В.И., Заярный Д.А., Ионин А.А., и др. Письма ЖЭТФ Т. 99, В. 9, С. 601-605 (2014)

[2] Chen, L., Zhai, T., Zhang, X., et.al. Nanotechnology 25, 265302 (2014)

[3] Kuchmizhak, A.A., Gurbatov, S., Vitrik, O., Kulchin, Y., Opt. Comm. 356, 1-6 (2015)

[4] C. Unger, J. Koch, L. Overmeyer, B.N. Chichkov, Optics Express V. 20, N. 22, 24864 (2012).

[5] Nakata, Y., Matsuba, Y., Miyanaga, N., In: www.cola2015.org, PROGRAM HANDBOOK, COLA 2015, International Conference on Laser Ablation 2015, Cairns, Australia (2015)

[6] Nakata, Y., Hiromoto, T., Miyanaga, N., Appl. Phys. A 101, 471 (2010)

[7] Ivanov, K.A., Brantov, A.V., Kudryashov, et.al. Laser Phys. Lett. 12, 046005 (2015)

[8] Zayarny, D.A., Ionin, A.A., Kiseleva, et.al. JETP Lett. 100(5), 295-298 (2014)

[9] Zhakhovskii, V., Nishihara, K., Fukuda, Y., et.al. IEEE Proceeding of the 5th International Symposium on Cluster Computing and Grid (CCGrid 2005) 2, 848-854 (2005)

[10] Kresse, G. et.al., Comput. Mater. Science, v. 6, p. 15 (1996)

[11] Kresse, G. et.al., Phys. Rev. B, v. 59, p. 1758 (1999)

[12] Bloechl, P.E, Phys Rev B, v. 50, 17953 (1994)

[13] Perdew, J.P et.al., Phys Rev Lett., v. 77, 36865 (1996)

[14] Petrov, Yu. V. et.al., JETP Lett. v. 97, p. 20 (2013)

[15] Norman, G. et.al., Contrib. to Plasma Phys. v. 53 (4-5), p. 300 (2013)

[16] Cho, B.I. et.al., Phys. Rev. Lett. v. 106, 167601 (2011)

[17] Gonze, X. et.al, Computer Physics Communications, v. 180, p. 2582 (2009)

[18] Bottin, F. et.al., Comput. Mat. Science, v. 42, p. 329 (2008)

[19] <http://elk.sourceforge.net>

[20] Knyazev, D.V. et.al., Phys. Plasmas, v. 21, 073302 (2014)

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

да

**1.4. Сведения о достигнутых конкретных научных результатах в отчетном году**  
(до 5 стр.)

1). В работах за 2015 год, выполненных в рамках проекта, построена детальная модель воздействия ультракоротких лазерных импульсов на металлические пленки, находящиеся на диэлектрической подложке. Она охватывает как стадию отслойки пленки от субстрата, длящуюся десятки пикосекунд, так и стадию развития купола из пленки, которая продолжается единицы и десятки наносекунд. Подробно изучено взаимодействие гидродинамических волн, возбуждаемых в пленке и подложке. Представлена физическая картина отслаивания пленки от подложки, ранее описания абляции тонких пленок от диэлектрических подложек не существовало. Осуществление тех или иных режимов зависит от величины поверхностной плотности поглощенной энергии (поглощенного флюенса), двухтемпературной физики и значения силы сцепления между пленкой и подложкой. Осуществлен крупномасштабный молекулярно-динамический расчет в осесимметричной геометрии для моделирования формирования «нанобампов» или «микробампов» - уединенных структур на поверхности тонких пленок металлов в виде вспучивания пленки, для чего создан комбинированный МД+МК алгоритм, составленный из молекулярно динамического кода (МД) и кода Монте-Карло (МК). Продемонстрировано, каким образом в процессе абляции формируются наноструи. Проанализированы процессы распада пленки и формирования нанокпель. Найдено простое объяснение феномену стекания вещества в зону вершины купола. Именно этот процесс приводит к формированию струй металла, направленных от подложки, и контрструй, направленных в противоположную сторону. Сочетание молекулярной динамики и кода Монте-Карло позволило решить очень существенную проблему теплопроводностного охлаждения пленки и её кристаллизации в пятне возникновения нанобампа после расплавления пленки в результате лазерного нагрева, т.к. именно затвердевание определяет окончательную форму бампа. Список ссылок с фотографиями на экспериментальные работы по формированию структур острокфокусированным лазерным импульсом приведен в конце 1.3 и в файле, приложенном к п. 1.6 данного отчета. Там же приведены ссылки [1-4] на опубликованные или принятые в печать за 2015 г. работы с благодарностью РФФИ и на статьи, отправленные в редакции с такой же благодарностью. Там же приведен список конференций по нашей тематике, на которых были представлены результаты, полученные в рамках гранта РФФИ.

2) Совместно с японскими учеными из института Kansai Photon Science Institute (KPSI, <http://wwwapr.kansai.jaea.go.jp/kpsi-en/>, группа проф. Кавачи) были выполнены экспериментальные и теоретические исследования по изучению физических свойств различных материалов - металлов и диэлектриков в состояниях с сильно возбужденной поглощением ультракоротких лазерных импульсов электронной подсистемой. Рассмотрен нагрев электронной подсистемы пикосекундным импульсом мягкого рентгеновского лазера (длина волны 13.9 нм) металлов Al и Cu и диэлектрика LiF. Сочетанием экспериментов по оценке нагрева электронной подсистемы по вспышке излучения от нагретой поверхности мишени и расчетов по двухтемпературной теории была выполнена оценка максимальной электронной температуры при флюенсах, близких к порогу абляции. Из этих расчетов было получено, что в примененном диапазоне флюенсов температура электронов порядка одного эВ [5] (это номер в списке статей, опубликованных в 2015 г. рамках данного проекта РФФИ, список приведен в конце 1.3 и файла, приложенного к пункту 1.6 данного отчета).

Совместно с немецкими коллегами изучен отклик простого металла (Al) на возбуждение 2p дырок ультракоротким жестким (УФ, рентген) лазером. Проведен молекулярно-динамический расчет с учетом изменения потенциала межатомного взаимодействия из-за возникновения дырки. Изменение потенциала вычислено с помощью кода WIEN2k. Показано, что процесс плавления после возбуждения дырок по-прежнему определяется в основном электрон-фононной динамикой. Эффект изменения межатомного потенциала ограничен во времени временем жизни дырки порядка 100 фс. Это время порядка дебаевского времени для решетки [6] (это номер в списке статей, опубликованных в 2015 г. рамках данного проекта РФФИ, см. в конце 1.3 и файла к п. 1.6).

Получены важнейшие для моделирования абляции характеристики металлов в

двухтемпературном состоянии при сильном возбуждении электронной подсистемы – термодинамические функции и кинетические коэффициенты. С помощью программ метода функционала плотности рассчитан электронный спектр, плотность электронных состояний золота и меди, относящихся к благородным металлам с возбуждаемыми в процессе лазерного нагрева d-электронами, энергетическая зона которых находится внутри s-зоны. С использованием электронного энергетического спектра вычислен электронный вклад за счет тепловых возбуждений во внутреннюю энергию, теплоемкость, давление этих металлов. Получены аналитические аппроксимации вклада электронов во внутреннюю энергию и давление золота в широком диапазоне электронных температур и плотности, важном при исследовании абляции под действием ультракоротких лазерных импульсов. Показано, что часто применяемые приближения свободных электронов вносят существенную погрешность – результаты отличаются в разы при электронных температурах 40-60 кК [7] (см. концовку 1.3 и файла к п. 1.6). Расчет спектра электронных энергетических зон использован для его двухпараболической аппроксимации при последующих расчетах частот межэлектронных столкновений и расчета по ним коэффициента электронной теплопроводности. Коэффициент электронной теплопроводности меди рассчитан с использованием квантовой молекулярной динамики и расчета коэффициентов Онзагера в приближении Кубо-Гринвуда.

3) Получены новые результаты (готовится публикация) по гидродинамическому расчету возбуждения составных ударных волн, состоящих из упругого и пластического скачков. Гидродинамические расчеты проведены с использованием двух моделей пластичности – Прандтля-Рейса и дислокационной. Расчет с применением классической модели Прандтля-Рейса не дает образования упругого предвестника перед пластической волной. Создан гидродинамический код на основе модели дислокаций, в котором учтена гомогенная нуклеация дислокаций при упруго-пластическом коллапсе сверхупругой ударной волны в металлическом кристалле. Расчеты с помощью созданного гидродинамического кода, подобно молекулярно-динамическим расчетам, также обнаруживают формирование упругого предвестника, причем для получения этих результатов требуются, в отличие от молекулярно-динамического моделирования, существенно меньшие вычислительные ресурсы.

4) Созданы гидродинамические программы, позволяющие рассматривать многомерные эффекты в абляции твердых тел под действием ультракоротких лазерных импульсов.

Разработан двумерный двухтемпературный гидродинамический код - программа, описывающая двумерное же поглощение энергии лазерного излучения электронами, двумерное распространение тепла по электронной подсистеме с одновременно происходящей передачей тепла от электронов ионам.

Создан двумерный гидродинамический код на основе консервативной лагранжевой конечно-разностной расчетной схемы на треугольной сетке, явной схемы второго порядка точности по пространству, с искусственной вязкостью, без учета теплопроводности. С использованием условия текучести Мизеса эта схема достаточно полно и строго описывает динамику упруго-пластической среды при импульсном нагружении. Применением этого кода произведен расчет реакции алюминиевой мишени на периодически неоднородное лазерное воздействие.

Получен двумерный конечно-разностный код, решающий гидродинамические уравнения с учетом теплопроводности, с помощью которого промоделировано возбуждение и распространение ударных волн в металле на стеклянной подложке под действием лазерного излучения со стороны стеклянной пластинки.

5-6) Разработана сферически симметричная версия двухтемпературной гидродинамической программы. Подготовлены цилиндрический и сферический варианты молекулярно-динамического кода и межчастичный потенциал метода погруженного атома (EAM, Embedded Atom Method –

potential) моделирующий взаимодействие между частицами в воде. Потенциал межмолекулярных взаимодействия в воде, созданный за отчетный период, построен по данным ударной адиабаты воды и воспроизводит давление, скорость звука, акустический импеданс в широком диапазоне сжатий. Проведены атомистические и гидродинамические расчеты расширения в вакуум жидкого оловянного цилиндра и сферы малого размера. Как в атомистическом, так и в гидродинамическом расчете в результате схождения волны разгрузки к центру образовалась центральная область кавитации с последующим формированием пузыря, окруженного плотной жидкой оболочкой. Обнаружено, что гидродинамическое подобие между двумя расчетами сохраняется даже после начала процесса кавитации и фрагментации центральной части капли. В частности, профили плотности и давления, построенные в одинаковые нормированные времена, практически совпадают в обоих методах.

7) Разработан и протестирован новый EAM потенциал для железа с помощью метода подгонки напряжений (Zhakhovsky:2016, Ashitkov:2016 – эти статьи отправлены в редакции, подробности в файле к п. 1.6). В основе подгоночной базы данных для параметров потенциала лежат рассчитанные пакетом квантовомеханических программ теории функционала плотности VASP уравнение состояния вещества при нулевой температуре, т.е. кривая холодного давления при всестороннем сжатии/растяжении и компоненты тензора напряжений при одноосных деформациях кристалла вдоль основных кристаллографических осей. Такой выбор конфигураций для подгоночной базы данных гарантирует, что построенный потенциал будет правильно описывать механический отклик твердого тела на различные деформации при больших сжатиях/растяжениях. Кроме того, в подгоночную базу включены экспериментальный параметр решетки, упругие константы, и давления фазовых переходов в твердом железе, энергия образования вакансии и энергия когезии холодного кристалла. Разработан комбинированный метод минимизации целевой функции, включающий в себя метод катящегося многогранника и метод случайного блуждания, реализованный в параллельной программе поиска, в которой каждый процессор независимо ищет свой лучший минимум, а мастер-процессор сравнивает их и сохраняет оптимальный. Используя сотни процессоров, программа параллельных вычислений способна гораздо подробнее просканировать многомерное пространство и найти лучший вариант, чем последовательная программа за отведенное время. Результаты проведенного молекулярно-динамического моделирования ударной волны в монокристаллах железа, ориентированных вдоль кристаллических осей [100] и [110], с применением разработанного межчастичного потенциала в железе показывают хорошее согласие с экспериментальными данными. Проведено молекулярно-динамическое моделирование фазового перехода ОЦК->ГПУ в ударной волне в железе, при котором монокристаллическое железо разбивается на домены ГПУ фазы, между которыми сосредоточено значительное сдвиговое напряжение, в то время как внутри зерен сдвиговое напряжение оказывается около нуля, а также отсутствует образование дислокаций. Проведено моделирование двухзонной одиночной ударной волны в монокристалле железа, ориентированном вдоль оси [110] ОЦК решетки. В отличие от рассмотренного выше случая, в такой ударной волне имеется ярко выраженная упругая зона, в которой вещество находится в метастабильном одноосно сжатом состоянии под значительным сдвиговым напряжением. Однако фазовый переход в ГПУ фазу не развивается вследствие того, что плотноупакованные плоскости при такой относительно малой одноосной деформации еще не сформировались. За упругой зоной следует с той же скоростью пластический ударный фронт, в котором происходят одновременно фазовый переход и пластические деформации с рождением и размножением дислокаций.

8) Нами ведется систематическая работа по сопоставлению гидродинамических (ГД) и молекулярно-динамических (МД) подходов. Это очень важно, поскольку МД расчеты ограничены микронными размерами, а ГД расчеты только феноменологически могут учитывать протекание неравновесных процессов (например, разрушение). Проведено моделирование процесса пыления

вещества, происходящего при выходе ударной волны, возбужденной лазерным импульсом в пленке, на ее тыльную поверхность с микрометровыми бороздками, возникшими из-за механической обработки, обусловленного образованием микроскопических кумулятивных струй. Для гидродинамического моделирования пыления применен метод SPH (SPH – Smoothed Particle Hydrodynamics, или "метод сглаженных частиц"). Он имеет то преимущество, что явление кумуляции сложно воспроизвести с помощью сеточных методов, как эйлеровых, так и лагранжевых. Бессеточный метод SPH оптимально пригоден для моделирования таких физических явлений, как струеобразование, вращательные и сдвиговые течения сжимаемых сред, фрагментация расчетной области на части вследствие эффектов разрушения. Для проверки подобия атомарного и гидродинамического процессов пыления проведены расчеты образцов из олова, а также отдельный расчет с образцом из меди [8] (см. концовку 1.3 и файла п. 1.6). Гидродинамическое моделирование проводилось в реальных масштабах эксперимента, а молекулярно-динамическое выполнялось с сохранением пропорций в масштабе, допустимом по вычислительным ресурсам. Результаты МД расчетов демонстрируют хорошее масштабирование на микрометровые размеры, характерные для эксперимента. В частности, показано, что распределения скоростей вдоль струй, полученные в МД и ГД, хорошо совпадают. В расчете с медью использовался образец с треугольным вырезом и значительно большей амплитудой ударной волны, чем в олове. В результате отражения ударных волн от свободной поверхности формируется дополнительное течение, которое приводит к образованию малой струи, наблюдаемому как в MD-моделировании, так и в ГД моделировании методом SPH. Таким образом, качественная картина при SPH-моделировании близка к результатам, получаемым в MD-моделировании.

**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*)

Лазерные технологии имеют огромное значение для современной науки и производства. Важное лазерное направление связано со структурированием поверхности, поскольку структурирование позволяет управлять фундаментальными характеристиками поверхности: меняются оптические свойства, например, спектральная зависимость коэффициента поглощения (а следовательно, цвет); в широких пределах можно варьировать смачиваемость (приложения в трибологии, медицине); изменяются химические характеристики (стойкость к коррозии, каталитическая активность), микротвердость и др. Многие годы происхождение структур связывали только с интерференцией между падающей электромагнитной волной и поверхностными плазмонами. Новый механизм формирования структур был описан в работах нашего коллектива, предшествовавших гранту 14-19-01599 РФФ на 2014-2016 гг., см.: Жаховский и др., Письма ЖЭТФ, т. 87, с. 491 (2008); Ашитков и др., *ibid*, т. 95, с. 192 (2012); Inogamov et al., J. Phys. Conf. Ser. v. 510, 012041 (2014).

Механизм простой. В случае ультракороткого лазерного импульса эти структуры представляют собой замороженную нанопену, которая образуется в результате последовательного протекания трех процессов. Во-первых, нуклеация в поверхностном слое расплава под действием растягивающих напряжений. Во-вторых, в режиме инерционного разлета вспененного слоя имеет место инфляция (раздувание) и разрушение растянутой нанопены. Динамика нанопены определяется инерцией и поверхностным натяжением. В-третьих, быстрая рекристаллизация

слоя расплава и пены фиксирует путем затвердевания остатки пены на разных стадиях разрушения. При этом характерный размер структур вдоль поверхности порядка толщины слоя прогрева  $\sim 0.1$  мкм. Охлаждение фиксирует твердую поверхность. Отсюда следует вывод о том, что управлять формированием пены можно, регулируя теплоотвод за счет, скажем, толщины холодного подстилающего слоя и/или теплопроводности. При малых толщинах и, соответственно, при малой теплоемкости холодного слоя темп затвердевания уменьшается. Тогда, в силу увеличения времени существования в состоянии расплава, у поверхностного натяжения появляется шанс на подавление возмущений границы жидкой фазы.

В настоящем гранте исследуется важный для приложений (2D фотонные кристаллы, наноплазмоника, SERS, усиление фотolumинесценции, LIFT) случай, когда структуры формируются из тонкой металлической пленки, напыленной на поверхность диэлектрической или полупроводниковой подложки. Тонкой здесь называется пленка, толщина которой меньше толщины слоя прогрева лазером. В золоте, меди и алюминии эта толщина составляет несколько толщин скин-слоя для оптических частот. В указанном случае (при умеренных вложениях лазерной энергии в пленку и слабой адгезии между пленкой и подложкой) вместо термо-флуктуационной нуклеации, происходящей в толще металла, имеет место отслоение пленки от подложки. В результате отслоившаяся и летящая, удаляясь от подложки, пленка образует куполообразное вздутие, которое естественно назвать оболочкой, пузырем или, следуя английской терминологии, бампом. Контакт пленка-подложка гладкий. Соответственно откольная (имеется в виду откол пленки от подложки) куполообразная оболочка является гладкой. В этом отличие данной оболочки от откольной оболочки в случае объемной мишени, когда откольная оболочка образуется в результате термо-флуктуационной нуклеации и поэтому имеет существенные возмущения по толщине (что ускоряет процессы разрушения).

Нано или микро бампы формируются остро сфокусированным на дифракционном пределе пучком. Они имеют размеры вдоль поверхности от нескольких мкм до долей мкм в зависимости от длины волны лазера. Проведенные за отчетный период исследования позволили полностью описать физику формирования бампа. В качественном отношении ситуация здесь оказалась сходной с той, в которой возникают хаотические поверхностные структуры, стартующие от термофлуктуаций (они упомянуты выше). Во-первых, важную роль опять играют напряжения, растягивающие и разрывающие контакт пленка-подложка. Во-вторых, бамп из расплавленного металла надувается (растет объем полости внутри) при полете по инерции. В-третьих, торможение полета происходит за счет капиллярных сил. В-четвертых, рекристаллизация фиксирует финальную форму бампа. За год удалось создать адекватную физическую модель и набор компьютерных кодов, которые позволили понять значение каждого из перечисленных процессов. Результаты опубликованы или приняты в печать в работах [1-4] и доложены на конференциях 2015 года: IIEFM-2015 (Эльбрус), SCCM (Tampa, USA), PIERS (Prague, Czech Republic), COLA (Australia), International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond (ICCSF, Moscow), EMN.ultrafast (Las Vegas, USA), Scientific-Coordination Workshop "Non-ideal Plasma Physics" (NPP, Moscow). Кроме того, посланы в печать работы [9-13].

Вернемся к приложениям, в которых используются одиночные уединенные структуры (бампы) или 2D массивы из них. Определенным образом расположенная группа бампов (решетка плюс дефекты) является 2D фотонным кристаллом (применение в наноплазмонике). Требуется придать форме бампа определенные нанометровые детали (утолщение на вершине, струя или струя определенной длины с каплей), чтобы такое возмущение пленки служило в качестве плазмонной антенны (приложение в наноплазмонике). Перспективными представляются технологии, в которых система бампов, созданных фемтосекундным импульсом, обрабатывается дополнительно ионным пучком или путем химического травления. Такими способами можно смыть первичную пленку и оставить на диэлектрической или полупроводниковой подложке только элементы бампов. Нанодетали бампа размерами в десятки нанометров ответственны за создание "горячих точек" - пятен усиления внешнего ЭМ поля. Таким образом внешнее поле, падающее на бамп,

может быть усилено по порядку величины. Этот эффект применяется в устройствах SERS (Surface Enhanced Raman Scattering) и для усиления фотолюминесценции. Соответствующие устройства представляют собой сверхчувствительные датчики химического состава. Дело в том, что рамановский сигнал пропорционален четвертой степени ЭМ поля. Поэтому даже одиночные молекулы, попавшие в "горячее пятно" могут быть обнаружены.

Другое направление связано с лазерной печатью и производством наночастиц. Это технологии LIFT или LIBT (Laser Induced Forward/Backward Transfer). Бамп служит источником капли - наночастицы (НЧ) размером десятки, сотни нанометров. Это может быть одиночная НЧ или две, три или группа НЧ. Лазерными средствами (фокусировка, энергия в пичке) и толщиной пленки можно регулировать распределение по размерам и угловую поляру вылета НЧ. Как следует из наших исследований, проведенных в 2015 г. [1-4,9-13], в случае одиночной НЧ эта НЧ вылетает в строго заданном направлении с ничтожным угловым разбросом (приложение - лазерный принтер). Наоборот, в случае нанопен НЧ много и угловое распределение широкое - часть НЧ даже возвращается назад на поверхность.

Для понимания и количественного описания лазерного эксперимента необходимы современные физические модели, вычислительные алгоритмы и мощные компьютеры. В нашем гранте в 2015 г., построенном на сочетании и дополнении вычислительных средств, этому уделялось основное внимание. Созданы наново или приспособлены к условиям задачи о нанобампе комбинации алгоритмов и кодов. Для описания двухтемпературной (2Т) физики применяются квантовомеханические программы, описывающие конденсированную среду из первых принципов, и программы решения кинетического уравнения при произвольных (относительно энергии Ферми) электронных температурах (2Т стадия образует основу, стартовую площадку для всех последующих стадий). Эти программы применяются в сочетании с 2Т гидродинамическими (ГД) программами и в сочетании с молекулярно-динамическими (МД) программами; 2Т результаты за 2015 г. были представлены на конференциях (Эльбрус, SCCM, PIERS, COLA, NPP) и в работах [5-7,14]. Были выполнены работы по созданию ГД вычислительных моделей, учитывающих упругость твердой фазы и пластические эффекты. Разработаны новые потенциалы межатомного взаимодействия для воды и железа. Они специально предназначены для МД расчетов в условиях высоких темпов деформаций высокой амплитуды, см. [15,16] (доклады на конференциях: Эльбрус, SCCM).

Разработка межатомных потенциалов взаимодействия - это исключительно тонкая и важная работа, требующая высокого искусства и огромных усилий. В принципе, такая "продукция" цитируется высоко, поскольку применяется многими пользователями МД приложений.

МД и ГД подходы, оба, имеют существенные ограничения. В случае МД - это ограничения по размерам. Достигнутые в гранте РФФИ в 2015 г. пределы для задачи о бампе составляют до 10 наносекунд эволюции системы из 0.2 миллиарда атомов. В случае ГД имеются проблемы с адекватным описанием неравновесных стадий (полиморфные трансформации, нуклеация). Представляется естественным дополнить эти подходы путем их совместного применения для одной и той же задачи. Именно в этом направлении была выполнена большая работа в 2015 г. Результаты представлены в статье [8] и на конференциях: Эльбрус и SCCM.

Публикации за 2015 г., выполненные в рамках проекта РФФИ 14-19-01599

[1] Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А., "Струеобразование при отрыве металлической пленки от подложки в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса," ЖЭТФ, том 147, выпуск 1, стр. 20-56 (2015)

[2] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, and V.A. Khokhlov, "Three Dimensional Ablation Flow Produced by Ultrashort Laser Pulse from Perfectly Flat Target," Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS) Proceedings (ISSN 1559-9450), Prague, Czech Republic, July 6-9, 2015, pp. 2413-2417 (2015). <http://piers.org/piersproceedings/piers2015PragueProc.php>

[3] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M.B. Agranat,

- S.I. Ashitkov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, D.K. Ilitsky, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eyama, N. Kakimoto, T. Tomita, M. Baba, Y. Minami, T. Suemoto, and T. Kawachi, "Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump--X-ray probe experiment," *Appl. Phys. B* v. 119, pp. 413-419 (2015)
- [4] V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, D.K. Ilitsky, K.P. Migdal, and V.V. Shepelev, "Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation," *APS proc.* (Труды конференции SCCM, June, 2015. Tampa, USA. Имеет благодарность РФФ. Принято в печать)
- [5] M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, M. Yamagiwa, "Low electron temperature in ablating materials formed by picosecond soft x-ray laser Pulses," *SPIE Proceedings*, Vol. 9589, 958904-1 (2015).
- X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications XI, edited by Annie Klisnick, Carmen S. Menoni, *Proc. of SPIE* Vol. 9589, 958904 · © 2015 SPIE CCC code: 0277-786X/15/\$18 · doi: 10.1117/12.2186053
- [6] Y. Rosandi, F.C. Kabeer, Y. Cherednikov, E.S. Zijlstra, M.E. Garcia, N.A. Inogamov, and H.M. Urbassek, "Melting of Al Induced by Laser Excitation of 2p Holes," *Mater. Res. Lett.*, vol. 3(3), pages 149-155 (2015). <http://dx.doi.org/10.1080/21663831.2015.1033564>
- [7] Yu. Petrov, K. Migdal, N. Inogamov, V. Zhakhovsky, "Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse," *Appl. Phys. B* vol. 119, pp. 401-411 (2015). DOI 10.1007/s00340-015-6048-6
- [8] S.A. Dyachkov, A.N. Parshikov, V.V. Zhakhovsky, "Shock-produced ejecta from Tin: comparative study by molecular dynamics and smoothed particle hydrodynamics methods," *J. Phys. Conf. Ser.* vol. 653, 012043 (2015)

Работы за 2015 г. (с благодарностью РФФ 14-19-01599), посланные в редакции

- [9] 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*
- [10] N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Y.V. Petrov, V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, D.K. Ilitsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, T. Kawachi, A.Y. Faenov, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eyama, N. Kakimoto, T. Tomita, M. Baba, Y. Minami, and T. Suemoto, "Rarefaction after fast laser heating of thin metal film on a glass mount," *AIP Conference Proceedings*
- [11] V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, D.K. Ilitsky, K.P. Migdal, and V.V. Shepelev, "Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation," *AIP Conference Proceedings*
- [12] 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. Ser.*
- [13] 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 Lett.*
- [14] K.P. Migdal, Yu.V. Petrov, D.K. Ilitsky, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, D.V. Knyazev, P.R. Levashov, "Thermodynamics and kinetics of d-band metals in two-temperature states," *Applied Physics A: Material Science and Processing*
- [15] V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, "MD simulation of steady shock-wave fronts with phase transition in single-crystal iron," *AIP Conference Proceedings* (2016)
- [16] S.I. Ashitkov, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, P.S. Komarov, M.B. Agranat, G.I. Kanel, "The behavior of iron under ultrafast shock loading driven by a femtosecond laser," *AIP Conference Proceedings* (2016)

на английском языке

Laser surface structuring is significant direction of modern researches, because the structuring allows to vary fundamental surface properties in the desirable way. Those properties are: dielectric function, e.g.,



spectral dependence (and thus color) of absorption coefficient; wettability (applications in tribology, medicine); chemical characteristics like corrosion resistance and catalytic activity, microhardness etc. Many years it was thought that the origin of structures is connected only with an interference between an incident electromagnetic wave and surface plasmons. New mechanism of structure formation has been described in our papers preceding the RSCF grant 14-19-01599 for 2014-2016 years: Zhakhovskii et al., "New mechanism of the formation of the nanorelief on a surface irradiated by a fs laser pulse," JETP Lett. v. 87, p. 423 (2008); Ashitkov et al., "Formation of Nanocavities in Surface Layer of Al Target irradiated by fs Laser Pulse, *ibid* v. 95, p. 176 (2012); Inogamov et al., "Ultrafast lasers and solids in highly excited states: results of HD and MD simulations," J. Phys. Conf. Ser. v. 510, 012041 (2014).

The mechanism is simple. Structures created under action of an ultrashort laser pulse are frozen nanofoams. They appear after action of the three successive processes. Firstly, there is nucleation of the atomic size bubbles inside a molten layer under action of a tensile stress. Secondly, the foam inflates as a consequence of its inertial flight. Inflation and thinning of the intercell membranes cause breaking of the membranes. Dynamics of inflation and breaking is defined by an interplay between inertia and surface tension. Thirdly, the fast recrystallization of liquid and foam fix the remnants of a foam at different stages of breaking thus creating a solid random structure. Typical spatial scale along a surface is of the order of the thickness of a heat affected zone (HAZ)  $\sim 0.1$  micron.

Here we report this year results concerning the structuring of a thin metal film deposited onto a dielectric or semiconductor substrate. They are important for applications: 2D photon crystals, nanoplasmonics, SERS, enhanced photoluminescence, LIFT/LIBT. Thin film for us is a film thinner than thickness of a HAZ. In the case of Au, Cu and Al thickness of a HAZ is few times larger than thickness of a skin layer for optical frequencies. There is delamination of a film from substrate for moderate values of absorbed energy and weak adhesion between a film and substrate. The delamination (or contact spallation) replaces the thermo-fluctuating nucleation and spallation in bulk metals. A separated film forms a dome like blistering called also a cupola, bubble, or a bump.

The nano or micro bumps are formed by a tightly focused diffraction limited laser beam. Their spatial scales along a surface are from few microns to submicron depending on a laser wavelength. Our studies carried during this year under RSCF support entirely describe physics of formation of the bumps. Qualitatively the situation with a film/substrate target is similar to the case with a nanofoam and bulk target where the chaotic nanostructures are formed as a result of evolution of a foam starting from nucleations caused by the random thermal fluctuations. Firstly, again a tensile stress stretching and breaking a contact film/substrate is significant. Secondly, a bump from molten metal is inflated under action of initial velocities and inertia. Thirdly, capillary forces decelerate a flight of a bump. And in the fourth place, solidification fixes a final shape of a bump. During this year we create an adequate physical model and a set of computer codes. They allow us to understand the meaning of every of the enumerated processes. Results are published or are accepted for publishing [1-4] and are sent to journals [9-13]. They were presented at the conferences [17-23].

Let us present applications where the laser fabricated bumps are used. A group of bumps (lattice and defects) is a 2D photon crystal (nanophotonics). Specially shaped bump is an antenna for irradiation of plasmonic oscillations (nanoplasmonics). There are technologies where the bumps produced by femtosecond pulse are additionally treated by an ion beam or by etching. It is possible to eliminate a film in this way while leaving the remnants of the bumps on dielectric or semiconductor surface. The layers of such remnants may be used as an element of the metaoptics. An integral shape of a bump and its fine details are responsible for appearance of the "hot spots" - the spots of strong amplification of an external incident electromagnetic field. Thus there are orders of magnitude amplification of an incident field. This is a heart of the very sensitive devices based on Raman scattering or photoluminescence. They are SERS (Surface Enhanced Raman Scattering) or enhanced luminescence. The device defines weakest concentrations of the analyzing molecules in a solution. Indeed, Raman signal is proportional to the fourth power of a field strength. Therefore even a solitary molecule coming into the hot spot is detected.

Another main stream is connected with a laser printing and production/delivery of nanoparticles (NP).

There are LIFT and LIBT (Laser Induced Forward/Backward Transfer) technologies. The bump is a source of a NP with size of the order of tens or hundreds nanometers. The source may produce one, or few, or many NPs. By the laser adjustments (focusing, energy in a pulse) and varying film thickness we can govern the size, velocity, and angle distributions of the NPs. This follows from our studies carried this year [1-4,9-13]. In the case of a solitary NP the angle distribution is repeatable and is very narrow; application is a laser printing of microelectronics devices. Contrary, there are many NPs in the case of a nanofoam and an angle distribution is wide - some of the NPs even return back at a surface.

Modern physical models, simulation codes, and powerful computers are necessary to understand and to describe qualitatively a laser experiment. We pay main attention to this during our work this year. Our project is based on combining of the codes. To know the two temperature (2T) data the quantum ab-initio simulations and the codes solving kinetic equations for an arbitrary ratio between electron temperature and Fermi energy were employed. The 2T stage is a starting stage for all subsequent processes. The 2T data are used in 2T hydrodynamics (HD) and molecular dynamics (MD) programs. 2T results were presented in [5-7,14] and in [17-20,23].

To simulate laser shocks we continue to develop the HD models including elasticity of a solid phase and plastic effects. New potentials of an interatomic interaction for water and iron have been constructed. They are specially designed for the cases with high deformation rates and strong compression/rarefaction, see [15,16] and [17,18].

Creation of new interatomic potentials is a very complicated and important work. It is necessary to have a high level of proficiency to do it and to spend a lot of efforts. This is valuable and citable works because it is used by many MD users.

The MD and HD approaches, both, have significant limitations. In the MD case this is the size limits. The largest run done during 2015 year under our RSCF 14-19-01599 grant describes 10 ns evolution of 0.2 billion atoms. In the HD case there are problems with description of the non-equilibrium stages, e.g., elastic-plastic, or polymorphous phase transitions, or nucleation of voids. Another big problem is with inclusion of surface tension. It is natural to increase capabilities of the HD and MD methods by close comparison of them solving the same problem. Namely in this direction we have worked in 2015 year. Results are presented in [8] and [17,18].

Published or accepted (one) papers in 2015 year

- [1] 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)* v. 120(1), 15-48 (2015).
- [2] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, and V.A. Khokhlov, "Three Dimensional Ablation Flow Produced by Ultrashort Laser Pulse from Perfectly Flat Target," *Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS) Proceedings (ISSN 1559-9450)*, Prague, Czech Republic, July 6-9, 2015, pp. 2413-2417 (2015). <http://piers.org/piersproceedings/piers2015PragueProc.php>
- [3] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, D.K. Ilnitsky, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eyama, N. Kakimoto, T. Tomita, M. Baba, Y. Minami, T. Suemoto, and T. Kawachi, "Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump--X-ray probe experiment," *Appl. Phys. B* v. 119, pp. 413-419 (2015)
- [4] V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, D.K. Ilnitsky, K.P. Migdal, and V.V. Shepelev, "Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation," *APS proc. (Proc. of SCCM, June, 2015. Tampa, USA. Accepted for publication)*
- [5] M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, M. Yamagiwa, "Low electron temperature in ablating materials formed by picosecond soft x-ray laser Pulses," *SPIE Proceedings, Vol. 9589, 958904-1* (2015).

X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications XI, edited by Annie Klisnick, Carmen S. Menoni, *Proc. of SPIE Vol. 9589, 958904* · © 2015 SPIE CCC code: 0277-786X/15/\$18 · doi:

10.1117/12.2186053

- [6] Y. Rosandi, F.C. Kabeer, Y. Cherednikov, E.S. Zijlstra, M.E. Garcia, N.A. Inogamov, and H.M. Urbassek, "Melting of Al Induced by Laser Excitation of 2p Holes," *Mater. Res. Lett.*, vol. 3(3), pages 149-155 (2015). <http://dx.doi.org/10.1080/21663831.2015.1033564>
- [7] Yu. Petrov, K. Migdal, N. Inogamov, V. Zhakhovsky, "Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse," *Appl. Phys. B* vol. 119, pp. 401-411 (2015). DOI 10.1007/s00340-015-6048-6
- [8] S.A. Dyachkov, A.N. Parshikov, V.V. Zhakhovsky, "Shock-produced ejecta from Tin: comparative study by molecular dynamics and smoothed particle hydrodynamics methods," *J. Phys. Conf. Ser.* vol. 653, 012043 (2015)

#### Papers of 2015 year sent to Journals

- [9] 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*
- [10] N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Y.V. Petrov, V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, D.K. Ilitsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, T. Kawachi, A.Y. Faenov, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eyama, N. Kakimoto, T. Tomita, M. Baba, Y. Minami, and T. Suemoto, "Rarefaction after fast laser heating of thin metal film on a glass mount," *AIP Conference Proceedings*
- [11] V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, D.K. Ilitsky, K.P. Migdal, and V.V. Shepelev, "Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation," *AIP Conference Proceedings*
- [12] 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. Ser.*
- [13] 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 Lett.*
- [14] K.P. Migdal, Yu.V. Petrov, D.K. Ilitsky, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, D.V. Knyazev, P.R. Levashov, "Thermodynamics and kinetics of d-band metals in two-temperature states," *Applied Physics A: Material Science and Processing*
- [15] V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, "MD simulation of steady shock-wave fronts with phase transition in single-crystal iron," *AIP Conference Proceedings* (2016)
- [16] S.I. Ashitkov, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, P.S. Komarov, M.B. Agranat, G.I. Kanel, "The behavior of iron under ultrafast shock loading driven by a femtosecond laser," *AIP Conference Proceedings* (2016)

#### Conferences where results were reported

- [17] XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (IIEFM-2015), March 1-6, 2015, Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia. <http://www.ihed.ras.ru/elbrus15/>
- [18] 19th Biennial APS Conference on Shock Compression of Condensed Matter (SCCM). Tampa, Florida, USA, June 14-19, 2015. <http://msl.cas.usf.edu/sccm-2015/>
- [19] The 36th Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS), Prague, Czech Republic, European Union, 6-9 July, 2015. <http://www.piers.org/piers2015Prague/>
- [20] The 13th Conference on Laser Ablation (COLA-2015), Cairns, Australia, 31 August-4 September 2015. <http://cola2015.org/>
- [21] International Conference on Computer Simulation in Physics (CSP) and beyond, September 6-10, 2015, Moscow, Russia (ICCSP, Moscow). <http://csp2015.ac.ru/>
- [22] EMN Meeting on Ultrafast Research. Energy Materials Nanotechnology. November 16-19, 2015 Las Vegas, NV USA. <http://www.emnmeeting.org/ultrafast/>
- [23] Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics, November 27-28, 2015, Moscow, Russia. <http://www.ihed.ras.ru/npp2015/main/>

## 1.6. Файл с дополнительными материалами

(при необходимости представления экспертному совету РНФ дополнительных графических материалов к отчету по проекту, файл размером до 3 Мб в формате pdf) скачать...

## 1.7. Перечень публикаций за год по результатам проекта

(публикации добавляются из списка зарегистрированных участниками проекта публикаций)

1. M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, M. Yamagiwa **Low electron temperature in ablating materials formed by picosecond soft x-ray laser pulses** SPIE Proceedings (2015 г.) [WOS](#) [SCOPUS](#) [РИНЦ](#)
2. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M. B. Agranat, S. I. Ashitkov, A. Ya. Faenov and 13 more **Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump—X-ray probe experiment** Applied Physics B (2015 г.) [WOS](#) [SCOPUS](#) [РИНЦ](#)
3. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov **Three Dimensional Ablation Flow Produced by Ultrashort Laser Pulse from Perfectly Flat Target** Progress In Electromagnetics Research Symposium Proceedings, Prague, Czech Republic, July 6–9, 2015 (2015 г.) [SCOPUS](#)
4. S. A. Dyachkov, A. N. Parshikov, V. V. Zhakhovsky **Shock-produced ejecta from Tin: comparative study by molecular dynamics and smoothed particle hydrodynamics methods** Journal of Physics: Conference Series (2015 г.) [WOS](#) [SCOPUS](#) [РИНЦ](#)
5. V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, D. K. Il'inskiy, K. P. Migdal and V.V. Shepelev **Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation** Shock Compression of Condensed Matter (the Proceedings of the 19th Biennial APS Conference on Shock Compression of Condensed Matter) (2015 г.) [SCOPUS](#) [РИНЦ](#)
6. Y. Rosandi, F. C. Kabeer, Y. Cherednikov, E. S. Zijlstra, M. E. Garcia, N. A. Inogamov, H. M. Urbassek **Melting of Al Induced by Laser Excitation of 2p Holes** Materials Research Letters (2015 г.) [WOS](#) [SCOPUS](#)
7. Yu. V. Petrov, K. P. Migdal, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky **Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse** Applied Physics B (2015 г.) [WOS](#) [SCOPUS](#) [РИНЦ](#)
8. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов **Струеобразование при отрыве металлической пленки от подложки в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса** ЖЭТФ (2015 г.) [WOS](#) [SCOPUS](#) [РИНЦ](#)

## 1.8. В 2015 году возникли исключительные права на результаты интеллектуальной деятельности, созданные при выполнении проекта:

нет

## 1.9. Показатели реализации проекта

Плановые значения указываются только для показателей, предусмотренных соглашением

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

Показатель	Единица измерения	2015 год	
		план	факт
Число членов научной группы	человек	12	13
Число исследователей в возрасте до 39 лет среди членов научной группы	человек	3	4
в том числе:			
кандидатов наук в возрасте до 35 лет (включительно)	человек	1	1
аспирантов (интернов, ординаторов) и (или) студентов очной формы обучения	человек	2	2
Количество лиц категории «Вспомогательный персонал»	человек		

**Публикационные показатели реализации проекта** (нарастающим итогом, за исключением показателя «Число цитирований публикаций членов научной группы в научных журналах, индексируемых в международной базе данных «Сеть науки» (WeB of Science) в отчетном году, рассчитываются автоматически на основании введенных сведений о публикациях»)

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).

Показатель	Единица измерения	2014 - 2015 г.	
		план	факт
Количество публикаций по проекту членов научной группы в рецензируемых российских и зарубежных научных изданиях, индексируемых в базе данных «Сеть науки» (Web of Science)	Ед.	8	9
Число цитирований публикаций членов научной группы в научных журналах, индексируемых в международной базе данных «Сеть науки» (WeB of Science) в отчетном году	Ед.	0	160
Количество публикаций по проекту членов научной группы в рецензируемых российских и зарубежных научных изданиях, индексируемых в базе данных «Скопус» (SCOPUS)	Ед.	8	11
Количество публикаций по проекту членов научной группы, индексируемых в базе данных «РИНЦ»	Ед.	8	9
Количество монографий по проекту членов научной группы	Ед.	0	0
Количество зарегистрированных результатов интеллектуальной деятельности по проекту членов научной группы	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.)

Конференция "New Models and Hydrocodes for Shock Wave Processes in Condensed Matter, 10th Meeting", Pardubice, Czech Republic, July 27 – August 1, 2014

Устный доклад Vasily Zhakhovsky, Nail Inogamov, Sergey Anisimov, "Peculiar Structure of Two-Zone Elastic-Plastic Single Shock Wave in Copper in [100] Direction"

и стендовый доклад Denis Ilnitsky, Nail Inogamov, Vasily Zhakhovsky, Kirill Migdal, "Mathematical Modeling of Elasto-Plastic Deformation of Metals Irradiated by Ultrashort Laser Pulses"

Конференция "Twelfth International Seminar MATHEMATICAL MODELS & MODELING IN LASER PLASMA PROCESSES & ADVANCED SCIENCE TECHNOLOGIES", May 31 - June 7, 2014

Приглашенный доклад N.A. Inogamov, "Femtosecond ablation: excitation of electrons, thermomechanical disintegration, and surface structuring"

Конференция "9th International Conference on Photo-Excited Processes and Applications ICPEPA-9", September 30 - October 3, 2014, Matsue, Japan

Устный доклад M. B. Agranat, S. I. Ashitkov, Baba, T. Eyama, A. Ya. Faenov, N. Hasegawa, D. Hatomi, D. K. Il'nitsky, N. A. Inogamov, T. Kawachi, V. A. Khokhlov, Y. Minami, M. Nishikino, N. A. Ohnishi, T. A. Pikuz, V. V. Shepelev, T. Suemoto, S. Takayoshi, R. Takei, T. Tomita, M. Yamagiwa, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, "Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse"

Научно-координационная сессия "Исследования неидеальной плазмы" 2-3 декабря 2014 г., Президиум РАН, Ленинский проспект 32а, Москва

Устный доклад Иногамов Н.И., Анисимов С.И., Хохлов В.А., Петров Ю.В., Жаховский В.В., "Новые возможности диагностики двухтемпературных состояний, возникающих при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов"

Конференция "The Seventh International EMMI Workshop on Plasma Physics with Intense Heavy Ion and Laser Beams at FAIR" December 9-10, 2014, Moscow, Russia

Стендовый доклад Н.А. Иногамов, "FEMTOSECOND LASER ABLATION: THREE-DIMENSIONAL EFFECTS"

8-я Всероссийская школа-семинар «Аэротермодинамика и физическая механика классических и квантовых систем», 2-3 декабря 2014 г., Институт проблем механики им. А.Ю.Ишлинского РАН  
Устный доклад «Молекулярная динамика и методы Монте-Карло в задачах лазерной абляции: результаты применения».

XLI Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу 42th international conference on plasma physics and CF, February 9 – 13, 2015, Zvenigorod, Russia.

Устный доклад T. Kawachi, M. Nishikino, A.Ya. Faenov, T. Pikuz, M. Ishino, N. Hasegawa, M. Magnitskii, A. Pirozhkov, T. Esirkepov, M. Nishiuchi, M. Maruyama, Y. Fukuda, N. Inogamov, E. Oks, H. Kiriya, M. Kando, M. Yamagiwa, S. Bulanov, K. Kondo, R. Kodama and Y. Kato, "SOURCE DEVELOPMENT AND NOVEL APPLICATIONS OF COHERENT X-RAYS AND ENERGETIC PARTICLE BEAMS USING HIGH PEAK POWER LASERS IN JAPAN ATOMIC ENERGY AGENCY"

XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter, March 1-6, 2015, Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia.

4 устных доклада:

Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V., Khokhlov V.A., Faenov A.Ya., Shepelev V.V., Il'nitsky D.K., Hasegawa N., Nishikino M., Yamagiwa M., Ishino M., Pikuz T.A., Takayoshi S., Tomita T., Kawachi T. "Modeling of pump-probe experiments with Ti:sapp pump and x-ray probe"

Khokhlov V.A., Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V., Shepelev V.V., Il'nitsky D.K., "Thin 10--100 nm film in contact with substrate: Dynamics after femtosecond laser irradiation"

Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V., Khokhlov V.A., Shepelev V.V., Niffenegger K. "Mechanisms of laser peeling of thin films from substrate and formation of nanobump"

Migdal K.P., Il'nitsky D.K., Petrov Yu.V., Inogamov N.A., "Two-temperature equations of state and lattice stability of copper and gold"

Progress In Electromagnetics Research Symposium PIERS 2015 in Prague, Czech Republic, 06-09 July, 2015

3 устных доклада:

N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov. "Three Dimensional Ablation Flow Produced by Ultrashort Laser Pulse from Perfectly Flat Target"

N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, K.V. Khishchenko, and S.I. Anisimov. "Femtosecond Laser Ablation of Thin Films on Substrate"

Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov and K.P. Migdal. "Two-temperature Heat Conductivity of Gold"

X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications XI. San Diego, California, United States, 9 - 13 August 2015

Приглашенный доклад M. Nishikino, T. Kawachi, N. Hasegawa, M. Ishino, Y. Minami, T. Suemoto, N. Ohnishi, A.M. Ito, K. Sato, A.Ya. Faenov, N.A. Inogamov, M. Yamagiwa. "Observation of dynamics and modification of solid surface using a picosecond soft x-ray laser"

Устный доклад M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, M. Yamagiwa. "Low electron temperature in ablating materials formed by picosecond soft x-ray laser pulses"

Международная конференция по лазерной абляции The 13th Conference on Laser Ablation (COLA-2015), Кэрнс, Австралия, 31.08-04.09.2015 <http://cola2015.org>

Устный доклад: "Динамика золотых и серебряных плёнок, возникающая под действием фемтосекундного лазерного импульса", Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, В.А. Хохлов, Ю.В. Петров, К.П. Мигдал.

2 стендовых доклада:

"Влияние электронного переноса на динамику разрушения медной нанофольги", К.П. Мигдал, Ю.В. Петров, Д.К. Ильницкий, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, К.В. Хищенко, Д.В. Князев, П.Р. Левашов;

"Фемтосекундная лазерная абляция в тонких плёнках на подложке", Н.А. Иногамов, В.А. Хохлов, В.В. Жаховский, Ю.В. Петров, К.В. Хищенко, С.И. Анисимов.

EMN Meeting on Ultrafast Research, Las Vegas, NV, USA, November 16-19, 2015.

<http://www.emnmeeting.org/ultrafast/>

Приглашенный доклад Nail Inogamov "Random and Solitary Nanostructures Created by Ultrashort Laser Action"

Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics, November 27-28, 2015, Moscow, Russia. Сайт конференции <http://www.ihed.ras.ru/npp2015/> Абстракты докладов

[http://www.ihed.ras.ru/npp2015/abstracts/npp2015\\_abstracts.pdf](http://www.ihed.ras.ru/npp2015/abstracts/npp2015_abstracts.pdf)

постерный и устный доклады:

Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V., Khokhlov V.A., Petrov Yu.V., Migdal K.P., Anisimov S.I., "RAPID NON-EQUILIBRIUM CRYSTALLIZATION OF FLYING MOLTEN THIN SHELL CREATED BY FEMTOSECOND LASER ACTION" (постер)

Petrov Yu.V., Migdal K.P., Inogamov N.A., Knyazev D.V., Levashov P.R., "Transport properties of solid and liquid copper with hot electrons" (устный доклад)

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

да

Настоящим подтверждаю:

- самостоятельность и авторство текста отчета о выполнении проекта;
- что при обнародовании результатов выполненного в рамках поддержанного РНФ проекта научная группа ссылалась 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, кроме предусмотренных соглашением;
- что проект не является аналогичным по содержанию проекту, одновременно финансируемому из других источников.

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 2015 году

(заполняется отдельно на каждую публикацию, имеющую соответствующую ссылку на поддержку РФФИ, для формирования п. 1.7. отчета)

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

**2.1. Авторы публикации**

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

**2.2. Название публикации**

Melting of Al Induced by Laser Excitation of 2p Holes

**2.3. Год публикации**

2015

**2.4. Ключевые слова**

Laser Materials Processing, XUV Irradiation, Molecular Dynamics, Al

**2.5. Вид публикации**

статья

**2.6. Название издания**

(для монографий также указываются название издательства и город)

Materials Research Letters

**2.7. Выходные данные публикации**

(номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав, заполняется только для опубликованных работ)

Vol. 3, No. 3, P. 149–155

**Месяц и год публикации**

11.2015

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

<http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/21663831.2015.1033564>

**2.8. DOI (при наличии)**

Цифровой идентификатор объекта (digital object identifier).

10.1080/21663831.2015.1033564

**2.9. Принята к публикации**

(указывается только для еще **не опубликованных работ** в случае их официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

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

В формате pdf, размер 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 последнего на момент составления отчета года, для Scopus – Impact Per Publication (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

Работа Н. А. Иногамова выполнялась за счет Российского Научного Фонда, другие авторы финансировались из других источников: NI thanks support from the Russian Science Foundation grant 14-19-01599.

## 2.16. Файл с текстом публикации

*(представляется для материалов, не находящихся в открытом доступе; для монографий не предоставляется; размер до 3 Мб в формате pdf) скачать...*

---

### 2.1. Авторы публикации

N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M. B. Agranat, S. I. Ashitkov, A. Ya. Faenov and 13 more

### 2.2. Название публикации

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

### 2.3. Год публикации

2015

### 2.4. Ключевые слова

Two-temperature hydrodynamics, ultrashort laser pulse, optical pump—X-ray probe experiment

### 2.5. Вид публикации

статья

### 2.6. Название издания

*(для монографий также указываются название издательства и город)*

Applied Physics B

### 2.7. Выходные данные публикации

*(номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав, заполняется только для опубликованных работ)*

Volume 119, Issue 3, pp 413-419

### Месяц и год публикации

02.2015

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

<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00340-015-6039-7>

### 2.8. DOI *(при наличии)*

Цифровой идентификатор объекта (digital object identifier).

10.1007/s00340-015-6039-7

### 2.9. Принята к публикации

*(указывается только для еще не опубликованных работ в случае их официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)*

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

В формате pdf, размер 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 последнего на момент составления отчета года, для Scopus— Impact Per Publication (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

1.856

**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

Работа участников Н.А. Иногамова, В.В. Жаховского, В.А. Хохлова, Д.К. Инитского, Ю.В. Петрова, К.П. Мигдала, А.Ф. Фаенова и Т.А. Пикуз выполнялась за счет Российского Научного Фонда, экспериментальная работа других соавторов финансировалась из других источников:

The research (NAI, VVZh, VAKh, DKI, YVP, KPM, AYF, TAP) has been performed under financial support from

Russian Science Foundation (RSCF) (Project No. 14-19-01599). This work (except NAI, VVZh, VAKh, DKI, YVP, KPM) was partly supported by Grant-in-Aid for Scientific Research (B), No. 25289244 (2013), from MEXT and bilateral program: Japan Society for the Promotion of Science (JSPA) and Russian Academy of Sciences (RAS) under the JSPS-RAS Joint Research Program (RFBR Grant 14-02-92107)

**2.16. Файл с текстом публикации**

*(представляется для материалов, не находящихся в открытом доступе; для монографий не предоставляется; размер до 3 Мб в формате pdf) скачать...*

---

**2.1. Авторы публикации**

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

**2.2. Название публикации**

Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation

**2.3. Год публикации**

2015

**2.4. Ключевые слова**

Femtosecond laser action onto thin film, Spallation, Laser ablation

**2.5. Вид публикации**

статья

**2.6. Название издания**

*(для монографий также указываются название издательства и город)*

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

**2.7. Выходные данные публикации**

*(номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав, заполняется только для опубликованных работ)*

**Месяц и год публикации**

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

## 2.8. DOI (при наличии)

Цифровой идентификатор объекта (digital object identifier).

## 2.9. Принята к публикации

(указывается только для еще **не опубликованных работ** в случае их официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

да

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

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

скачать...

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

## 2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition последнего на момент составления отчета года, для Scopus – Impact Per Publication (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

(представляется для материалов, не находящихся в открытом доступе; для монографий не предоставляется; размер до 3 Мб в формате pdf) скачать...

---

## 2.1. Авторы публикации

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

## 2.2. Название публикации

Low electron temperature in ablating materials formed by picosecond soft x-ray laser pulses

## 2.3. Год публикации

2015

## 2.4. Ключевые слова

soft x-ray laser, laser ablation, laser produced plasma, electron temperature

## 2.5. Вид публикации

статья

## 2.6. Название издания

(для монографий также указываются название издательства и город)

SPIE Proceedings

## 2.7. Выходные данные публикации

(номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав, заполняется только для опубликованных работ)

Vol. 9589, 958904

## Месяц и год публикации

09.2015

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

[http://spie.org/Publications/Proceedings/Paper/10.1117/12.2186053?](http://spie.org/Publications/Proceedings/Paper/10.1117/12.2186053?origin_id=x4325&start_volume_number=9500)

[origin\\_id=x4325&start\\_volume\\_number=9500](http://spie.org/Publications/Proceedings/Paper/10.1117/12.2186053?origin_id=x4325&start_volume_number=9500)

**2.8. DOI (при наличии)**

Цифровой идентификатор объекта (digital object identifier).

10.1117/12.2186053

**2.9. Принята к публикации**

*(указывается только для еще не опубликованных работ в случае их официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)*

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

В формате pdf, размер 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 последнего на момент составления отчета года, для Scopus – Impact Per Publication (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:

да

Работа Н. А. Иногамова выполнялась за счет Российского Научного Фонда, другие авторы финансировались из других источников.

**2.16. Файл с текстом публикации**

*(представляется для материалов, не находящихся в открытом доступе; для монографий не предоставляется; размер до 3 Мб в формате pdf) скачать...*

---

**2.1. Авторы публикации**

N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov

**2.2. Название публикации**

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

**2.3. Год публикации**

2015

**2.4. Ключевые слова**

laser ablation, ultrashort laser pulse, surface nanostructuring

**2.5. Вид публикации**

статья

**2.6. Название издания**

*(для монографий также указываются название издательства и город)*

Progress In Electromagnetics Research Symposium Proceedings, Prague, Czech Republic, July 6–9,

2015

## 2.7. Выходные данные публикации

(номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав, заполняется только для опубликованных работ)

pp. 2422-2426

## Месяц и год публикации

07.2015

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

[http://piers.org/piersproceedings/download.php?](http://piers.org/piersproceedings/download.php?file=cGllcnMyMDE1UHJhZ3VfDRBmI8yNDI3LnBkZnwxNTAyMDUxMDQ3MDc=)

[file=cGllcnMyMDE1UHJhZ3VfDRBmI8yNDI3LnBkZnwxNTAyMDUxMDQ3MDc=](http://piers.org/piersproceedings/download.php?file=cGllcnMyMDE1UHJhZ3VfDRBmI8yNDI3LnBkZnwxNTAyMDUxMDQ3MDc=)

## 2.8. DOI (при наличии)

Цифровой идентификатор объекта (digital object identifier).

## 2.9. Принята к публикации

(указывается только для еще **не опубликованных работ** в случае их официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

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

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

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

нет

## 2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition последнего на момент составления отчета года, для Scopus – Impact Per Publication (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

(представляется для материалов, не находящихся в открытом доступе; для монографий не предоставляется; размер до 3 Мб в формате pdf) скачать...

---

## 2.1. Авторы публикации

Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов

## 2.2. Название публикации

Струеобразование при отрыве металлической пленки от подложки в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса

## 2.3. Год публикации

2015

## 2.4. Ключевые слова

ультракороткие лазерные импульсы, поверхностные наноструктуры

## 2.5. Вид публикации

статья

## 2.6. Название издания

(для монографий также указываются название издательства и город)

ЖЭТФ

## 2.7. Выходные данные публикации

(номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав, заполняется только для опубликованных работ)

Т. 147, № 1, с. 20-56

## Месяц и год публикации

01.2015

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

<http://jetp.ac.ru/cgi-bin/r/index/r/147/1/p20?a=list>

## 2.8. DOI (при наличии)

Цифровой идентификатор объекта (digital object identifier).

10.7868/S0044451015010034

## 2.9. Принята к публикации

(указывается только для еще **не опубликованных работ** в случае их официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

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

В формате pdf, размер 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 последнего на момент составления отчета года, для Scopus – Impact Per Publication (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

.879

## 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

(представляется для материалов, не находящихся в открытом доступе; для монографий не предоставляется; размер до 3 Мб в формате pdf) скачать...

---

## 2.1. Авторы публикации

S. A. Dyachkov, A. N. Parshikov, V. V. Zhakhovsky

## 2.2. Название публикации

Shock-produced ejecta from Tin: comparative study by molecular dynamics and smoothed particle hydrodynamics methods

## 2.3. Год публикации

2015

#### **2.4. Ключевые слова**

shock-induced ejecta from metal surface, Richtmyer–Meshkov instability, smoothed particle hydrodynamics, molecular dynamics

#### **2.5. Вид публикации**

статья

#### **2.6. Название издания**

*(для монографий также указываются название издательства и город)*

Journal of Physics: Conference Series

#### **2.7. Выходные данные публикации**

*(номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав, заполняется только для опубликованных работ)*

V. 653, 012043

#### **Месяц и год публикации**

11.2015

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

[http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-](http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/653/1/012043/meta;jsessionid=C1710C42FCF3563CA72AD14647272F2A.c1.iopscience.cld.iop.org)

[6596/653/1/012043/meta;jsessionid=C1710C42FCF3563CA72AD14647272F2A.c1.iopscience.cld.iop.org](http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/653/1/012043/meta;jsessionid=C1710C42FCF3563CA72AD14647272F2A.c1.iopscience.cld.iop.org)

#### **2.8. DOI *(при наличии)***

Цифровой идентификатор объекта (digital object identifier).

10.1088/1742-6596/653/1/012043

#### **2.9. Принята к публикации**

*(указывается только для еще не опубликованных работ в случае их официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)*

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

В формате pdf, размер 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 последнего на момент составления отчета года, для Scopus – Impact Per Publication (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:**

нет

Авторы публикации указали основное место работы и не указали, что по совместительству являются сотрудниками в организации, через которую осуществляется финансирование - ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН.

#### **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**

*(представляется для материалов, не находящихся в открытом доступе; для монографий не*



**2.1. Авторы публикации**

Yu. V. Petrov, K. P. Migdal, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky

**2.2. Название публикации**

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

**2.3. Год публикации**

2015

**2.4. Ключевые слова**

two-temperature equation of state, ultrashort laser pulse

**2.5. Вид публикации**

статья

**2.6. Название издания**

*(для монографий также указываются название издательства и город)*

Applied Physics B

**2.7. Выходные данные публикации**

*(номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав, заполняется только для опубликованных работ)*

Volume 119, Issue 3, pp 401-411

**Месяц и год публикации**

02.2015

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

<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00340-015-6048-6>

**2.8. DOI *(при наличии)***

Цифровой идентификатор объекта (digital object identifier).

10.1007/s00340-015-6048-6

**2.9. Принята к публикации**

*(указывается только для еще не опубликованных работ в случае их официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)*

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

В формате pdf, размер 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 последнего на момент составления отчета года, для Scopus – Impact Per Publication (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

1.856

**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**

*(представляется для материалов, не находящихся в открытом доступе; для монографий не предоставляется; размер до 3 Мб в формате pdf) скачать...*

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

План работы на 2016 год и ожидаемые результаты по проекту  
№ 14-19-01599  
«Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в  
трехмерной геометрии»

### 3.1. План работы на 2016 год

(в том числе указываются запланированные командировки по проекту), до 5 стр.

1). За 2015 г. созданы физические модели и численные коды для задачи о структурировании металлической пленки при воздействии на нее сфокусированного на дифракционном пределе ультракороткого лазерного импульса (см. пп. 1.3 и 1.6 отчета). Получено представление о режимах структурирования. Задача эта является важной для приложений и востребованной экспериментаторами.

В 2016 г. будут выполнены совместные работы нашего коллектива с экспериментальными лабораториями в ИВТ, ФИАНе и ИАПУ ДВО РАН. Будут выяснены возможности оптимизации структур для наноплазмоники.

2). Будут продолжены исследования термодинамических и кинетических характеристик металлов с разной структурой электронных энергетических зон в неравновесном состоянии с отличающимися температурами электронов и ионов. Эти характеристики металла очень важны для применения в гидродинамическом коде, используемом для описания динамики абляции вещества под действием ультракоротких лазерных импульсов.

Кроме того, термодинамика и кинетика электронов определяет изменение оптических свойств металла в двухтемпературном (2Т) состоянии и тем самым оказывает влияние на отклик вещества мишени на воздействие пробных лазерных импульсов, используемых для оптической диагностики процесса абляции. Поэтому в плане работы на 2016 год предусматривается исследование влияния 2Т ситуации на оптические свойства металлов, в первую очередь благородных. Будет исследовано изменение коэффициента отражения тонких пленок этих металлов в процессе гидродинамического движения пленок при поверхностной плотности энергии лазерного излучения, меньшей порога абляции. При этом вещество мишени в течение всего процесса находится в твердой фазе.

Для больших значений интенсивности лазерного излучения, когда происходит плавление металла в области прогрева, будут вычислены кинетические коэффициенты рассматриваемых жидких металлов в 2Т состоянии.

Будут построены 2Т уравнения состояния (2Т-УрС) меди на основе данных 2Т квантового молекулярно-динамического расчёта, проведённого в 2015 году. Данное 2Т-УрС совместно с полученными в 2015 году из первых принципов кинетическими коэффициентами меди будет применено для 2Т гидродинамического моделирования лазерных мишеней.

3). 2Т гидродинамические (ГД) расчеты намного экономичнее молекулярно-динамических (МД) расчетов.

Поэтому в 2016 г. будет продолжена разработка одномерных в плоской и сферической геометрии и многомерных ГД кодов. При этом постоянно будут проводиться сравнения с результатами МД моделирования одинаковых задач. Сравнение будет производиться на задачах лазерной абляции, когда картина течения охватывает нагретый лазером слой, и на задаче о выходе ударной волны на тыльную сторону пленки или пластины.

4). Будут выполнены работы по моделированию лазерного воздействия, когда поглощающая мишень находится в контакте с прозрачным твердым или жидким веществом. Причем облучение идет через прозрачное вещество. В случае воды будет использован межатомный потенциал воды, разработанный в 2015 г.

5). Важной является задача о воздействии субнаносекундного оптического лазерного импульса на пленки толщиной несколько микрон. При этом диагностика осуществляется ультракоротким (длительность 10-100 фс) жестким (фотон 10-12 кэВ) импульсом рентгеновского лазера (РЛ) на свободных электронах. С помощью импульса РЛ и его рентгеновской дифракции на мишени осуществляют диагностику состояния вещества в твердом состоянии при давлениях порядка мегабара. Методика создана для исследования фазовых превращений при значительных сжатиях. Предстоит исследование ГД отклика пленки на оптическое лазерное воздействие. Это необходимо, чтобы расшифровать экспериментальный сигнал, содержащий как термодинамические, так и гидродинамические сведения.

### **3.2. Ожидаемые в конце 2016 года конкретные научные результаты**

*(форма изложения должна дать возможность провести экспертизу результатов и оценить степень выполнения заявленного в проекте плана работы), до 5 стр.*

1). Физические модели и численные коды, созданные в 2015 г. будут применены для объяснения экспериментов по лазерному структурированию пленок металла (золото, серебро, возможно сплавы) остросфокусированным пучком. Будут выяснены возможности управления структурами путем варьирования лазерных параметров и параметров мишени.

2). С использованием полученных для твердой фазы кинетических коэффициентов и гидродинамического моделирования будет получено временное изменение коэффициента отражения диагностического луча оптического диапазона частот от тонких металлических пленок при поверхностной плотности энергии греющего импульса ниже порога абляции. Будет проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными, позволяющее вести корректировку используемых термодинамических, кинетических и гидродинамических моделей.

Будут построены 2Т уравнения состояния (2Т-УрС) меди на основе данных 2Т квантового молекулярно-динамического расчёта, проведённого в 2015 году. Данное 2Т-УрС совместно с полученными в 2015 году из первых принципов кинетическими коэффициентами меди будет применено для 2Т гидродинамического моделирования лазерных мишеней.

3). В 2016 г. будет продолжена разработка одномерных в плоской и сферической геометрии и многомерных ГД кодов.

При этом постоянно будет проводиться сравнения с результатами МД моделирования по расчетам одинаковых задач.

4). Будут выполнены работы по моделированию лазерного воздействия, когда поглощающая мишень находится в контакте с прозрачным твердым или жидким веществом. Причем облучение идет через прозрачное вещество.

5). Будет проанализирована задача о воздействии субнаносекундного оптического лазерного импульса на пленки толщиной несколько микрон. При этом диагностика осуществляется ультракоротким (длительность 10-100 фс) жестким (фотон 10-12 кэВ) импульсом рентгеновского

лазера (РЛ) на свободных электронах. С помощью импульса РЛ и его рентгеновской дифракции на мишени осуществляют диагностику состояния вещества в твердом состоянии при давлениях порядка мегабара. Методика создана для исследования фазовых превращений при значительных сжатиях. Нам предстоит исследование ГД отклика пленки на оптическое лазерное воздействие. Это необходимо, чтобы отделить термодинамический отклик мишени от гидродинамических искажений.

### **3.3. Файл с дополнительной информацией**

*(с графиками, фотографиями, рисунками и иной информацией о содержании проекта, при необходимости, размер до 3 Мб в формате pdf)*

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

Запрашиваемое финансирование по проекту  
№ 14-19-01599  
«Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в  
трехмерной геометрии»,  
на 2016 год

**4.1. Планируемые расходы по проекту за счет средств, предоставляемых Фондом на следующий год (тыс. руб.)**

Без учета неиспользованного остатка средств гранта предыдущих лет на начало планируемого года.

№ п.п.	Направления расходования средств гранта	Сумма расходов (тыс.руб.)
	<b>ВСЕГО</b>	1800
	Вознаграждение членов научной группы (с учетом страховых взносов во внебюджетные фонды, без лиц категории «вспомогательный персонал»),	1380
	в том числе:	
	вознаграждение членов научной группы – исследователей в возрасте до 39 лет (включительно) Имеет информационный характер.	398.9
	в том числе:	
	вознаграждение членов научной группы – кандидатов наук в возрасте до 35 лет (включительно), членов научной группы без ученой степени в возрасте до 30 лет (включительно) Должно соответствовать пункту 2.3.6 соглашения – не менее 25 процентов от суммы ежегодного вознаграждения всех членов научной группы.	345
	Вознаграждение лиц категории «вспомогательный персонал» (с учетом страховых взносов во внебюджетные фонды)	0
1	Итого вознаграждение (с учетом страховых взносов во внебюджетные фонды)	1380
2	Оплата услуг сторонних организаций	0
3	Расходы на приобретение оборудования и иного имущества, необходимых для проведения научного исследования (включая монтаж, пусконаладочные работы, обучение сотрудников и ремонт)	0
4	Расходы на приобретение материалов и комплектующих для проведения научного исследования	0
5	Иные расходы для целей выполнения проекта	150
6	Накладные расходы организации	270

**4.2. Расшифровка планируемых расходов**

**№ п.п. Направления расходования средств гранта, расшифровка**

- 1 Итого вознаграждение (с учетом страховых взносов во внебюджетные фонды)  
(указывается общая сумма вознаграждения, включая установленные трудовым законодательством Российской Федерации гарантии, отчисления по страховым взносам на обязательное пенсионное страхование, на обязательное медицинское страхование, на обязательное социальное страхование на случай временной нетрудоспособности и в связи с материнством, на обязательное социальное страхование от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний)

Сумма вознаграждения исполнителям 1380,

в том числе в возрасте до 39 лет 398.9,

## 2 Оплата услуг сторонних организаций

(приводится перечень планируемьх договоров (счетов) со сторонними организациями с указанием предмета и суммы каждого договора)

## 3 Расходы на приобретение оборудования и иного имущества, необходимых для проведения научного исследования (включая монтаж, пусконаладочные работы, обучение сотрудников и ремонт)

(представляется перечень планируемьх к закупке оборудования и иного имущества, необходимых для проведения научного исследования)

## 5 Иные расходы для целей выполнения проекта

(приводится классификация иных затрат на цели выполнения проекта, в том числе - расходы на командировки, связанные с выполнением проекта или представлением результатов проекта, оплату услуг связи, транспортньх услуг, иное; расходы не расшифровываются)

Оплата командировок для участия в конференциях и совместной научной работы по теме проекта гранта 110

Иное 40

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

Подпись руководителя организации, заверенная печатью

\_\_\_\_\_/\_\_\_\_\_/

М.П.

## Изменения в составе участников

**Фаенов Анатолий Яковлевич**

**Мигдал Кирилл Петрович**

**Петров Юрий Васильевич**

**Хохлов Виктор Александрович**

**Ильницкий Денис Константинович**

**Жаховский Василий Викторович**

**Шепелев Вадим Владимирович**

**Сергеев Олег Вячеславович**

**Дьячков Сергей Александрович**

**Паршиков Анатолий Николаевич**

**Иногамов Наиль Алимович**

**Пикуз Татьяна Александровна**