

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

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). Важной составляющей работы по гранту РФФИ 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.

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] (список наших статей, опубликованных в 2015 г., см. концовку этого файла). 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. Комбинированный алгоритм представляет собой алгоритм, составленный из молекулярно-динамического (МД) кода MPD<sup>3</sup> (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.

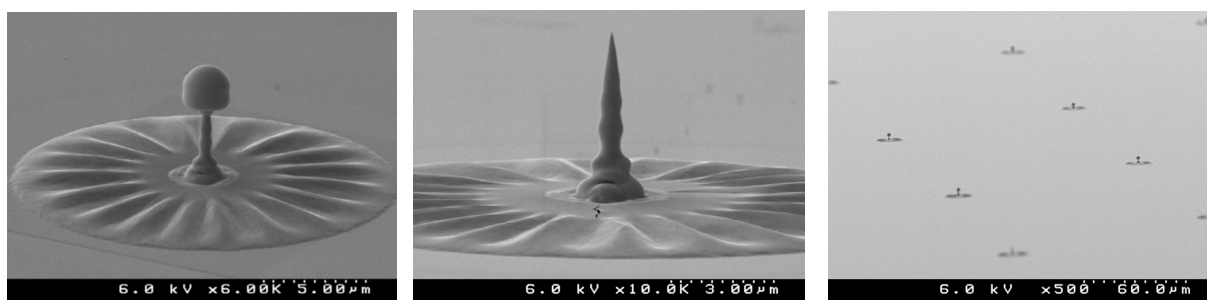


Рис.1. Примеры микробампов. Эти три рисунка взяты с сайта <https://simes.stanford.edu/events/mike-armstrong-simes-seminar/> Они представлены сотрудником ливерморской лаборатории Майком Армстронгом во время его выступления на семинаре 6-го февраля 2015 г, см. сайт. Армстронг (Mike Armstrong) – известный ученый в области сверхбыстрой физики и фемтосекундных лазеров. Аналогичные отдельно стоящие уединенные структуры или массивы из таких уединенных структур (правый рисунок) были созданы в работах (доп. лит. [1-8]).

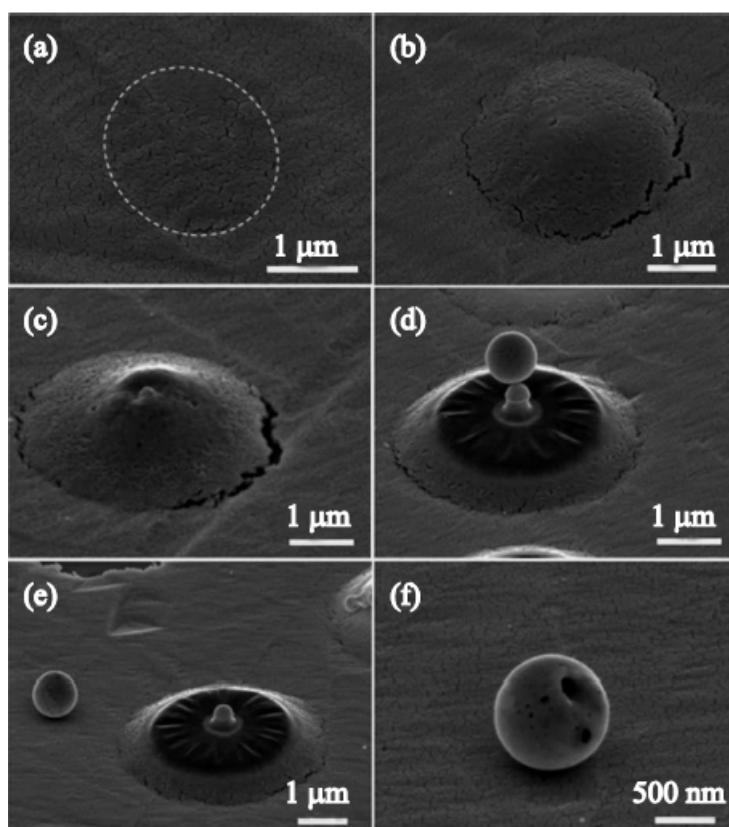


Рис.2. Микробамп и его субмикронные детали из статьи (доп. лит. [1]). Эксперименты такого рода выполняются в ФИАНе, ИТМО (Санкт-Петербург) и в Институте автоматизации и процессов управления ДВО РАН вместе с Дальневосточным федеральным университетом (см. доп. лит. [3,7,8]). Наш коллектив поддерживает контакт с этими лабораториями. Серия снимков получена после облучения острогофокусированным лазерным пучком на электронном микроскопе. Используется фемтосекундный лазер. Снимки (а, b, и т.д.) расположены в порядке возрастания энергии в пичке лазерного импульса. Радиус лазерного пучка при этом не меняется.

Отметим, что МД код MPD<sup>3</sup> (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, 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 РФФ, 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:

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

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 (Благодарность РФФ. Отправлено в редакцию)

N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Y.V. Petrov, V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, D.K. Ilnitsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, T. Kawachi, A.Y. Faenov, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eiyama, 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 (Благодарность РФФ. Отправлено в редакцию)

V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, D.K. Ilnitsky, K.P. Migdal, and V.V. Shepelev, "Film-substrate hydrodynamic interaction initiated by femtosecond laser irradiation," AIP Conference Proceedings (Благодарность РФФ. Принято в печать)

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. (Благодарность РФФ. Принято в печать)

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. (Благодарность РФФ. Отправлено в редакцию)

Приведем 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 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.

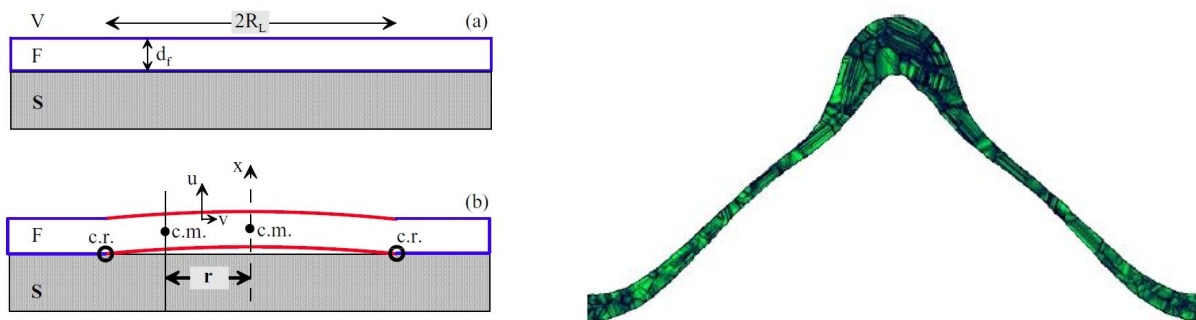


Рис.3. *Левая панель.* Схема моделирования. Имеется пленка F; в расчетах, выполненных в 2015 г., рассмотрена пленка из золота, как и в экспериментах в доп. лит. [1-8]. Пленка напылена на подложку S (Substrate); обычно стекло. Над пленкой F находится или воздух, или вакуум (V). Диаметр пятна нагрева обозначен  $2R_L$ . *Правая панель.* Финальная форма нанобампа при небольших энергиях лазерного пичка. Зеленый цвет соответствует кристаллу. Твердая оболочка сложена из множества нанокристаллитов. Отсюда черные полоски и клеточки, соответствующие дислокациям и доменным стенкам.

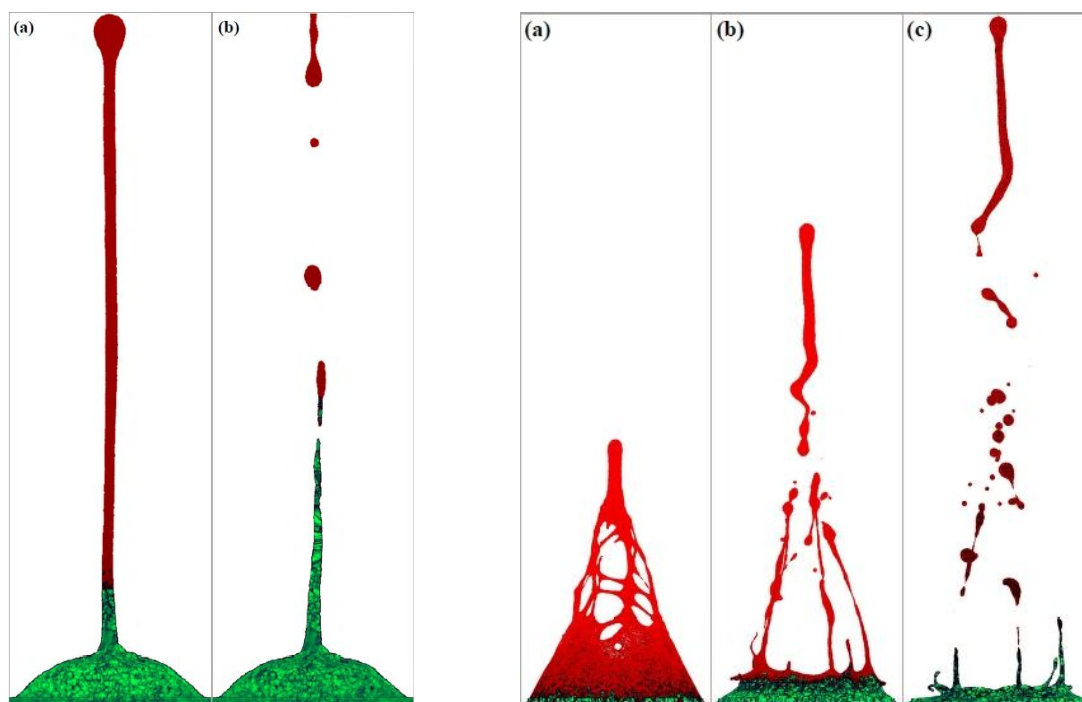


Рис.4. *Левая панель.* Вид сбоку на бамп. Увеличение энергии пичка (по сравнению с рис.3, правая панель) приводит к формированию заостренных образований на вершине бампа, сравни с рис. 1 и 2. Именно механизм их появления был неясен до наших исследований. Теперь можно четко сказать, дело тут в комбинированном действии поверхностного натяжения и быстрой рекристаллизации расплава. Зеленый цвет – поликристаллическое твердое тело, красный цвет – жидкая фаза. Время возрастает слева направо. *Правая панель.* Еще большее увеличение энергии приводит уже к разрушению самой оболочки бампа. На рис. 3 (правая панель) показан вид сбоку на сечение оболочки плоскостью, проходящей через ось симметрии.

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 успевает 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). 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 (2T) случай (2T-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.

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 (доплит. [12]) для представления одноэлектронных волновых орбиталей - решений уравнения Кона-Шэма с функционалом обменно-корреляционного взаимодействия PBE (доплит. [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 (доплит. [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 (доплит. [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. (доплит. [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 (доплит. [16]). В результате проведённого двухтемпературного гидродинамического расчёта для медной нанофольги с параметрами, соответствующими экспериментальным (доплит. [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 (доп.лит. 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 (доп.лит. [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

nanofilm, 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. Ilnit'sky, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, D.V. Knyazev, P.R. Levashov.

На рис. 5 (левая панель) показано влияние сжатия и нагрева электронной подсистемы на электронный вклад в давление (наши публ. за 2015 г. [7]). Расчет коэффициента теплопроводности с помощью QMD методики и формулы Кубо-Гринвуда представлен на правой панели рисунка 5.

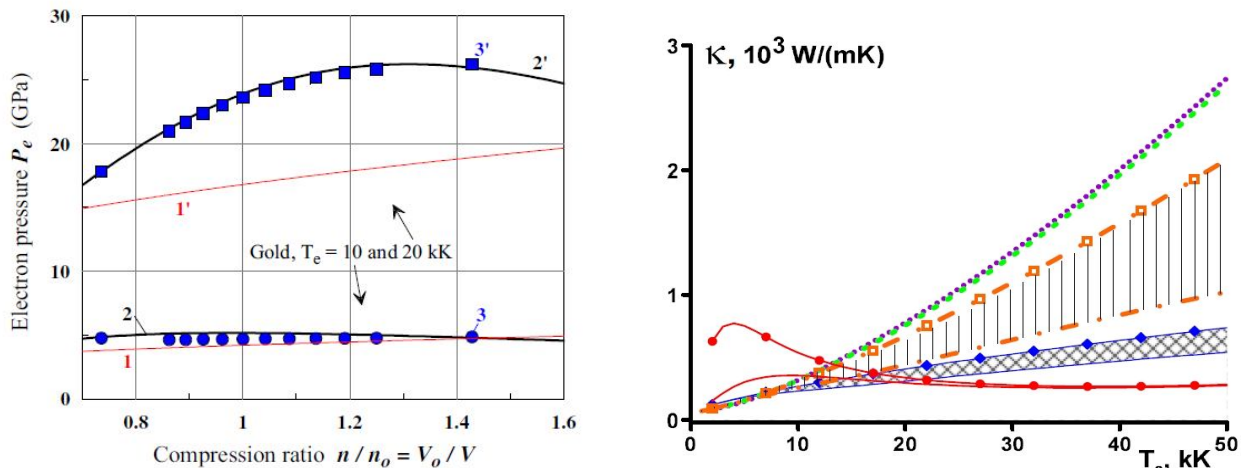


Рис.5. *Левая панель.* Зависимость электронного вклада в давление золота от плотности при двух значениях электронной температуры  $T_e$  (вверху - для  $T_e = 20$  кК, внизу - для  $T_e = 10$  кК). Квадратами и кружками показаны результаты DFT расчетов, сплошными черными линиями - их аппроксимации аналитическими выражениями, сплошными красными - результаты расчетов по модели свободных электронов. Видно, что для золота с ростом температуры модель свободных электронов хуже описывает вклад электронных возбуждений в термодинамические функции металла (публ. за 2015 г. [7]). *Правая панель.* Теплопроводность меди в двухтемпературных состояниях при плотности  $8 \text{ г/см}^3$ . По горизонтальной оси отложена электронная температура. Сплошная синяя кривая с синими ромбами относится к полноэлектронному расчету с помощью пакета *elk*. Коррекция на возможное влияние учета/не учета электрон-электронных столкновений заштрихована косой серой клеткой. Как видим, для полноэлектронного расчета эта коррекция мала. Для оценки данной коррекции использована программа решения кинетического уравнения, первая версия которой была описана в статье Иногамова и Петрова в ЖЭТФ, т. 137(3), 505-529 (2010). Псевдопотенциальные вычисления дают значительно более высокие значения теплопроводности: данные VASP LDA и PBE с *xc*-функционалом показаны пурпурной и зеленой кривыми, выполненными точками. Псевдопотенциальные вычисления ABINIT с PBE *xc*-функционалом показаны в виде оранжевой штриховой кривой с квадратиками на ней. Вертикальная штриховка показывает, как изменяться эти значения, если учесть коррекцию на электрон-электронные столкновения. С коррекцией

псевдопотенциальные результаты оказываются близки к полноэлектронным результатам. Видимо, именно последние относятся к наиболее точным. Это положение требует дальнейшей доработки. Результаты простейшей, широко используемой феноменологической модели для ионных температур 1000 (красная кривая с кружочками) и 5000 К (красная кривая) представлены красными кривыми.

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 РНФ, см. в конце файла).

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 РНФ, см. в конце файла). 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] (публ. 2015) представляется существенной. Стандартный канал сближения температур  $T_e$  и  $T_i$  связан с черенковским излучением фоонов 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 (публ. 2015 г. [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). 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.

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 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.

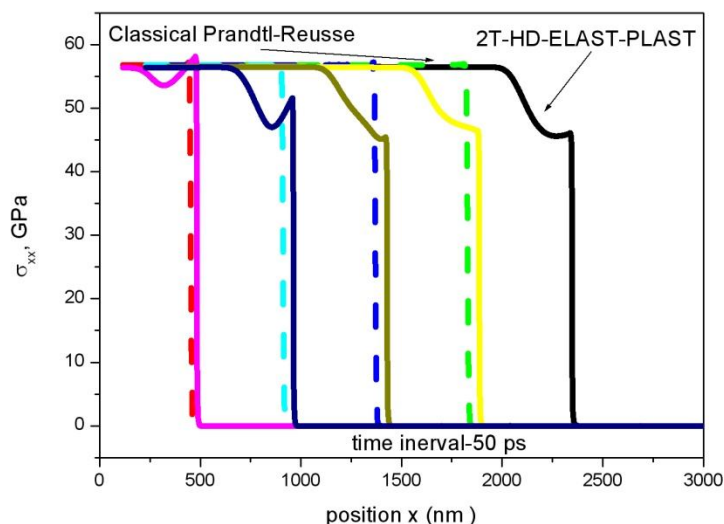


Рис.6. Формирование упругого предвестника перед пластической волной в новой дислокационной модели, соответствующие профили показаны сплошными кривыми. Профили, которые получаются в классической модели Прандтля-Рейса, изображены штриховыми кривыми.

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.

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. На полупространство воздействует ультракороткий лазерный импульс. Если распределение поглощенной лазерной энергии однородно по горизонтальной оси  $y$  на рис. 7, то задача является одномерной по оси  $x$ . В обратном случае необходимо решать неоднородную задачу.

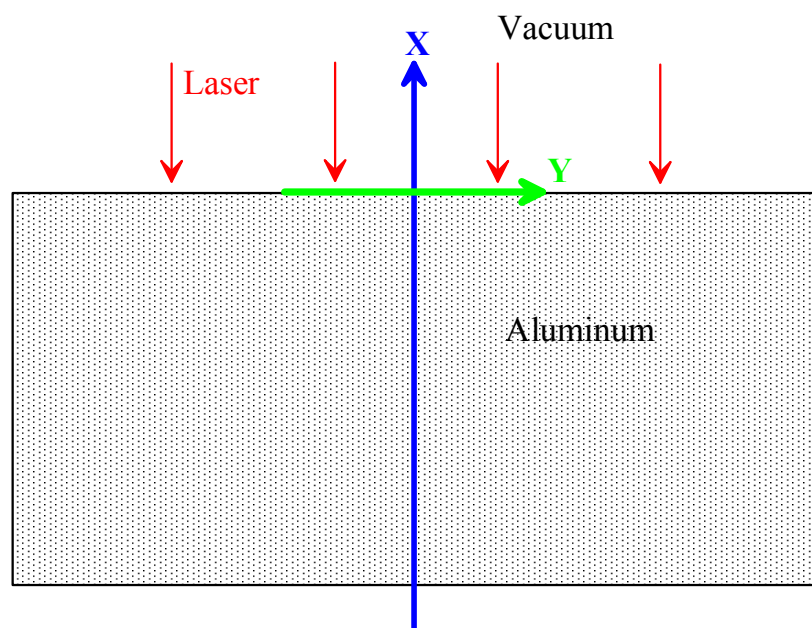


Рис.7. Постановка задачи о неоднородном воздействии лазерного импульса на мишень. Либо учитывается конечный размер пятна освещения по горизонтали, либо имеется модуляция освещения вдоль оси  $y$ .

Пусть на полупространство  $x < 0$ , занятое алюминием, см. рис. 7, воздействует лазерный импульс. Плоскость  $x=0$  соответствует границе полупространства. Уравнение энергии имеет вид

$$(1) \quad \rho \frac{dE}{dt} = \sigma_{ij} \nabla_i u_j + F,$$

где  $F$  – мощность тепловыделения на единицу объема. В случае с периодической модуляцией она равна

$$(2) \quad F = \frac{2}{\pi} \frac{F_{abs}}{t_{eq} d_T} \exp(-t^2 / t_{eq}^2) \exp(-x^2 / d_T^2) \theta(-x) [1 + \varepsilon \cos(g y)],$$

где  $F_{abs}$  – поглощенная энергия в расчете на единицу площади поверхности мишени,  $t_{eq}$  – время выравнивания электронной и ионной температур,  $d_T$  – толщина слоя прогрева, созданного во время быстрого распространения тепла на двухтемпературной стадии,  $\varepsilon$  – амплитуда модуляции,  $g$  – волновое число модуляции поглощенной энергии. Пример расчета с периодической модуляцией показан на рис. 8. Моделирование отклика вещества на импульс объемного 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. Объемное энерговыделение от внешнего источника (лазер) учитывалось как источниковый член в приведенном выше уравнении 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.

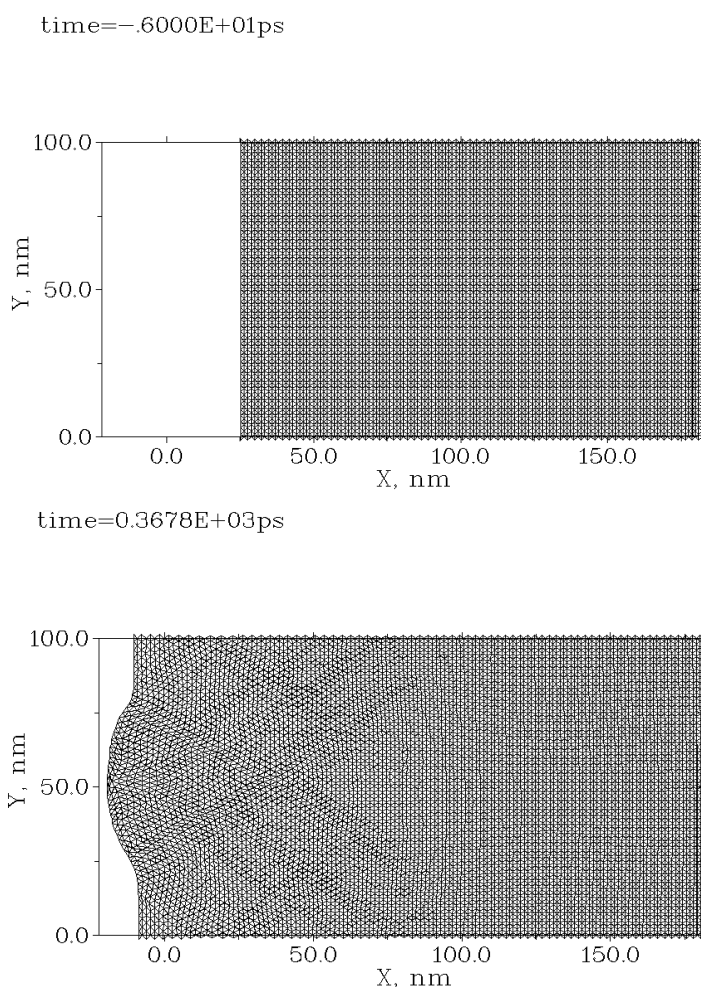


Рис.8. Пример расчета реакции алюминиевой мишени на периодически неоднородное лазерное воздействие. Показан один полный период задачи, которая решалась с периодическими граничными условиями на верхней и нижней границах. Слева - начальное состояние.

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. Металл заполняет полупространство справа на рис. 9. Мишень из металла прикрыта пластиной из диэлектрика. В расчете на рис. 9 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 рассматривается случай, когда пятно освещения имеет конечный размер. Пока результаты не доведены до уровня публикации.

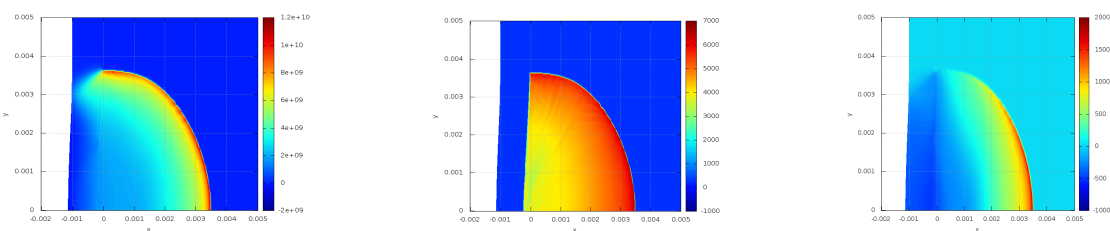


Рис. 9. Пятно освещения имеет конечный размер. Задача симметрична относительно нижней горизонтальной оси. Поэтому показана половина области. До прихода лазерного импульса граница между алюминием справа и стеклянным слоем располагалась вертикально и имела координату 0 по горизонтальной оси. Слева от этой границы находилась стеклянная пластина, а справа металл. *Левая панель.* Распределение давления. Ударная волна распространяется в металл. Ударная волна в стекле слабее из-за разности импедансов и влияние волн разрежения от контакта и от границы с вакуумом. *Средняя панель.* Распределение температуры. Напомним, в данном расчете теплопроводностью и поглощением света в стекле пренебрегаем. *Правая панель.* Распределение нормальной к первоначальной границе раздела компоненты скорости. Красные тона относятся к скоростям, которые направлены направо, синие – налево.

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.

За отчетный период закончены подготовительные мероприятия по задачам 5 и 6. Разработана сферически симметричная версия двухтемпературной гидродинамической программы. Подготовлены цилиндрический и сферический варианты МД кода. Подготовлен ЕАМ (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. ЕАМ 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. Предполагалось, что лазерный прогрев происходит мгновенно и температура успевает 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.

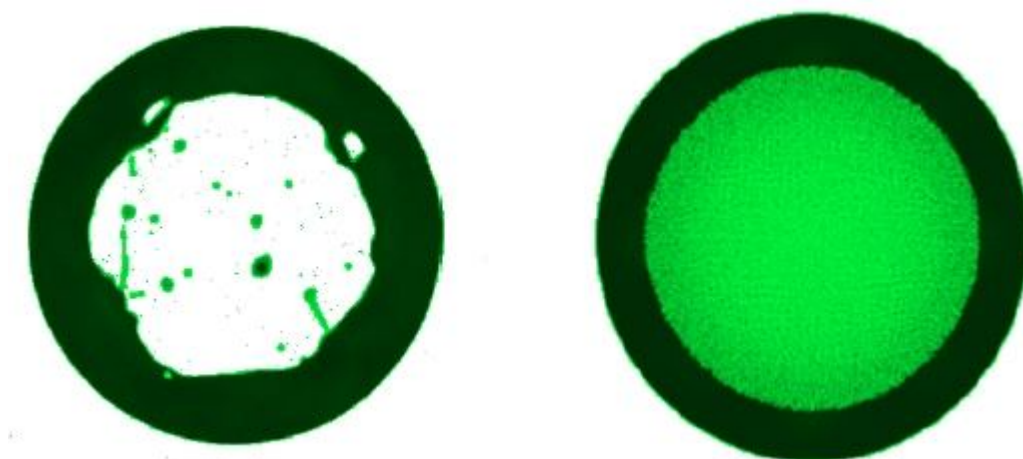


Рис.10. Распределение массы при расширении однородно-прогретого оловянного цилиндра до давления 5.5 ГПа моделируемого МД (слева) и SPH (справа) методами. Как в атомистическом, так и в гидродинамическом расчете в результате схождения волны разгрузки к центру образовалась центральная область кавитации с последующим формированием пузыря, окруженного плотной жидкой оболочкой. Начальный радиус в МД расчете был 100 нм, а в SPH расчете 10 микрон.

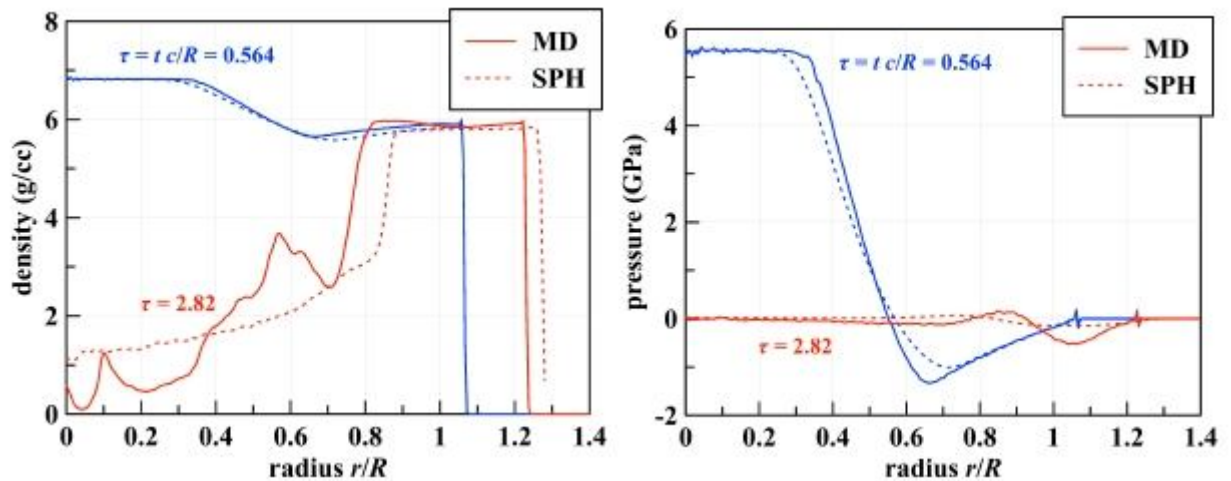


Рис.11. Подобие профилей плотности и давления расширяющегося цилиндра, моделируемого MD и SPH методами. Шкала времени была нормирована на время прохождения звука до центра.

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 спиnodальную линию (спиnodальная 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). Будет разработан новый EAM (Embedded Atom Model) потенциал железа. MD 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 использоваться в качестве условий подгонки. Кроме того, в базу данных будут входить такие экспериментальные величины как упругие постоянные, энергия связи кристалла, и энергия образования вакансии.

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-волнового 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 (ЕАМ). Это многочастичным потенциал. Многочастичность необходима для моделирования металлической связи. Первое поколение ЕАМ 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 ЕАМ 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 первопринципным 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 ЕАМ потенциал для железа с помощью метода подгонки напряжений (Zhakhovsky:2016, Ashitkov:2016); см. в конце данного абзаца. Этот метод имеет целью конструирование ЕАМ 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 РФФИ. 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 РФФИ. 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 образования 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  $\partial c_0 / \partial V = \partial^2 p_{\alpha\alpha} / \partial V^2 > 0$ , 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, EAM потенциал Менделеева нельзя применять при давлениях, превышающих 100 ГПа, как это видно из рис. 12.

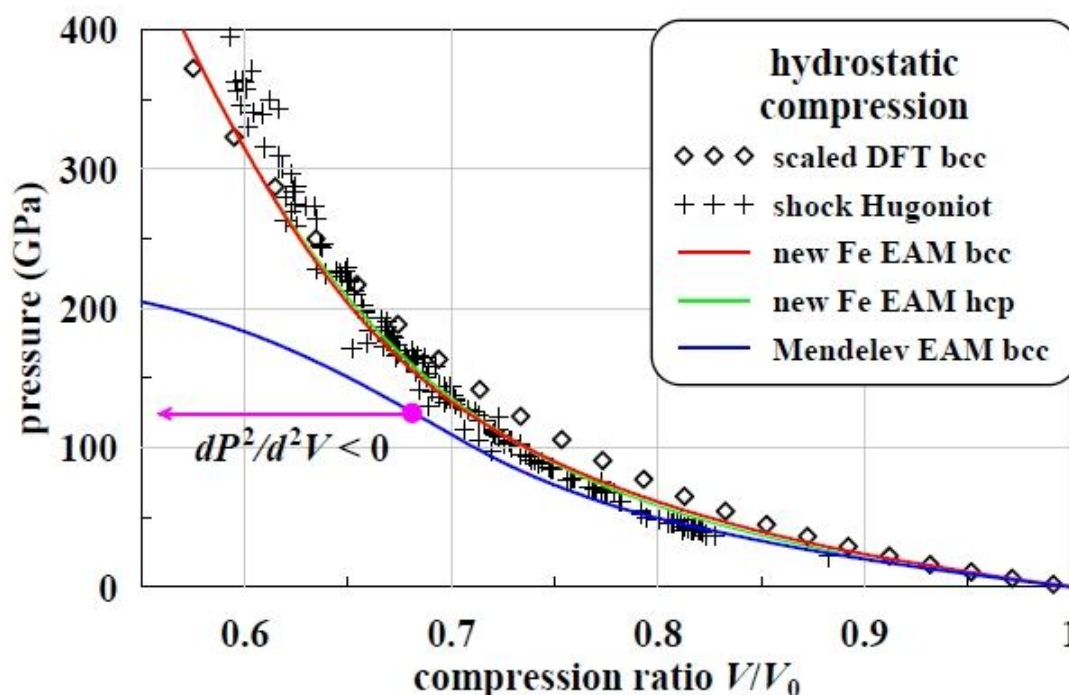


Рис.12. Холодные кривые при однородном гидростатическом сжатии железа. DFT данные по ОЦК решетке не использовались для подгонки потенциала выше фазового перехода при 14.26 ГПа. Кружок указывает позицию, где холодное давление полученное из потенциала Менделеева имеет перегиб, после которого скорость звука падает со сжатием. Для сравнения представлено множество независимых экспериментальных данных по ударному сжатию железа (Shock wave database: <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/>).

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. Это условие следует из известной экспериментальной фазовой диаграммы железа, где равновесная ГЦК фаза существует только при высоких температурах.

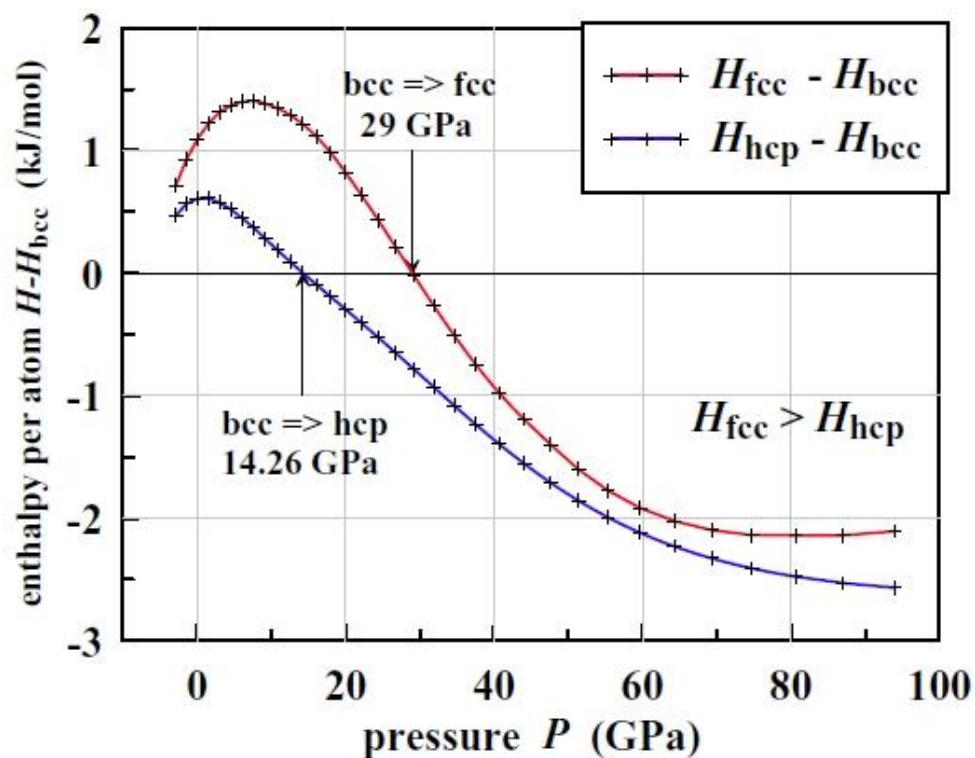


Рис.13. Энтальпии ГПУ и ГЦК решеток по отношению к энтальпии ОЦК решетки при холодном объемном сжатии рассчитанном новым ЕАМ потенциалом железа. Стрелки указывают на фазовые переходы, используемые в подгоночной базе данных. Также на подгоночную процедуру наложено условие  $H_{fcc} > H_{hcp}$ , запрещающее переход между ГПУ и ГЦК решетками при давлениях до 400 ГПа.

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 EAM потенциалом приведены на рисунках 12, 14 и 15. 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.

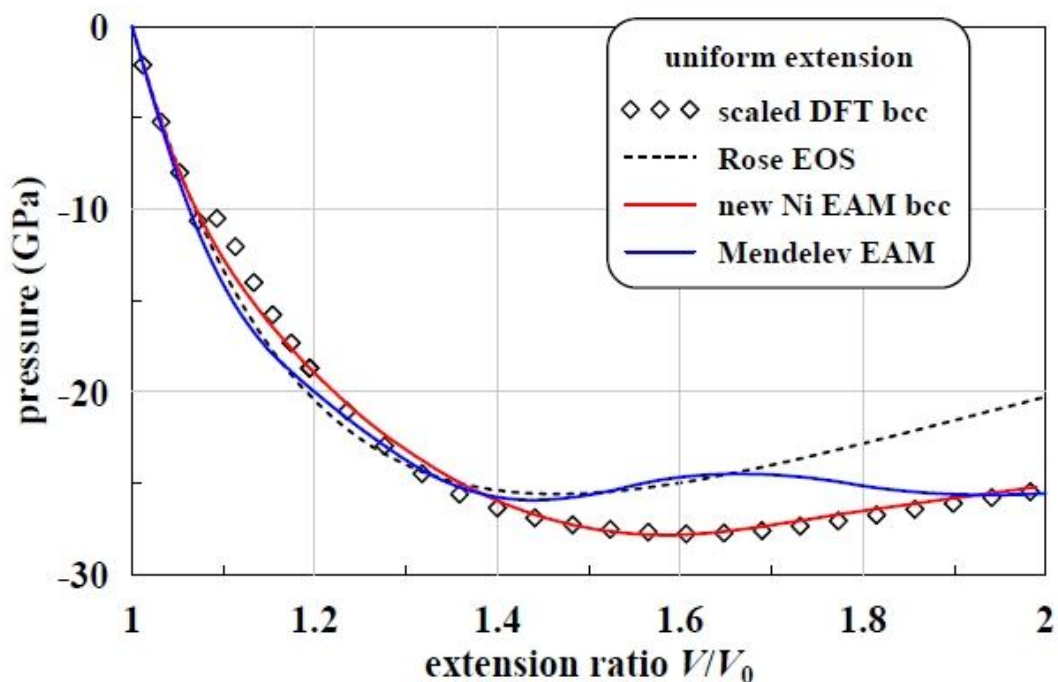


Рис.14. Холодные кривые при однородном гидростатическом растяжении железа. Штриховая линия соответствует эмпирическому УрС Rose.

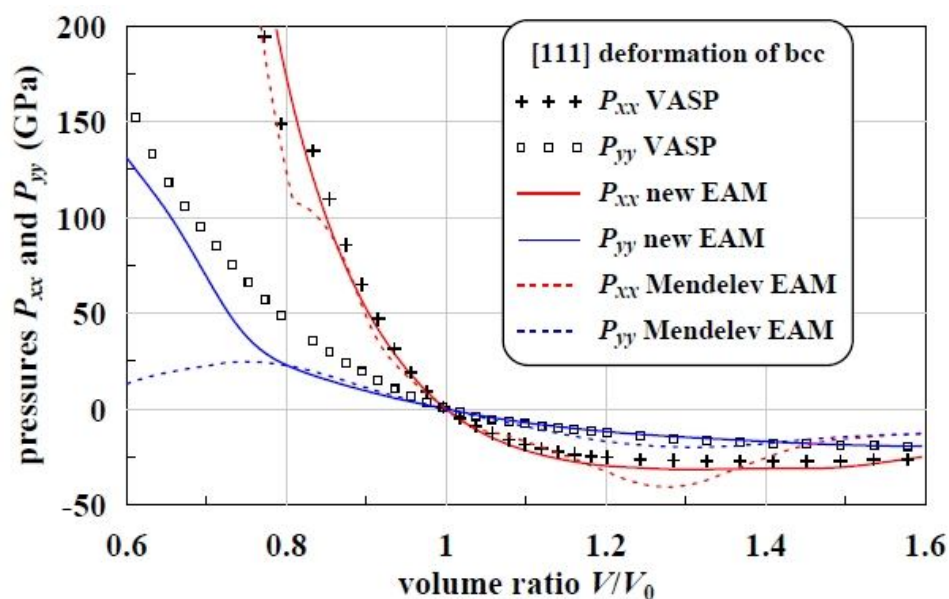


Рис.15. Компоненты тензора давлений  $P_{\alpha\beta}(V/V_0)$ , вычисленные с помощью нового EAM потенциала, и результаты DFT VASP расчетов совершенной ОЦК решетки железа под действием одноосной [111] деформации.

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 14 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. 16.

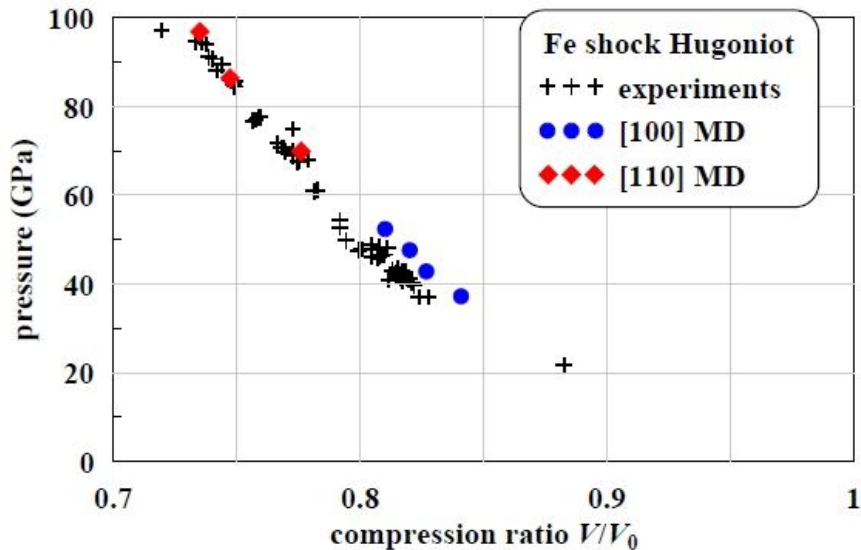


Рис.16. MW-MD моделирование УВ в монокристаллах железа, описываемого новым ЕАМ потенциалом. Черные крестики показывают множество независимых экспериментальных данных по ударному сжатию железа из базы данных (Shock wave database: <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/>). Расчетная ударная адиабата в [100] направлении кристалла лежит немного выше экспериментальных данных, полученных на образцах поликристаллического железа.

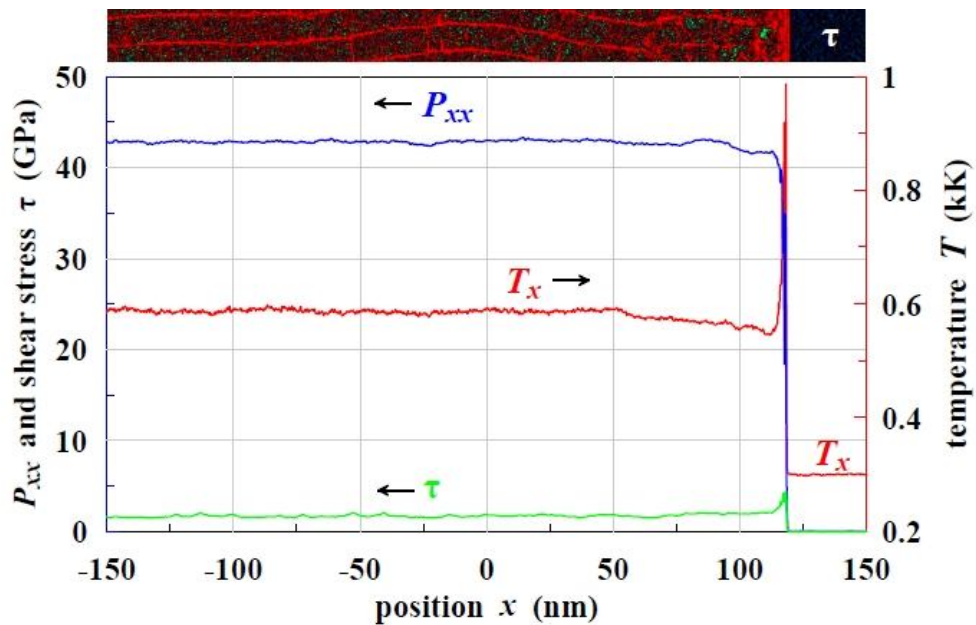


Рис.17. Расчетные профили продольного давления  $P_{xx}$ , сдвигового напряжения  $\tau$  и продольной температуры  $T_x$  в УВ со скоростью 5.6 км/с в образце железа ориентированного по оси [100] ОЦК монокристалла железа, моделируемого новым ЕАМ потенциалом. Вверху показана карта распределения сдвигового напряжения  $\tau(x,y)$ , указывающая на то, что после ударного фронта монокристалл разделился на зерна. Из анализа распределения параметров порядка следует, что в зернах железо находится в ГПУ фазе.

Рисунок 17 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 18 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.

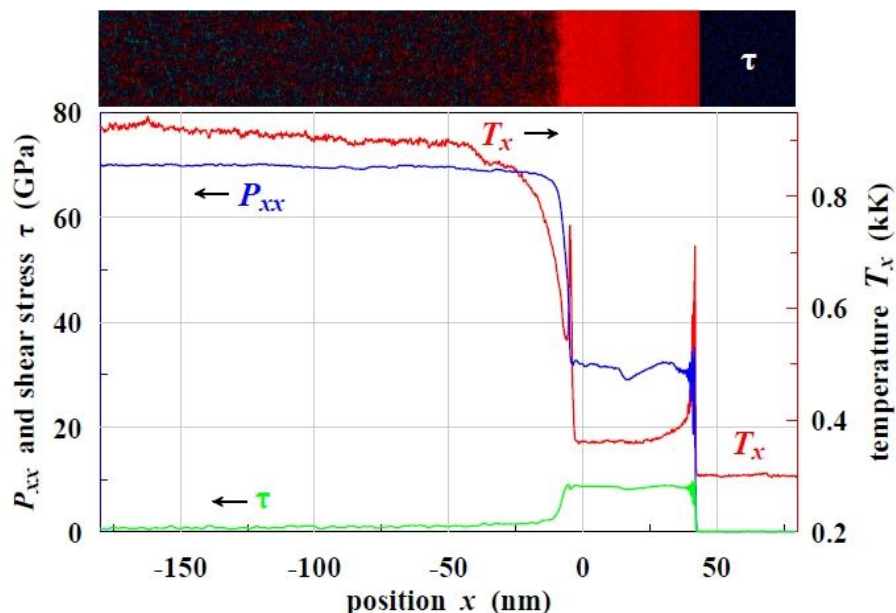


Рис.18. Структура стационарной двухзонной УВ, движущейся как единый профиль со скоростью 6.5 км/с в образце железа, ориентированного по оси [110] ОЦК железа. УВ состоит из упругой зоны, в котором кристалл остается в одноосном сжатом метастабильном состоянии, и пластического ударного фронта, в котором происходят совместно пластические трансформации и фазовый переход в ГПУ фазу. Вверху показана карта распределения сдвигового напряжения  $\tau(x,y)$ , указывающая на то, что при таком совместном переходе крупных зерен, как на рис. 15 не образуется.

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). 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.

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. Эйлеровы 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 расчетной 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. 17. Аналогичное образование струй наблюдается в ГД моделировании методом SPH, показанному на рис. 18. 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.

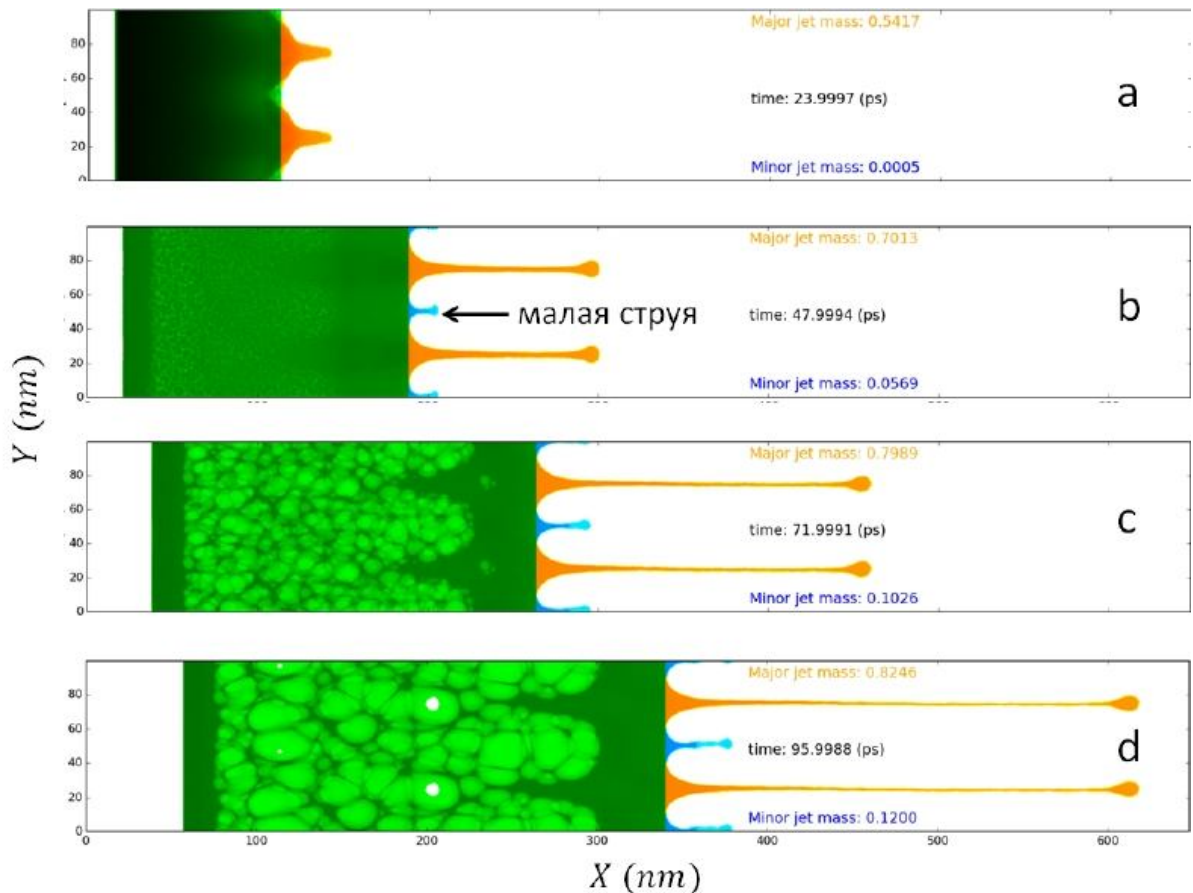


Рис.19. Моделирование пыления поверхности медного образца с возмущением в виде пилообразного выреза с углом  $\alpha = \pi/2$  при ударе о поршень со скоростью  $v_p = 3$  км/с. В этом случае ударная волна плавящая, возникает малая струя (b), а в головной части главной струи формируется капля за счет поверхностного натяжения.

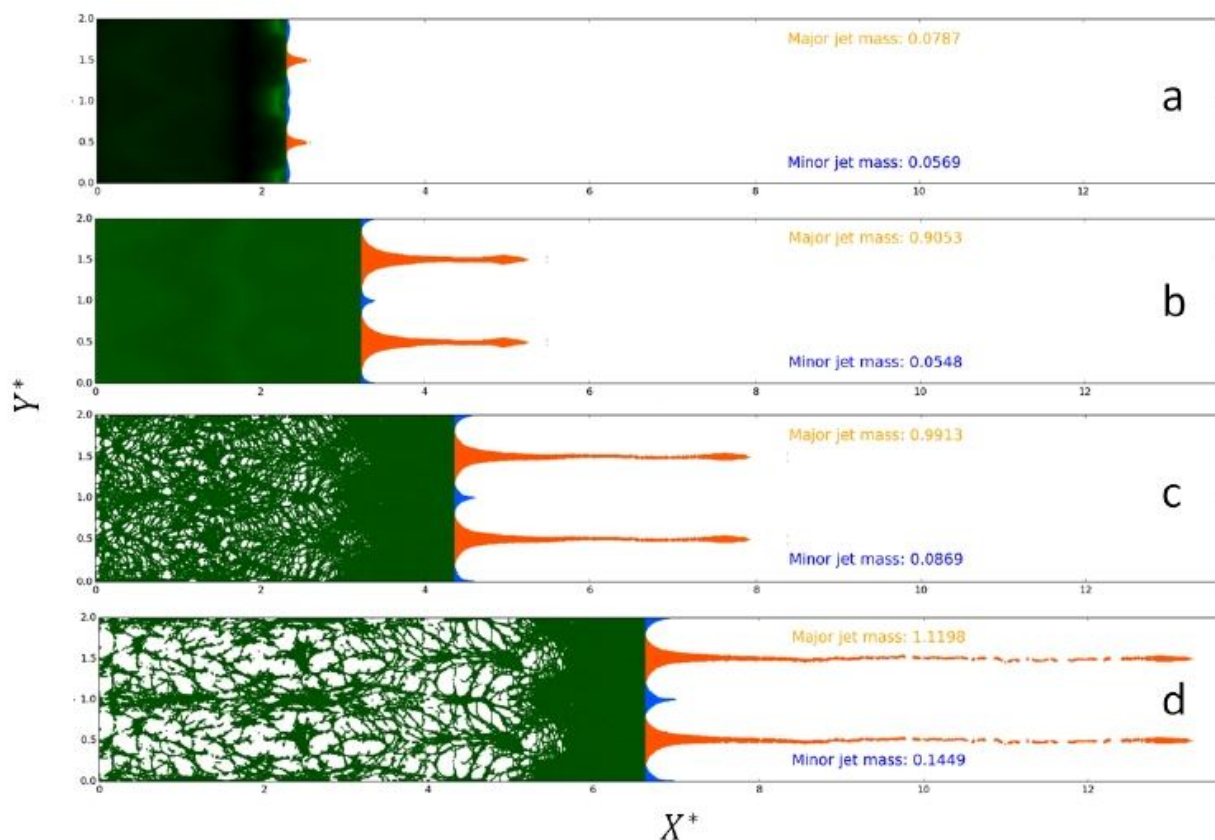


Рис.20. Расчет образца из меди при скорости удара  $v_p = 3$  км/с. Аналогично MD расчетам, возникает вторая струя, но капля в головной части основной струи не образуется, имеется лишь некоторое утолщение.

## 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. 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. 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)

### **Дополнительная литература**

[1] 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)

[2] Chen, L., Zhai, T., Zhang, X., Unger, C., Koch, J., Chichkov, B.N., Klar, P.J., "Polarization-dependent SERS effects of laser-generated sub-100 nm antenna structures," Nanotechnology 25, 265302 (2014)

- [3] Kuchmizhak, A.A., Gurbatov, S., Vitrik, O., Kulchin, Y., "Plasmon mode excitation and photoluminescence enhancement on silver Nanoring," *Opt. Comm.* 356, 1-6 (2015)
- [4] 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).
- [5] Nakata, Y., Matsuba, Y., Miyanaga, N., "Sub-micron period metal lattices fabricated by interfering ultraviolet femtosecond laser Processing," In: [www.cola2015.org](http://www.cola2015.org), PROGRAM HANDBOOK, COLA 2015, International Conference on Laser Ablation 2015, Cairns, Australia (2015)
- [6] Nakata, Y., Hiromoto, T., Miyanaga, N., "Mesoscopic nanomaterials generated by interfering femtosecond laser processing," *Appl. Phys. A* 101, 471 (2010)
- [7] Ivanov, K.A., Brantov, A.V., Kudryashov, S.I., Makarov, S.V., Gozhev, D.A., Volkov, R.V., Ionin, A.A., Bychenkov, V.Y., Savel'ev, A.B., "Enhanced relativistic laser-plasma coupling utilizing laser-induced micromodified target," *Laser Phys. Lett.* 12, 046005 (2015)
- [8] Zayarny, D.A., Ionin, A.A., Kiseleva, I.V., Kudryashov, S.I., Makarov, S.V., Rudenko, A.A., Timkin, I.A., Khmel'nitskii, R.A., Nguen, C.T.K., "Surface enhanced infrared absorption of a dye on a metallic diffraction grating," *JETP Lett.* 100(5), 295-298 (2014)
- [9] Zhakhovskii, V., Nishihara, K., Fukuda, Y., Shimojo, S., Akiyama, T., Miyanaga, S., Sone, H., Kobayashi, H., Ito, E., Seo, Y., Tamura, M., Ueshima, Y., "A new dynamical domain decomposition method for parallel molecular dynamics simulation," *IEEE Proceeding of the 5<sup>th</sup> International Symposium on Cluster Computing and Grid (CCGrid 2005)* 2, 848-854 (2005)
- [10] Kresse, G. et al, "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set," *Comput. Mater. Science*, v. 6, p. 15 (1996)
- [11] Kresse, G. et al, *Phys. Rev. B*, "From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method," v. 59, p. 1758 (1999)
- [12] Blochl, P.E, *Phys Rev B*, "Projector augmented-wave method," v. 50, 17953 (1994)

- [13] Perdew, J.P et al, Phys Rev Lett., "Generalized Gradient Approximation Made Simple," v. 77, 36865 (1996)
- [14] Petrov, Yu. V. et al, JETP Lett. "Thermal Conductivity and the Electron-Ion Heat Transfer Coefficient in Condensed Media with a Strongly Excited Electron Subsystem," v. 97, p. 20 (2013)
- [15] Norman, G. et al., "Atomistic Modelling and Simulation of Warm Dense Matter. Conductivity and Reflectivity," Contrib. to Plasma Phys. v. 53 (4-5), p. 300 (2013)
- [16] Cho, B.I. et al, Phys. Rev. Lett. "Electronic Structure of Warm Dense Copper Studied by Ultrafast X-Ray Absorption Spectroscopy," v. 106, 167601 (2011)
- [17] Gonze, X. et al, "ABINIT: first-principles approach to material and nanosystem properties," Computer Physics Communications, v. 180, p. 2582 (2009)
- [18] Bottin, F. et al, "Large scale ab initio calculations based on three levels of parallelization," Comput. Mat. Science, v. 42, p. 329 (2008)
- [19] Elk is an all-electron full-potential linearised augmented-planewave (FP-LAPW) code released under either the GNU General Public License (GPL) or the GNU Lesser General Public License (LGPL). Elk code is available on <http://elk.sourceforge.net>
- [20] Knyazev, D.V. et al, "Transport and optical properties of warm dense aluminum in the two regime: Ab initio calculation and semiempirical approximation," Phys. Plasmas, v. 21, 073302 (2014)