

## Отчет о выполнении проекта

№ 14-19-01599

### Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в трехмерной геометрии в 2014 году.

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

1. Будет написан многомерный гидрокод для расчета трехмерных эффектов, возникающих на границе кратера, возникающего в твердой мишени под действием ультракоротких лазерных импульсов. В гидрокоде, как и его одномерном аналоге, будет учтено возбуждение электронной подсистемы, теплопроводность, обмен энергией между электронами и ионами. Многомерный гидрокод будет применен для решения задачи об отрыве металлической пленки от диэлектрической подложки под действием фемтосекундного лазерного импульса. Проведенное с помощью многомерного гидродинамического кода исследование задач о границе кратера и отрыве металлической пленки от диэлектрической подложки будет в дальнейшем использовано для оптимизации параметров в молекулярно-динамическом моделировании этих задач с целью уменьшить трудоемкость молекулярно-динамических расчетов.
2. Будет начато решение сложной задачи о формировании и эволюции поверхностных структур в режиме повторяющихся выстрелов (multi-shots). Здесь требуется применение разнообразных средств: многомерного моделирования тепловых задач, многомерных гидродинамических расчетов и молекулярной динамики.
3. Будет начато решение задачи о динамике дислокаций, создаваемых в веществе мишени под действием ультракоротких лазерных импульсов, их зарождении, движении, размножении. Создание дислокационной модели будет нацелено на ее включение в гидродинамические расчеты с целью заменить ими часть более громоздких молекулярно-динамических вычислений.
4. Будут рассмотрены подходы к решению задачи о лазерной абляции металлов в конденсированную среду под действием ультракоротких импульсов, в которой наибольший интерес представляет распространение вещества мишени в окружающем веществе.
5. Будет проведен анализ задачи об облучении наночастиц ультракоротким лазерным импульсом.

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

В конце первого года выполнения проекта будет получена гидродинамическая картина полей скоростей, электронных и ионных температур, давлений, плотности при абляции пленки золота, нанесенной на стеклянную подложку, под действием фемтосекундных лазерных импульсов.

Будут рассчитаны необходимые в гидродинамических расчетах термодинамические функции золота в двухтемпературном состоянии с сильно различающимися температурами электронов и ионов.

В двухтемпературном состоянии будут рассчитаны кинетические коэффициенты, определяющие прогрев мишени из золота ультракоротким лазерным излучением – электронный коэффициент теплопроводности и коэффициент электрон-ионного обмена энергией.

Будет произведен расчет взаимодействия ультракороткого лазерного импульса со сферической металлической наночастицей. Рассмотрение будет проведено с применением гидродинамического кода в лагранжевых переменных в сферической геометрии. Будет разработана модификация многопроцессорного молекулярно-динамического кода на случай сферических частиц.

Будут произведены эксперименты по изучению строения края лазерного кратера, образованного действием фемтосекундных лазерных импульсов оптического диапазона частот, на лазерных системах в Kansai Photon Science Institute (KPSI), Япония (группой по руководством участника проекта А.Я. Фаенова).

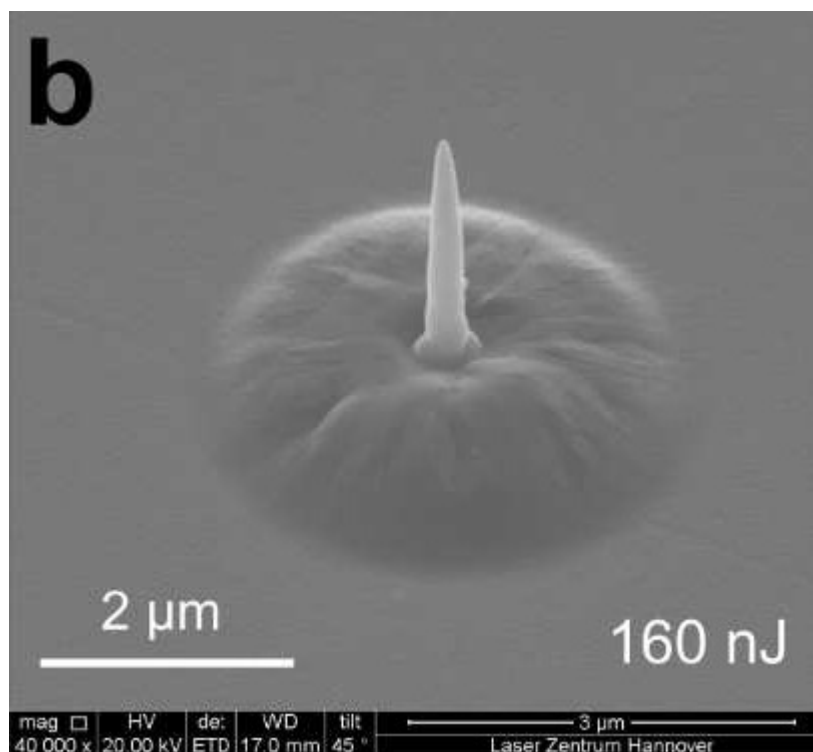
Будет написан многомерный гидродинамический код, с помощью которого будет получен расчет течения вещества лазерной мишени на границе абляционного кратера при параметрах вещества мишени и лазерного импульса, соответствующих экспериментам, проводимым группой А.Я. Фаенова в Kansai Photon Science Institute (KPSI), Япония.

### **1.3. Сведения о фактическом выполнении плана работы на год (фактически проделанная работа)**

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

**Изучаемые в рамках проекта РНФ 14-19-01599 явления возникают при воздействии ультракоротких импульсов (УКЛИ) на вещество. Их исследование требует, во-первых, построения теоретических моделей из разных разделов физики от возбуждения электронов светом до термодинамики и гидродинамики и, во-вторых, искусного численного моделирования. В соответствии с этими условиями подобран наш коллектив. Кроме того, необходим контакт с экспериментаторами и расчетчиками. В 2014 г. мы особенно плотно взаимодействовали с ОИВТ РАН (лаб. М.Б. Аграната, лаб. УрС К.В. Хищенко) и с группой проф. Kawachi из Kansai Photon Science Institute (KPSI), Japan Atomic Energy Agency (JAEA) по проекту РНФ, см. [2,4,6]. Это говорится здесь для того, чтобы подчеркнуть, решение каждой из заявленных проблем требует анализа ряда сопутствующих задач и поиска оптимальных путей, поскольку прямое численное решение не проходит (для него нужны слишком высокие параметры ЭВМ, которых нет на сегодня). Хороший пример связан с анализом процессов при воздействии УКЛИ на тонкую пленку металла, напыленного на подложку. Данная проблема имеет широкий круг важных приложений; скажем об этом ниже, под оценкой необходимых численных ресурсов и путей обхода чрезмерных требований на эти ресурсы.**

Пример геометрии нанобампа (nanobump), созданного воздействием УКЛИ, показан на рис.1.



Размер облученного пятна порядка нескольких микрон, толщина металлической пленки порядка нескольких десятков нанометров. Объем этой области металла порядка  $10^8$  нм<sup>3</sup>, в ней содержится  $10^{10}$  атомов. Такого же порядка должно быть число атомов, учтенных в подложке, поскольку время отрыва определяется звуковым масштабом времени. За это время акустический сигнал пробегает по толщине пленки, а скорости звука в пленке и подложке одного порядка. Формирование нанобампа требует единиц и десятков наносекунд. Молекулярно-динамическое (МД) моделирование  $10^{10}$  атомов на десятках наносекунд не представляется возможным на современной вычислительной технике.

В результате работ, проведенных в рамках проекта РНФ, удалось нащупать пути обхода трудностей и понять механизмы, лежащие в основе процессов, инициированных УКЛИ в пятнах облучения предельно малого размера (порядка длины волны света). Часть этих результатов опубликована [1], часть выйдет из печати в январе 2015 [3] и готовится к публикации [4,6]. Одно упрощение было связано с разделением процесса отделения металлической пленки от подложки от процесса дальнейшего полета пленки. Дело в том, что скорость (десятки м/с), с которой летит пленка намного меньше скорости звука в конденсированных средах (несколько км/с). Тогда как деламинация пленки от подложки происходит за времена, определяемые акустическим масштабом времени. Акустический масштаб находится делением толщины пленки (до 100 нм) на скорость звука (получаются десятки пикосекунд), а время формирования нанобампа порядка времени пролета диаметра пятна облучения (не менее мкм) на скорость полета после деламинации (результат: десятки нс).

Большая разница во временах позволяет нам решать задачу деламинации отдельно от задачи полета пленки. При этом используются разные коды. Для описания деламинации применяется двухтемпературный гидродинамический код, а для

моделирования движения деляминирующей пленки используется производительный многопроцессорный (тысячи процессоров) алгоритм решения уравнений МД (вычисления выполнялись на суперкомпьютере Ломоносов). Двухтемпературная гидродинамика описывает сложную составную физику взаимодействия излучения с веществом и последующих явлений. А именно, (i) поглощение лазерного излучения в скин-слое, (ii) перенос тепла из кожи электронной теплопроводностью (в случае диэлектрической подложки, теплопроводность подложки не существенна на временах деляминации), (iii) двухтемпературную релаксацию, которая постепенно выравнивает локальные температуры электронной и ионной подсистем (изначально энергия поглощается электронами), (iv) плавление металла на двухтемпературной стадии, (v) игру гидродинамических волн в пленке и в подложке, (vi) возникновение растягивающих напряжений, и (vii) отрыв (деляминацию) пленки от подложки по поверхности их контакта.

Поскольку диаметр пятна (мкм) больше толщины пленки (меньше десятой от мкм), двухтемпературная гидродинамика используется в одномерном приближении. Это еще одно упрощение. Трехмерные эффекты учитываются путем вычисления скорости, с которой летит пленка после деляминации, как функции поглощенной поверхностной плотности энергии. Поглощенная энергия определяется профилем распределения интенсивности по фокальному пятну. Таким образом, профиль интенсивности пересчитывается в профиль скорости пленки. Затем с помощью МД решается трехмерная задача о движении пленки, постепенно формирующей нанобамп. Понятно, что форма бампа (выпучивания пленки) зависит от распределения интенсивности по пятну. Таким образом, можно создавать выпучивания самых разных геометрических форм.

В современной физике важной является проблема переноса данных, полученных в МД на атомарных масштабах, на мезоскопический масштаб и еще более крупные масштабы. В нашей проблеме желательно с помощью системы из уменьшенного числа атомов (до ста миллионов) описать движение, в которое включено порядка  $10^{10}$  атомов. Анализ задачи показывает, что это возможно с помощью преобразований скейлинга, которые будут дорабатываться на следующем этапе выполнения проекта. В результате уже проведенной за полгода участия в проекте работе впервые описаны механизмы формирования заострений на вершинах нанобампов [1,3].

Скажем коротко о приложениях технологий формирования одиночных трехмерных нанобампов или их массивов.

Деляминация используется при получении наночастиц контролируемого размера; в методиках laser induced forward transfer (LIFT) и laser induced backward transfer (LIBT), которые в свою очередь применяются в технологиях laser direct write, с помощью которых под контролем компьютера серийным образом изготавливают объемные шаблоны. Преимущества LIFT/LIBT связаны с применимостью к разным классам материалов от металлов до мягких сред (например, биоматериалы) при вариации оптической энергии. Эти технологии используются при лазерном печатании биосенсоров, а также пленочных транзисторов, и сборке других изделий микроэлектроники. Таким же способом изготавливаются квантовые точки. Посредством LIFT/LIBT переносят порошки и наночастицы.

Эксперименты с формированием нанобампов представлены в работах [7-9]. До сих пор не существовало их описания, опыты велись фактически вслепую, методом проб и ошибок. Наша работа позволяет, во-первых, понять причины, по которым формируется нанобамп, во-вторых, дает количественное описание, и, в-третьих, отсюда следуют рецепты управления. Например, путем регуляции темпа заморозки переходом к сплавам, или путем вариации толщины пленки и характеристик субстрата.

Проблема нанобампов привела к задаче о динамике тонкой пленки на подложке. За шесть месяцев выполнения проекта были выполнены детальные исследования пленок из золота и серебра на стеклянной подложке (пирекс). Перед началом численного двухтемпературного гидродинамического моделирования были разработаны двухтемпературные уравнения термодинамического состояния (УРС). О разработке двухтемпературного УРС золота будет сказано в п. 1.2 отчета. По этому поводу готовится публикация [5]. Анализ задачи позволил впервые получить полную классификацию режимов динамического поведения пленок на подложках. Хотя разлет свободновисящей (свободновисящей – обе границы свободные) пленки рассматривался ранее [10,11], но описания режимов динамического поведения в случае, когда у пленки одна граница свободна, а другая граница является контактом с диэлектрической средой, до сих пор не было. Между тем это важный случай, используя который можно генерировать ту или иную волну в подложке. Из анализа динамики пленки на подложке следуют дальнейшие (план на 2015 г.) предложения относительно использования таких пленок. То, что сделано в этом году, готовится к быстрой публикации в электронном журнале [6]. Затем будет подготовлена публикация для обычного журнала.

Другое направление исследований в отчетном году было связано с оптическими свойствами быстро нагретых тонких пленок на подложках. Была использована описанная выше модель двухтемпературного металла, к которой добавлена модель диэлектрической функции с учетом двухтемпературности (т.е. электронная температура может быть намного выше, чем температура ионной подсистемы). Здесь мы работаем в контакте с экспериментаторами, с целью использовать их измерения и наши расчеты для уточнения физики двухтемпературного состояния. Готовится соответствующая публикация. Продолжение этой работы входит в план на 2015 г.

Еще одно направление работы связано с измерениями и расчетами излучения металлов в двухтемпературном состоянии, публикация [2]. Двухтемпературные состояния готовились с помощью воздействия короткого (7 пс) лазерного импульса с мягким рентгеновским квантом (энергия кванта 89.3 эВ).

Публикации в рамках проекта РФФИ 14-19-01599

[1] Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, "Формирование наноразмерных струек и капель ультракоротким лазерным импульсом при фокусировке на дифракционном пределе", Письма ЖЭТФ Т. 93, В. 1, С. 6-12 (2014).

[2] M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, and M. Yamagiwa, «Very low electron temperature in warm dense matter formed by focused picosecond soft x-ray laser pulses,» J. Appl. Phys. V. 116, 183302 (2014).

[3] Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А., “Струеобразование при отрыве металлоиической пленки от подложки в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса,” готовится к печати (ЖЭТФ г., том 147, выпуск 1, стр. 20).

[4] 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. Pnitsky, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Tomita, T. Kawachi, “Three-dimensional hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse,” *Applied Physics B (sent to J.)*

[5] 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 a ultrashort laser pulse,” *Applied Physics B (sent to J.)*

[6] Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А., Хищенко К.В., Петров Ю.В., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., “Роль геометрических параметров при фемтосекундной лазерной абляции,” готовится к публикации в электронном журнале “Физико-химическая кинетика в газовой динамике” (2015).

#### Дополнительная литература

[7] C. Unger, J. Koch, L. Overmeyer, and B.N. Chichkov, “Time-resolved studies of femtosecond-laser induced melt dynamics,” *Optics Express* V. 20, N. 22, 24864 (2012).

[8] Y. Nakata, N. Miyanaga, and T. Okada, “Effect of pulse width and fluence of femtosecond laser on the size of nanobump array,” *Appl. Surf. Sci.* V. 253, P. 6555–6557 (2007).

[9] Емельянов В.И., Заярный Д.А., Ионин А.А., Киселева И.В., Кудряшов С.И., Макаров С.В., Нгуен Ч.Т.Х., Руденко А.А., «Наномасштабная гидродинамическая неустойчивость расплава при абляции тонкой пленки золота фемтосекундным лазерным импульсом,» *Письма ЖЭТФ* Т. 99, В. 9, С. 601-605 (2014).

[10] С.И. Анисимов, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, К. Нишихара, А.М. Опарин, Ю.В. Петров, «Разрушение твердой пленки в результате действия ультракороткого лазерного импульса,» *Письма ЖЭТФ* Т. 77, В. 11, С. 731-736 (2003).

[11] B.J. Demaske, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, I.I. Oleynik, «Ablation and spallation of gold films irradiated by ultrashort laser pulses,» *Phys. Rev. B* V. 82, 064113 (2010).