

# Отчеты за 2018-й год по гранту РФФИ номер 14-19-01599 (продленный)

## и итоговый отчет по этому гранту за два года продления

### Отчет за 2018-й год

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

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

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

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

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

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

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

За 2018-й год участники коллектива приняли участие в 11 международных конференциях, и представили 3 приглашенных, 15 устных и 3 постерных докладов по тематике проекта РНФ.

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

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

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

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

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

опубликованы в статьях [8,9], см. п. 1.7 ниже, там приведен список публикаций, включенных в отчет РФФ за 2018-й г. Эти результаты вошли в годовой отчет РФФ по проекту за 2018-й год. Они показаны на рис. 2 к разделу 1.3.

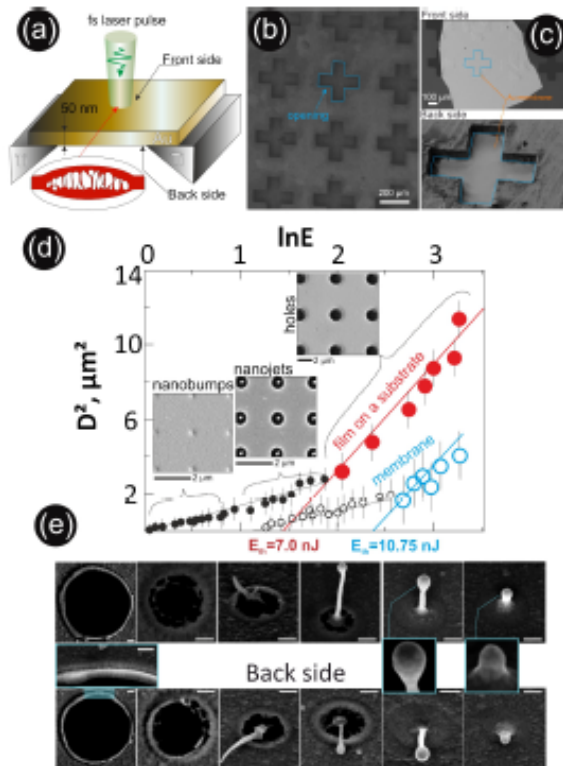


FIG. 1. Experimental observation of the Au membrane rupture. (a) Schematic representation of the considered experimental geometry. (b) Normal-view SEM image of the titanium mesh used to support an Au membrane. (c) SEM images of the Au membrane coated above the Ti mesh and viewed from its front and bottom sides. A single cross-shaped opening is highlighted in all SEM images. (d) Squared lateral diameter of the laser-induced modification  $D^2$  produced on the surface of 50-nm thick glass-supported Au film (solid markers) and a free-standing Au membrane of the same thickness (hollow markers) versus the natural logarithm of the incident pulse energy  $\ln(E)$ . Bigger colored markers denote to the through holes for both datasets. Three inset SEM images show typical types of the surface modifications (nanobumps, nanojets and through holes) produced on the surface of a 50-nm thick Au film supported by a silica glass substrate at various applied pulse energies. (e) Series of SEM images of the surface modification produced on the front and back sides of the free-standing Au membrane under single-pulse irradiation. The pulse energy gradually increases from left to right. The scale bar corresponds to 200 nm.

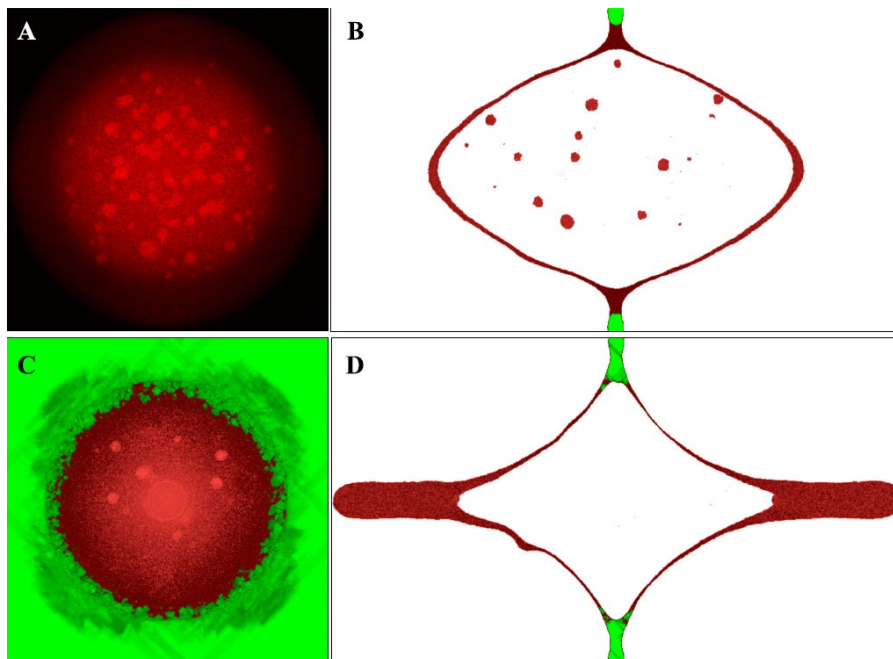


Рис. 1 к разделу 1.3. Схема опытов. Фотографии титановой пластины с отверстиями в виде креста. На эти отверстия натянута ультратонкая пленка Au.

Рис. 2 к разделу 1.3. Результаты крупномасштабного численного моделирования согласно физической модели воздействия лазерного импульса на свободновисящую пленку, см. [8,9], п.1.7.

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

Зеленым цветом показана затвердевшая фаза, красным – расплав. Фронт кристаллизации движется по половинкам пленки по направлению к оси – к центру. Постепенное замораживание пленки (происходит на наносекундных масштабах времени) связано с отводом тепла из горячего пятна, нагретого лазером, на холодную периферию пленки. Возникает сложнейшая картина, в которой жидкая фаза кристаллизуется и теряет свою

растяжимость, а еще жидкая пленка продолжает участвовать в капиллярно-инерционном движении под действием сил инерции и поверхностного натяжения. Чрезвычайно интересной является поликристаллическая фаза, в которую переходит затвердевшая пленка. Кристаллиты имеют форму уплощенных сильно вытянутых в радиальном направлении пластинок, см. [8,9] в п.1.7 отчета. Такого же рода кристаллиты наблюдались в опытах, см. рис. 4 в статье [10] в списке доп.лит. к разделу 1.3.

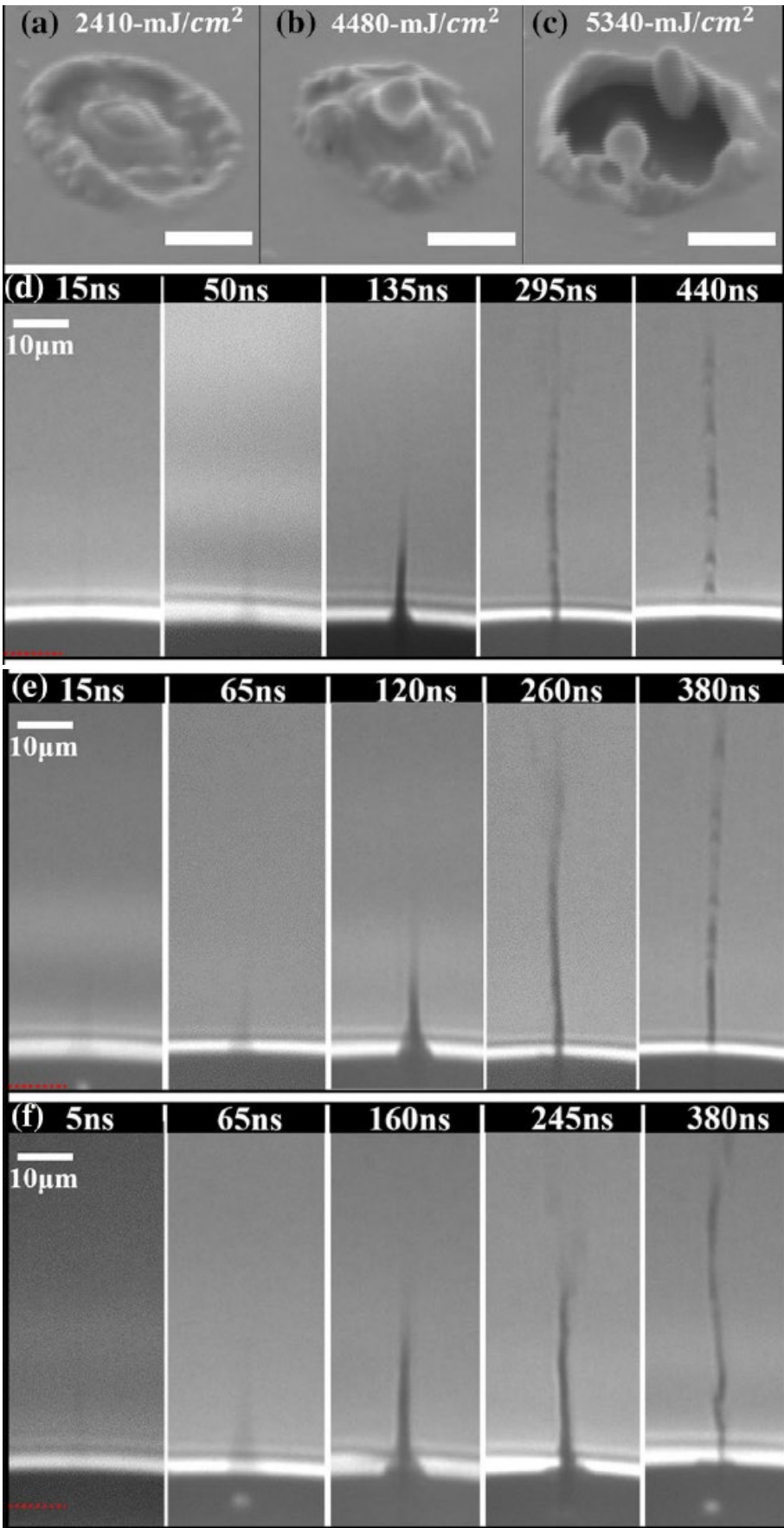
В работе [11] в п.1.7 был детально изучен случай достаточно толстых пленок. Поясним, чем толстые пленки отличаются от тонких. Речь идет о воздействии ультракороткого импульса, т.е. лазерного импульса фемтосекундной – пикосекундной длительности (от 10 фс до 1 пс). В тонкой пленке с толщиной сопоставимой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

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

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

между веществом подложки и жидкостью: и те, и те принимают и тормозят разлет продуктов абляции.

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





**Fig. 3 a–c** SEM images of residuals left on 620-nm Cu donor films. Scale bars 2- $\mu\text{m}$ . **d–f** Time-resolved shadowgraphy of the jetting behaviors. Red dash lines point at the interface of the donor film and the air. Different laser fluence of the second pulse: 2410, 4480 and 5340  $\text{mJ}/\text{cm}^2$  have been applied correspondingly

*Рис. 3 и 4 к разделу 1.3. Здесь скопирован рисунок 3 из статьи [12] в списке дополнительной литературы к разделу 1.3 отчета. Под рисунками приведена подпись, взятая из статьи.*

На рисунках 3 и 4 к разд.1.3 показаны три варианта воздействия на расплавленную пленку меди с относительно (1) малым, (2) средним и (3) большим вложением энергии  $F_{\text{abs}}$ . Вложениям 1, 2 и 3 соответствуют рисунки a, b, c. В первых двух на поверхности остается куполообразное формирование. На рис. (c) в пленке остается сквозное отверстие. При этом во всех трех случаях из пленки вылетает струя, примеры a, b, c:

a  $\rightarrow$  d, b  $\rightarrow$  e, c  $\rightarrow$  f

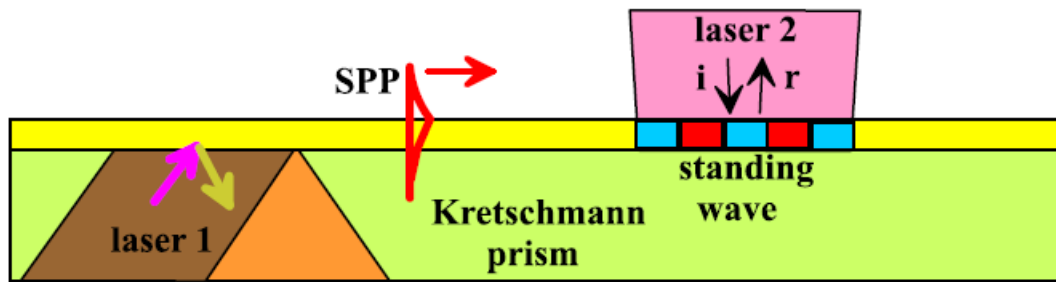
Из-за намного большей толщины пленки и намного большего вложения энергии в опытах [11,12] (доп.лит к 1.3) (по сравнению с ситуациями рассмотренными в [1-9] в доп.лит. к 1.3) вылетают гораздо более крупные капли, чем в [1-9]; хотя пятно воздействия примерно такое же, как в [1-9], фокусировка на дифракционном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

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

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

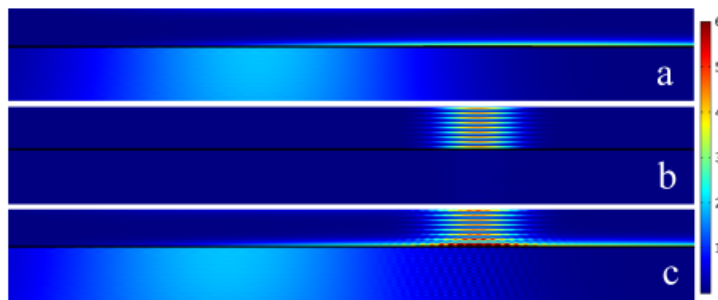
Создана программа расчета поглощения излучения, диссипативного нагрева и внесения углового момента в скин-слой облучаемого металла под действием вихревого пучка. Она необходима для моделирования структуры последующего течения.

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



**Figure 1.** Generation scheme of nanostructured piece of a film with using plasmon-assisted management of dissipative spots location. The upper part of the Kretschmann prism with the gold film is shown. Laser 1 excites a surface plasmon polariton (SPP) wave. The SPP achieves the illuminated spot 2 where SPP together with laser beam 2 produces the standing wave. The standing wave generates the sequence of hot and cold intervals in the film. This sequence imprints into a final surface nanostructure.

*Рис. 5 к разделу 1.3. Схема генерации стоячей волны, см. пояснения в тексте.*



**Figure 2.** a) Intensity distribution of electric field for the Gaussian beam 1 (see figure 1) illuminating a film from the substrate (optically dense fused silica) side. The incident angle  $\alpha = 44.8^\circ$  corresponds to excitation of surface plasmon in the Kretschmann configuration. Electromagnetic field of the beam 1 is p-polarized. In this case a surface plasmon polariton (SPP) is excited at the upper boundary of a film shown in figure 1. The beam 1 is seen as the rather wide vertical light strip at the bottom left half of the substrate. The dark thin horizontal strip is the gold film dividing silica below and vacuum above. The bright thin strip above the film relates to averaged intensity of SPP propagating to the right side. Brightness and width in  $y$ -direction of this strip increases as it crosses the exciting beam 1, and after crossing the brightness and width remain constant at the considered distance. b) Distribution of intensity of electric field in the case of the beam 2 from figure 1. The beam comes normally from vacuum side. It is polarized in the plane of this figure. For the considered wavelength 785 nm the reflection coefficient of gold is high. Therefore the interference of incident and reflected waves produces a chain of bright horizontal intervals. Horizontal width of the intervals is defined by Gaussian beam width. Vertical distance between two successive intervals is  $\lambda_L/2$ . c) Time averaged intensity distribution if both laser beams 1 and 2 are present. The cases with beam 1 and beam 2 are shown in the above two panels separately. Now the SPP propagating from the spot 1 in figure 1 interferes with incident and reflected waves of the beam 2. The interference results in the standing wave with hot spots in its antinodes. These hot intervals are well seen as the bottom sequence of the short red intervals. Length of these intervals equals to the SPP wavelength. Dissipation in the skin layer of the film follows this sequence of the bottom red intervals. Thus the hot rectangles shown in figure 1 are produced. The color bar with arbitrary units is the same for all three panels (a), (b), and (c).

*Рис. 6 к разделу 1.3. Показаны три панели (a), (b) и (c) расположенные сверху вниз друг над другом.*

(a) Интенсивность электромагнитного поля (ЭМ) лазерного пучка «laser 1» с рис. 5/разд.1.3 выше и поверхностной плазмон-поляритонной (ППП) моды, возбужденной в пленке золота и бегущей направо из пятна освещения лазером 1 на нижней поверхности пленки. Черная тонкая полоска – это пленка золота. И диаметр пятна освещения, и длины ЭМ и ППП волн намного больше толщины пленки, которая порядка толщины скин-слоя. Снизу под пленкой находится вещество стекла призмы. Пучок лазера 1 идет через стекло к пленке золота. Пучок падает под резонансным углом и возбуждает бегущую ППП волну. Пучок лазера 1 на рисунке (a)

представляет собой светлую область под пленкой слева на удлиненной по горизонтальному направлению панели рисунка (а). Квадрат амплитуды ППП волны визуально проявляет себя как светлая полоска над пленкой. Эта полоска появляется и усиливается над пятном освещения лазером 1. При распространении направо ППП волна постепенно затухает. Но в масштабе, выбранном по горизонту на данной панели, это затухание незаметно. Ширина полоски вверх над пленкой порядка длины волны. Под полоской интенсивность ППП волны невелика и при выбранной палитре окраски (соответствие цвет - интенсивность) ППП волна под полоской золотой пленки незаметна. Палитра цветов приведена в виде вертикальной полоски справа.

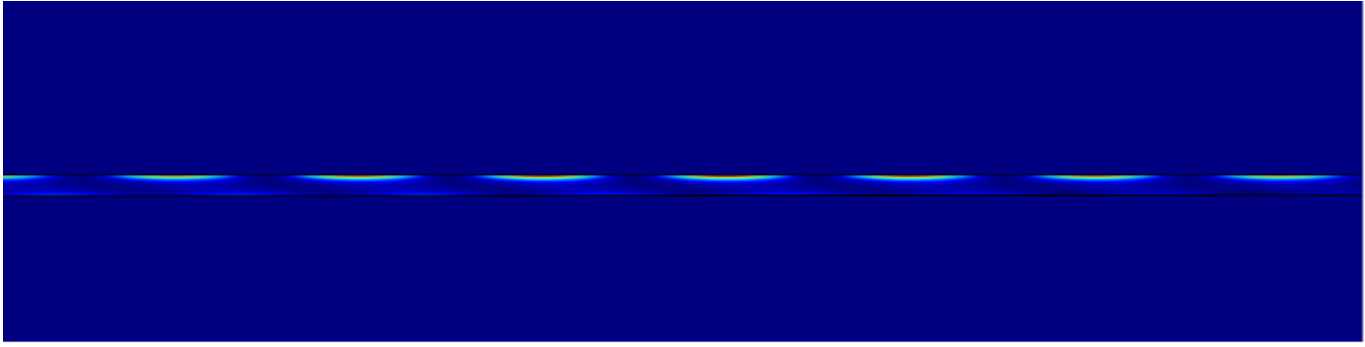
(б) Интенсивность второго лазерного пучка, который идет через газ сверху и освещает верхнюю поверхность пленки из золота. Этот пучок обозначен как «laser 2» на рис. 5/1.3. См. текст.

(с) Усредненная по времени интенсивность суммарного ЭМ поля, состоящего из четырех вкладов: (I) поле падающей волны лазера 1, (II) бегущая ППП волна, (III) падающая волна лазера 2 и (IV) отраженная волна лазера 2. В результате сложения волн II, III и IV формируется стоячая волна на поверхности пленки. Она проявляет себя как череда черных (холодных) и красных (горячих) малых отрезков на пятне освещения пучком лазера 2. Длина отрезка порядка длины волны. На горячих отрезках в скин-слое пленки золота диссипирует гораздо большая мощность на единицу площади поверхности, чем на холодных отрезках.

На рис. 5/1.3 показана схема опыта/постановка задачи. Лазерный пучок расщепляется делителем (находится вне схемы на рис. 5/1.3) на два пучка, один из которых проходит через стекло призмы Кречманна (laser 1 на рис. 5/1.3). Второй пучок освещает пленку сверху (laser 2 на рис. 5/1.3). Так достигается синхронизация во времени короткоимпульсных пучков лазеров 1 и 2, см. статьи 5-7 в списке литературы к п. 1.7. Пятна освещения 1 и 2 разнесены на пленке. Расстояние между пятнами не слишком велико, чтобы поверхностная плазмон-поляритонная (ППП) волна, выбегающая из пятна лазера 1, не затухла до того, как она достигнет пятна 2, см. рис. 6/1.3 (а).

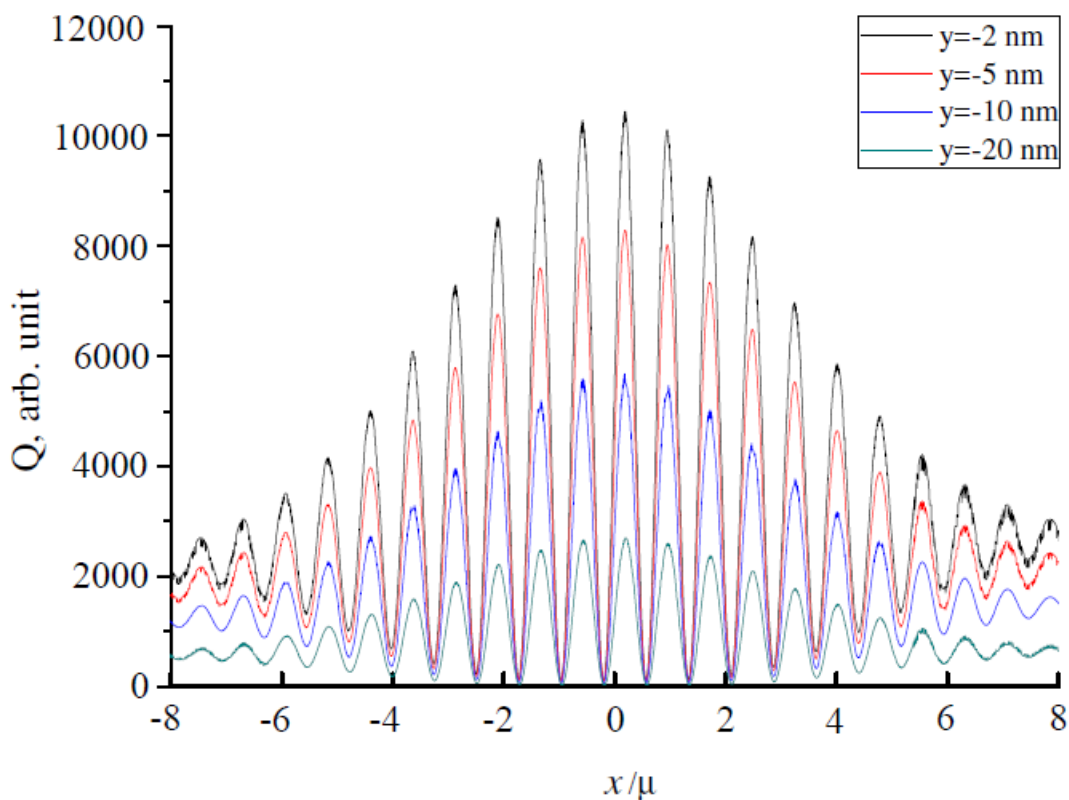
На рис. 6/1.3 представлены три панели (а), (б) и (с). На первой из них (а) показано распределение интенсивности электромагнитных (ЭМ) волн (лазера и ППП) от лазера 1, см. развернутую подпись к рис. 6/1.3 (а). На средней панели (б) показано поле лазера 2. Наконец на нижней панели рис. 6/1.3 (с) приведено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

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



**Figure 5.** Spatial distribution of electromagnetic heating power inside the gold film placed the top of fused silica substrate, vacuum is above. The distribution corresponds to conditions described in text. The scheme of illumination by beams 1 and 2 is shown in figure 2. The vertical axis of the beam 2 is placed in the middle of this frame. The SPP wavelength is  $\lambda_{\text{spp}} = 768$  nm while thickness of the film 80 nm is ten times less. The more intense dissipation occurs in skin layers near the upper and bottom boundaries. Notice the horizontal shift of the maximum of dissipation between the upper and the bottom boundaries.

*Рис. 7 к разделу 1.3. Электродинамический расчет мощности на единицу объема пленки за счет диссипации энергии комбинации электромагнитных (ЭМ) и поверхностных плазмон-поляритонных (ППП) волн в скин-слое пленки. Как сказано выше, см. также рис. 6/1.3 (с), указанная комбинация приводит к формированию стоячей волны. Поле диссипации устроено сложно. Если при падении плоской ЭМ волны на объемный металл мощность джоулева нагрева затухает экспоненциально в толщину металла на толщине скин-слоя, то здесь ситуация не тривиальная. Из-за того, что пленка имеет конечную толщину и из-за того, что ЭМ поле неоднородно вдоль поверхности пленки, возникают приповерхностные пятна нагрева (горячие отрезки, см. рис. 6/1.3 (с)) и пятна на тыльной стороне пленки (т.е. на стороне, которая прилегает к стеклу призмы). Причем тыльные пятна смещены относительно фронтальных. Тыльной называем поверхность пленки, прилегающую к стеклу. Фронтальная поверхность граничит с газом. Она освещается лазером 2, см. рисунки 5 и 6/1.3.*



**Figure 6.** Variation of absorbed power inside the metal film along the horizontal direction  $x$  at different levels  $y$ . The level  $y = 0$  corresponds to the vacuum–film contact where the maximum power is achieved. These functions are obtained by cutting of the distribution shown in figure 5 along the horizontal  $y$ -levels. The short spatial scale modulation corresponds to the SPP wavelength  $\lambda_{\text{spp}} = 768$  nm, while the long distance modulation is caused by the e-fold radius of the Gaussian beam 2 (see figure 2).

*Рис. 8 к разделу 1.3. Здесь представлены оцифровки распределения мощности  $Q$  на единицу объема золота внутри пленки. Это распределение показано на рис. 7/1.3. Координата  $y$  отсчитывается от фронтальной границы пленки.*

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

Что такое акустический масштаб времени? За это время звук пробегает по толщине пленки от одной границы пленки до другой границы. Это время равно  $t_s = d/c_s$ , где  $d$  – толщина пленки ( $f$ -film) 80 нм,  $c_s$  – скорость звука в золоте – примерно 3 км/с, соответственно  $t_s$  около 30 пс. За время порядка 30 пс температура пленки не успевает

выровняться по длине модуляции около 1 мкм, см. рис. 8/1.3. Время выравнивания по длине модуляции  $\lambda$  порядка  $(\lambda/2)^2/4\chi \sim 1$  нс, здесь  $\chi$  – это коэффициент температуропроводности расплавленного золота.

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

На этих же временах происходит охлаждение пятна нагрева лазером 2 на рисунках 5 и 6/1.3 (с) за счет вывода тепла из пятна нагрева на холодную периферию пленки. Гофрированная поверхность ре-кристаллизуется и останавливается – голограмма изготовлена. Описанию совместного решения электродинамической, гидродинамической и теплофизической задач с фазовыми переходами (плавление, кристаллизация) и динамикой деформируемого твердого тела посвящены статьи [4-6] из списка в разделе 1.7.

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

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

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

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

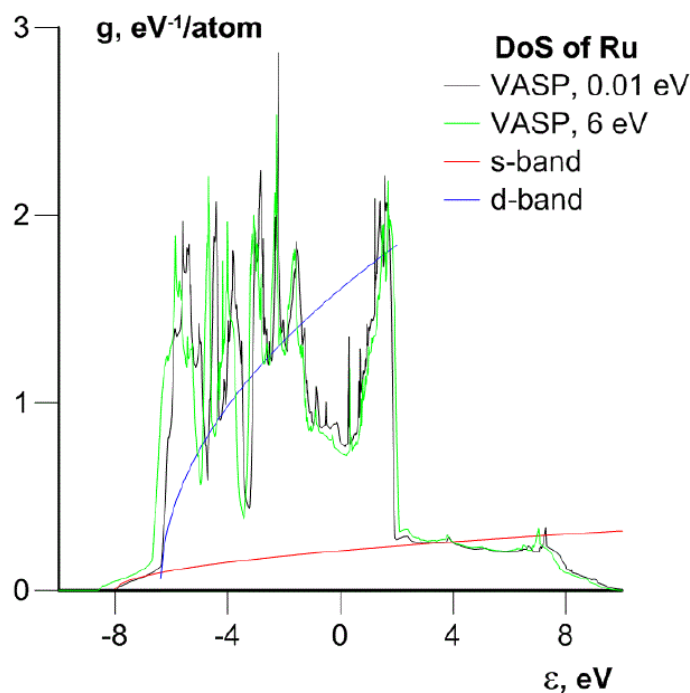


Figure 5. Density of states of ruthenium. Dependence on the electron temperature  $T_e$  isn't so significant. Parabolic approximations of s- and d-bands are shown.

Рис. 9 к разделу 1.3. Электронный спектр рутения для двух значений электронной температуры. Показана также аппроксимация s- и d-зон рутения параболлами. Вычисление спектра выполнено с помощью теории функционала плотности (DFT - density functional theory) с применением пакета VASP (The Vienna Ab initio simulation package), см. [15]/раздел 1.7- это список опубликованных статей, поддержанных грантом РФФ.

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

Рутений важный материал в технологиях, связанных с применением мягкого рентгена в промышленности. Это тугоплавкий ( $T_m=2607$  К) химически весьма инертный металл. Используется в рентгеновских зеркалах косо го падения или как защитная пленка, прикрывающая многослойные зеркала. Такие зеркала входят в оптические системы фотолитографических машин будущего, работающих на вакуумном ультрафиолете/мягком рентгене (энергия фотона 90 эВ, длина волны 13.5 нм). Пленка предохраняет зеркала от повреждения интенсивными продолжительными

радиационными потоками и от загрязнения потоками нейтралов и ионов, идущими от плазменного источника излучения, см. также ниже пункт ((5)) отчета, посвященный лазерному дроблению микрокапель олова в источнике излучения для фотолитографии.

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

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

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

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

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

В работе по проекту решена проблема фрагментирования микро-капли первым лазером. Это важно, поскольку для оптимизации работы источника необходимо знать параметры облака и составляющих его нанокapель. Результаты представлены в статье [1], процитированной в списке работ в п. 1.7, входящих в отчет по проекту. Распространение



волн сжатия и разрежения, растяжение жидкого олова в волнах разрежения, и кавитация в растянутом веществе показаны на примере расчета на рис. 10/к разд. 1.3.

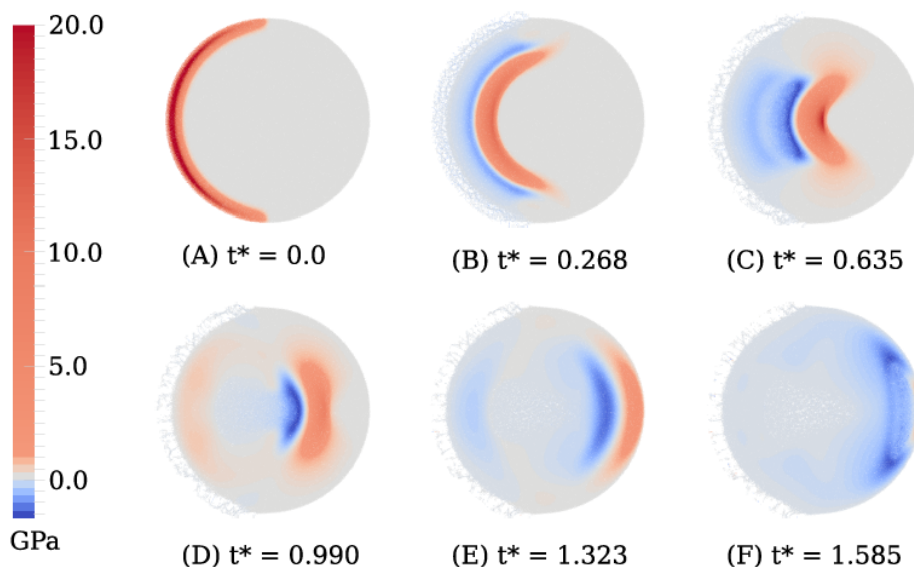


Figure 6. Pressure maps at successive instants of time ( $t^* = ct/R$ ): (A) the initial shape of the pressure pulse (maximum amplitude at the frontal focus, minimum amplitude near the equator); (B) the decrease in the amplitude of the pressure pulse and its broadening during its propagation into the droplet; (C) the growth of the amplitude of the compression and stretching waves due to the focusing effect, the formation of cavitation bubbles in the center of the droplet; (D) the decrease in the amplitude of the compression wave after passing through the center of the droplet, further formation of cavitation bubbles; (E) the amplitude of the tensile stresses becomes less in absolute value than the spall strength of tin, the formation of cavitation bubbles at the center of the droplet stops; (F) the formation of a spall at the posterior pole of the droplet. The laser pulse propagates from left to right.

Рис. 10 к разделу 1.3. Лазер облучает левую полусферу микро-капли (момент времени 0). Диаметр капли намного больше длины волны лазера. Поэтому при расчете используются приближение геометрической оптики и формулы Френеля. Облучение вызывает формирование полусферической волны сжатия (розоватые тона). За сжатием следует разрежение (голубоватые области). Волны сжатия и разрежения усиливаются к центру из-за фокусировки на центр. Далее волны сжатия и растяжения проходят центр и следуют на тыльную сторону капли. Имеет место сильная кавитация в центральной области и на тыльной стороне. Рисунок взят из статьи [1] к п.1.7 отчета.

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

описание сложнейшего иерархического процесса лазерного дробления микро-капли. Наглядное представление можно получить, просматривая киноматериалы, приложенные к работе [1]/п. 1.7.

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

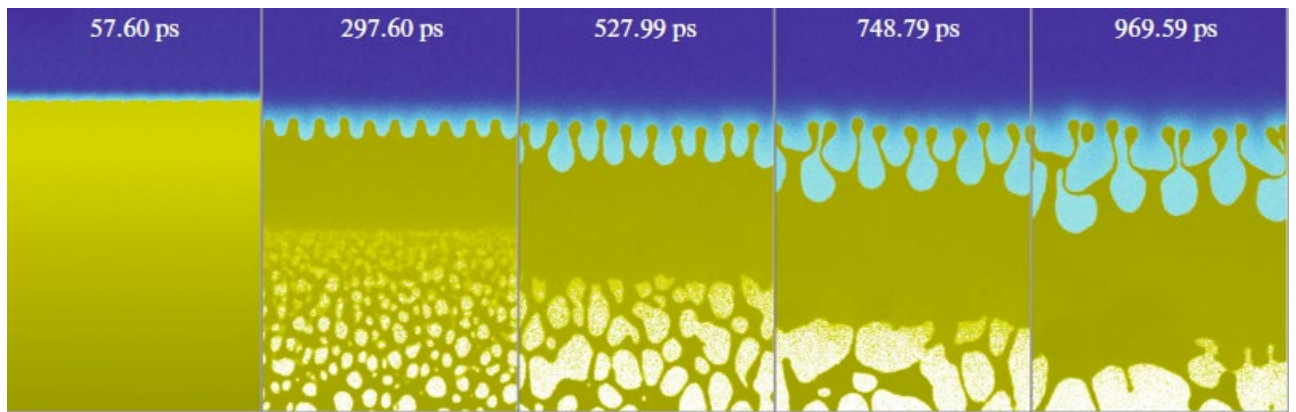
За отчетный период выполнена очень большая работа по анализу лазерной абляции в жидкость. Это важная фундаментальная и технологическая задача. В фундаментальном плане задача интересна тем, что принципиально отличается от абляции в газ или вакуум. Приложения в технологиях подробно описаны в недавних обширных обзорах [18,19] (список доп.лит.к разделу 1.3). Приложений много, они в фотонике, химиндустрии (катализ), медицине (доставка лекарств), энергетике, экологии и т.д. До сих пор имеются в основном экспериментальные данные по синтезу коллоидных растворов наночастиц путем абляции в жидкости.

Выполнены крупномасштабные молекулярно-динамические (МД) и гидродинамические (2Т-гд) расчеты. Для таких расчетов разработан потенциал взаимодействия частиц воды, см. сайт <https://www.researchgate.net/project/Development-of-interatomic-EAM-potentials>.

2Т-гд код дополнен алгоритмами, позволяющими учесть теплопроводность воды.

Используется широкомасштабное уравнение состояния золота, полученное от наших коллег в ИВТАНе, лаборатория К.В. Хищенко [20-22], см. доп.лит.в конце раздела 1.3. Для воды сначала применялась политропная зависимость  $p(\rho)$ , в качестве которой мы брали адиабату Гюгонио воды по данным [22]/1.3. В настоящее время мы перешли к использованию уравнения состояния в форме Ми-Грюнайзена согласно работе [23]/1.3. Это позволяет описать переход в слое горячей воды (у контакта между газообразным золотом и водой) от ударно сжатого состояния к двухфазному состоянию пар-жидкость под бинодалью воды.

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



**Fig. 31.** (Color online) Amplification of Rayleigh–Taylor perturbations because of the deceleration of atmosphere by the water pressure. Gold is yellow water is blue. Water changes its color from dark blue to light blue because of strong heating near the gold–water boundary. A separated gold droplet is visible in the last frame. This is one of the mechanisms of nanoparticle formation during ablation into liquid.

*Рис. 11 к разделу 1.3. Рисунок перенесен из статьи [10] в списке публикаций, которые входят в отчет за 2018-й год. Пример с абляцией объемной мишени из золота в воду. Золото показано желтым цветом, вода – голубым. Золото нагрето ультракоротким импульсом, прошедшим через прозрачную воду. Такой импульс нагревает слой прогрева в золоте. Далее формируется волна сжатия, уходящая в толщу объемной мишени. За ней следует волна разрежения. В волне разрежения золото с высокими скоростями движется в сторону воды. Из-за растяжения золота начинается кавитации. Из-за нее образуется пузырьковая смесь жидкой и паровой фаз золота. По мере расширения пузырьковая смесь трансформируется в пену с малой объемной долей жидкой фазы в смеси – эволюция пены хорошо видна на рисунке. Из-за торможения водой образуется слой сплошного золота на контакте. Пена расширяется по инерции со значительными скоростями, а скорость контактного слоя золота снижается из-за торможения. Поэтому фрагменты пены налетают на контактный слой снизу и поглощаются этим слоем. Соответственно происходит увеличение массы контактного слоя. Торможение слоя, плотность которого на контакте больше плотности воды, ведет к развитию неустойчивости Релея-Тейлора (НРТ). НРТ стартует от тепловых флуктуаций. По мере роста амплитуды возмущений НРТ происходит укрупнение пузырей. Если на начальном этапе их было 10, то к концу показанного периода крупных пузырей остается 5. Вода более голубого цвета имеет более высокую температуру по сравнению с синей водой. Тепло передается от горячего расплава золота через контакт. Затем это тепло нагревает воду из-за малой, но конечной теплопроводности воды. Теплопроводность воды связана со столкновениями молекул.*

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

приглядеться, то в воде в водных пузырях можно заметить атомы золота и кластеры из атомов.

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

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

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

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

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

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

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

Важно то, что был доведен до совершенства многомерный гидродинамический код SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics). Разработан и введен в действие многопроцессорный вариант кода. Этот вариант опирается на разбиение расчетной области на многогранники Вороного, см. статью [16] в списке отчетной лит. в п. 1.7. Причем это разбиение не фиксированное, а так сказать, «плавающее». Имеется автобалансировка по процессорам

(каждый процессор берет на себя один многогранник). Автобалансировка помогает в разы экономить вычислительные ресурсы при расчетах задач со сложной геометрией, например, когда имеются пены, или происходит отделение частиц или струй.

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

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

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

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

Именно с применением SPH кода было проведено исследование дробления микро-капли лазерным воздействием, описанное в разделе ((5)) выше, см. рис. 10/1.3 и статьи [1,2] в списке отчетной лит. в п. 1.7.

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

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

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

## **Список дополнительной литературы к разделу 1.3 годового отчета**

[1] Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, Формирование наноразмерных струек и капель ультракоротким лазерным импульсом при фокусировке на дифракционном пределе,

Письма ЖЭТФ 100 (1), 6-12 (2014). Свободный доступ:

[http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2048/article\\_30838.shtml](http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2048/article_30838.shtml)

[N.A. Inogamov and V. V. Zhakhovskii, Formation of Nanojets and Nanodroplets by an Ultrashort Laser Pulse at Focusing in the Diffraction Limit, JETP Lett. 100, (1), 4-10 (2014).]

<https://doi.org/10.1134/S0021364014130050>

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

[10.7868/S0044451015010034](https://doi.org/10.7868/S0044451015010034)

[N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, and V.A. Khokhlov, "Jet Formation in Spallation of Metal Film from Substrate under Action of Femtosecond Laser Pulse," Journal of Experimental and Theoretical Physics (JETP) 120(1), 15-48 (2015).] <https://doi.org/10.1134/S1063776115010136>

[3] П.А. Данилов, Д.А. Заярный, А.А. Ионин, С.И. Кудряшов, А.А. Руденко, А.А. Кучмижак, О.Б. Витрик, Ю.Н. Кульчин, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, Перераспределение материала при фемтосекундной лазерной абляции тонкой серебряной пленки, Письма в ЖЭТФ 104(11), 780-786 (2016). Свободный доступ:

[http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2142/article\\_32140.shtml](http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2142/article_32140.shtml)

P.A. Danilov, D.A. Zayarny, A.A. Ionin, S.I. Kudryashov, A.A. Rudenko, A.A. Kuchmizhak, O.B. Vitrik, Yu.N. Kulchin, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, Redistribution of a Material at Femtosecond Laser Ablation of a Thin Silver Film, JETP Lett. 104(11), 759-765 (2016).

<https://doi.org/10.1134/S0021364016230077>

[4] A. Kuchmizhak, O. Vitrik, Yu. Kulchin, D. Storozhenko, A. Mayor, A. Mirochnik, S. Makarov, V. Milichko, S. Kudryashov, V. Zhakhovsky, N. Inogamov, Laser printing of resonant plasmonic nanovoids, Nanoscale 8, 12352-12361 (2016). DOI: 10.1039/C6NR01317A

[5] N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, and K. P. Migdal, Solitary Nanostructures Produced by Ultrashort Laser Pulse, Nanoscale Research Letters 11, 177 (2016). DOI 10.1186/s11671-016-1381-1

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

[7] N. A. Inogamov and V. V. Zhakhovsky, Surface 3D nanostructuring by tightly focused laser pulse: simulations by Lagrangian code and molecular dynamics, J. Phys.: Conf. Series 681, 012001 (2016). Open access doi:10.1088/1742-6596/681/1/012001

[8] С.И. Анисимов, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, С.А. Мурзов, В.А. Хохлов, О формировании и кристаллизации жидкой струи, возникающей при воздействии на пленку остросфокусированным лазерным пучком, Квантовая электроника, т. 47, № 6, 509-521 (2017)

S.I. Anisimov, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, S.A. Murzov, V.A. Khokhlov, "Formation and crystallisation of a liquid jet in a film exposed to a tightly focused laser beam," *Quantum Electronics* 47 (6) 509 – 521 (2017)

[9] Wang, X. W.; Kuchmizhak, A. A.; Li, X.; Juodkazis, S.; Vitrik, O. B.; Kulchin, Y. N.; Zhakhovsky, V. V.; Danilov, P. A.; Ionin, A. A.; Kudryashov, S. I.; Rudenko, A. A. & Inogamov, N. A. Laser-induced Translative Hydrodynamic Mass Snapshots: non-invasive characterization and predictive modeling via mapping at nanoscale. *Physical Review Applied*, 8, 044016 - 1–17 (2017). <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.8.044016>

[10] П. А. Данилов, Д. А. Заярный, А. А. Ионин, С. И. Кудряшов, Ч. Т. Х. Нгуен, А. А. Руденко, И. Н. Сараева, А. А. Кучмижак, О. Б. Витрик, Ю. Н. Кульчин, "Структура и механизмы лазерного формирования микроконусов на поверхности серебряных пленок варьируемой толщины", *Письма в ЖЭТФ*, 103:8 (2016), 617–621; *JETP Letters*, 103:8 (2016), 549–552

[11] 7. Q. Li, A. P. Alloncle, D. Grojo, and P. Delaporte, Generating Liquid Nanojets from Copper by Dual Laser Irradiation for Ultra-High Resolution Printing, *Opt. Express* 25, 24164 (2017).

[12] Q. Li, A. P. Alloncle, D. Grojo, and P. Delaporte, Laser-induced nano-jetting behaviors of liquid metals, *Appl. Phys. A* 123, 718 (2017).

[13] C. Bostedt, S. Boutet, D. M. Fritz, Z. Huang, H. J. Lee, H. T. Lemke, A. Robert, W. F. Schlotter, J. J. Turner, and G. J. Williams, Linac coherent light source: the first five years, *Rev. Mod. Phys.* 88, 015007 (2016).

[14] D. Pile, "X-rays: first light from SACLA," *Nat. Photonics* 5, issue 8, 456–457 (2011). DOI: 10.1038/nphoton.2011.178

[15] E. Allaria, C. Callegari, D. Cocco, W. M. Fawley, M. Kiskinova, C. Masciovecchio, and F. Parmigiani, "The fermi@elettra free-electron-laser source for coherent x-ray physics: photon properties, beam transport system and applications," *New J. Phys.* 12, 075002 (2010).

[16] N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Ishino, N. Ohnishi, A. M. Ito, Y. Minami, M. Baba, A.Y. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, K. Kondo, and T. Suemoto, The Observation of Transient Thin Film Structures During the Femto-Second Laser Ablation Process by Using the Soft X-Ray Laser Probe, Chapter 40, pp. 273-277. *Springer Proceedings in Physics*, Volume 202. *X-Ray Lasers 2016*, Proceedings of the 15th International Conference on X-Ray Lasers, Kawachi, T., Bulanov, S.V., Daido, H., Kato, Y. (Eds.)

[17] Ю.В. Петров, Н.А. Иногамов, К.П. Мигдал, Теплопроводность и коэффициент электрон-ионного теплообмена в конденсированных средах с сильновозбужденной электронной подсистемой, *Письма ЖЭТФ* 97, сс. 24-31 (2013).

[18] D. Zhang, B. Goekce, and S. Barcikowski, Laser Synthesis and Processing of Colloids: Fundamentals and Applications, *Chem. Rev.* 117, No. 5, pp. 3990-4103 (2017).

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

[20] A. V. Bushman, V. E. Fortov, G. I. Kanel, and A. L. Ni, Intense Dynamic Loading of Condensed Matter (Taylor and Francis, London, New York, 1993).

[21] K. V. Khishchenko, S. I. Tkachenko, P. R. Levashov, I. V. Lomonosov, and V. S. Vorobev, Int. J. Thermophys. 23, 1359 (2002).

[22] <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/>  
<http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>

[23] Nigmatulin, R. I. and Bolotnova, R. Kh., Wide-range equation of state of water and steam: Simplified form, High Temperature, 49, No. 2, 303-306 (2011). Doi 10.1134/S0018151X11020106

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

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

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

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

В отчетной статье [11] в п.1.7 детально проанализирован случай с субнаносекундным импульсом и толстой пленкой. Наша работа [11] в п.1.7 позволяет понять результаты



сложных (сложность: двойной импульс, предварительное плавление пленки, средства диагностики: в полете и финальные средства микроанализа) опытов, выполненных в лаборатории LP3 (the Lasers, Plasmas and Photonic Processes); эта лаборатория является объединенной исследовательской единицей университета в Марселе и CNRS. Результаты этих опытов опубликованы в работах [11,12] (доп.лит к 1.3). Исследования ведутся в интересах оптимизации устройств лазерной печати; LIFT – laser induced forward transfer. Такая печать важна для создания изделий микроэлектроники, нанофотоники (например, печатание массива нано-антенн) и биологии (печать тканей, например, кожи и костной ткани).

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

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

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

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

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

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

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

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

Применение квантово-механических DFT (density functional theory) подходов для определения параметров ГПУ (гексагональная плотноупакованная) решетки рутения Ru (постоянная решетки, отношение  $c/a$ ) в зависимости от сжатия/растяжения.

Использовался пакет VASP. Построены: холодная кривая  $p(\rho)$ , электронные спектры в зависимости от плотности и электронной температуры: зависимость плотности  $g$  электронных состояний (DoS – density of states) от энергии  $g(E; \rho, T_e)$ , см. рис. 9/разд.1.3.

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

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

Имея данные (i), (ii) и (iii), мы выполнили серии двухтемпературных гидродинамических расчетов (код 2Т-гд) облучения рутения оптическими или рентгеновскими импульсами (мягкий рентген, фотон 90 эВ). Данные по коэффициентам поглощения брались из справочников под редакцией Палика и с сайта с таблицами Хенке

[http://henke.lbl.gov/optical\\_constants/](http://henke.lbl.gov/optical_constants/). Описанные выше этапы частично опубликованы в отчетной статье [15]/п. 1.7 отчета.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## **1.5. Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов для публикации на сайте РФФ**

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

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

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

В отчетной статье [11] в п.1.7 детально проанализирован случай с субнаносекундным импульсом и толстой пленкой. Наша работа [11] в п.1.7 позволяет понять результаты сложных опытов, выполненных в лаборатории LP3 (the Lasers, Plasmas and Photonic Processes); эта лаборатория является объединенной исследовательской единицей университета в Марселе и CNRS (CNRS/Aix-Marseille University-AMU). Результаты французских опытов опубликованы в работах [11,12] (доп.лит к 1.3). Исследования ведутся

в интересах оптимизации устройств лазерной печати; LIFT – laser induced forward transfer. Такая печать важна для создания изделий микроэлектроники, нанофотоники (например, печатание массива нано-антенн) и биологии (печать тканей, например, кожи и костной ткани).

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Проведенные исследования проходили в несколько этапов. Была создана двухтемпературная модель олова, включавшая уравнение состояния и кинетические коэффициенты. Был разработан межатомный потенциал жидкого олова. Были выполнены одномерные гидродинамические расчеты и молекулярно-динамическое (МД)



моделирование, с помощью МД была определена динамическая прочность расплава олова в процессах быстрого растяжения (это важно для аккуратного расчета фрагментации методом SPH). Далее было проведено трехмерное численное моделирование с использованием разработанного в отчетном году алгоритма (применение сетки Вороного) и комплекса программ SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) для многопроцессорного моделирования, см. отчетную работу [16] в списке публ. 1.7 за 2018-й год по отчету. Новый алгоритм позволил использовать в расчетах на суперкомпьютерах многие миллионы SPH-частиц. Таким образом, было получено детальное описание сложнейшего иерархического процесса лазерного дробления микро-капли. Наглядное представление можно получить, просматривая киноматериалы, приложенные к работе [1]/п. 1.7.

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

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

Задача об абляции в жидкость имеет важное фундаментальное и прикладное значение. В фундаментальном плане задача интересна тем, что принципиально отличается от абляции в газ или вакуум. Приложения в технологиях подробно описаны в недавних обширных обзорах [18,19] (список доп.лит.к разделу 1.3). Приложений много, они в фотонике, химиндустрии (катализ), медицине (доставка лекарств), энергетике, экологии и т.д. До сих пор имеются в основном экспериментальные данные по синтезу коллоидных растворов наночастиц путем абляции в жидкости. Наши работы восполняют этот пробел, помогают понять, как в реальности происходит абляция в жидкость.

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

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

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

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

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

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

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

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

Почему это важно? Дело в том, что теперь мы используем этот эффективный высокопроизводительный код при решении многих поставленных перед коллективом

задач. SPH код с успехом заменяет молекулярно-динамическое (МД) моделирование в задачах с большими пространственно-временными объемами. Как известно, МД код не может выйти за пределы порядка кубического микрона и десятков наносекунд.

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

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

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

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

Принципиальные результаты, относящиеся к пониманию сущности процессов испарения и конденсации, разработаны в статье [4] в списке отчетной лит. в п. 1.7.

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

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

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

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

1. Григорьев и др., Expansion and fragmentation of a liquid-metal droplet by a short laser pulse, Phys. Rev. Appl., 10, 064009 (2018 г.)

<https://journals.aps.org/prapplied/abstract/10.1103/PhysRevApplied.10.064009>

2. Дьячков и др., Explicit failure model for boron carbide ceramics under shock loading, J. Appl. Phys., 124, 085902 (2018 г.) DOI: 10.1063/1.5043418

<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.5043418>

3. Жаховский и др., Mass and heat transfer between evaporation and condensation surfaces: Atomistic simulation and solution of Boltzmann kinetic equation, Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS) (2018 г.) DOI: 10.1073/pnas.1714503115

<https://www.pnas.org/content/early/2018/04/13/1714503115>

4. Игнатов и др., Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse. Part I: Plasmonics, J. Phys.: Conf. Series, 1092, 012051 (2018 г.) (open access)  
DOI: 10.1088/1742-6596/1092/1/012051  
<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1092/1/012051>
5. Игнатов и др., Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse. Part II, J. Phys.: Conf. Series, 1092, 012051 (2018 г.) (open access)  
DOI: 10.1088/1742-6596/1092/1/012052  
<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1092/1/012052>
6. Игнатов и др., Laser-induced formation of holograms for generation of plasmons, J. Phys.: Conf. Series (2018 г.), accepted (open access)
7. Ильницкий и др., Mechanical anisotropy of energetic polycrystals as possible initiation mechanism, J. Phys.: Conf. Series (2018 г.), accepted (open access)
8. Иногамов и др., Laser ablation caused by geometrically constrained illumination and inventive target design, J. Phys.: Conf. Ser., 946, 012008 (2018) (open access)  
DOI: [10.1088/1742-6596/946/1/012008](https://doi.org/10.1088/1742-6596/946/1/012008)  
<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/946/1/012008>
9. Иногамов и др., Warm dense matter in extremely small volume - Hydrodynamics of nanofilms triggered by laser irradiation at diffraction limit, AIP Conference Proceedings, 1979, 190002 (2018 г.) (open access) DOI: 10.1063/1.5045044  
<https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.5045044>
10. Иногамов и др., Динамика абляции золота в воду, ЖЭТФ, 154, 92-123 (2018 г.) (open access на русск.яз) DOI: 10.7868/S00444451018070000  
<http://jetp.ac.ru/cgi-bin/e/index/r/154/1/p92?a=list>
11. Иногамов и др., Формирование уединенной микроструктуры и абляция в прозрачный диэлектрик при субнаносекундном лазерном воздействии, Письма в ЖЭТФ, 108(7), 470-477 (2018 г.) (open access на русск.яз) DOI: 10.1134/S0370274X18190037  
[http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2197/article\\_32928.shtml](http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2197/article_32928.shtml)
12. Иногамов и др., Laser ablation of metal into liquid: Near critical point phenomena and hydrodynamic instability AIP Conference Proceedings, 1979, 190001 (2018 г.) (open access)  
DOI: 10.1063/1.5045043 <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.5045043>
13. Мигдал и др., Electrical resistivity of liquid expanded metals by Ziman approach, J. Phys.: Conf. Series (2018 г.), accepted (open access)
14. Мурзов и др., Multiscale smoothed particle hydrodynamics simulation of detonation initiation, J. Phys.: Conf. Series (2018 г.), accepted (open access)
15. Хохлов и др., Dynamics of ruthenium mirror under action of soft x-ray ultrashort laser pulse, J. Phys.: Conf. Series (2018 г.), accepted (open access)

16. Егорова и др., Parallel SPH modeling using dynamic domain decomposition and load balancing displacement of Voronoi subdomains, Computer Physics Communications, 234, 112-125 (2019 г.) (open access) DOI: 10.1016/j.cpc.2018.07.019  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465518302765?via%3Dihub>

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

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

Устный доклад (У1)

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

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

2.1. Устный доклад (У2)

D. Ilnitsky, S. Dyachkov, N. Inogamov, V. Zhakhovsky, Mechanical anisotropy of energetic polycrystals as possible initiation mechanism

2.2. Устный доклад (У3)

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

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

3.1. Устный доклад (У4)

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

3.2. Устный доклад (У5)

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

3.3. Стендовый доклад (C1)

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

3.4. Стендовый доклад (C2)

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

3.5. Стендовый доклад (C3)

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

4. III International Conference on Metamaterials and Nanophotonics (METANANO 2018), 17-21 September 2018, Sochi, Russia, <https://metanano.ifmo.ru/>

Устный доклад (У6)

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

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

5.1. Устный доклад (У7)

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

6. The 2018 E-MRS Spring Meeting and Exhibit will be held in the Convention Centre of Strasbourg (France), from **June 18 to 22, 2018**

<https://www.european-mrs.com/meetings/2018-spring-meeting>

6.1. Устный доклад (У8)

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

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

Приглашенный доклад (П1)

7.1. V. Zhakhovsky, S. Dyachkov, N. Inogamov, Laser ablation of gold into water: Comparative atomistic and hydrodynamics modeling

7.2. Устный доклад (У9)

V. Khokhlov, N. Inogamov, and V. Zhakhovsky, Laser ablation in liquid: heating, diffusion, and condensation

8. 11th International Conference on Photo-Excited Processes and Applications – ICPEPA 11, Vilnius, Lithuania on September 10-14, 2018, <http://icpepa11.com/>

Устный доклад (У10)

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

Устный доклад (У11)

K. Migdal, V. Zhakhovsky, A. Yanilkin, Yu. Petrov, and N. Inogamov, "Transport properties of liquid metals and semiconductors from molecular-dynamics simulation with Kubo-Greenwood formula"

9. Физика взрыва: теория, эксперимент, приложения, Новосибирск, 18-21 сентября 2018 г., <http://conf.nsc.ru/expl2018/ru>

Устный доклад (У12)

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

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

Приглашенный доклад (П2)

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

Устный доклад (У13)

K. Migdal, D. Ilnitsky, N. Inogamov, "Transport and optical properties of noble metals at two-temperature state", устный доклад.

Устный доклад (У14)

S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, E.V. Struleva, N.A. Inogamov, M.B. Agranat and G.I. Kanel, The behavior metals under ultrafast loading driven by femtosecond laser

11. The Physics of X-Ray and Neutron Multilayer Structures (in short PXRNMS2018)

7-9 Nov 2018 in Palaiseau (France), (<https://pxrnms2018.sciencesconf.org>)

Устный доклад (У15)

I. Milov<sup>1</sup>, Igor Makhotkin<sup>1</sup>, Ryszard Sobierajski<sup>2</sup>, Nikita Medvedev<sup>3,4</sup>, Vladimir Lipp<sup>5</sup>, Beata Ziaja<sup>5,6</sup>, Viktor Khokhlov<sup>7</sup>, Vasily Zhakhovsky<sup>7,8</sup>, Yurii Petrov<sup>7,9</sup>, Vadim Shepelev<sup>7,10</sup>, Denis Ilnitsky<sup>7,8</sup>, Kirill Migdal<sup>7,8</sup>, Nail Inogamov<sup>7,8</sup>, Viacheslav Medvedev<sup>11,12</sup>, Eric Louis<sup>1</sup>, and Fred Bijkerk<sup>1</sup>

"Photon induced damage processes in Ruthenium thin films developed for Free Electron Laser optics"

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

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

12.1. Устный доклад (У16)

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

12.2. Устный доклад (У17)

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

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



Москва. 20 ноября. INTERFAX.RU

Физики разработали алгоритм, позволяющий понять процессы при столкновении звезд

<https://www.interfax.ru/russia/638676>,

<https://www.itp.ac.ru/ru/news/science-news/144/>

Москва. 31 мая. INTERFAX.RU

Физики создали наноиглы для сверхминиатюрной электроники при помощи луча-бублика

<https://www.interfax.ru/russia/615137>,

<https://www.itp.ac.ru/ru/news/science-news/135/>

МОСКВА, 22 мар – РИА Новости.

Физики из России раскрыли секрет «лазерной» сборки наночастиц

[https://ria.ru/20180322/1517039774.html?utm\\_source=rnews](https://ria.ru/20180322/1517039774.html?utm_source=rnews),

<https://www.itp.ac.ru/ru/news/science-news/128/>

## **Итоговый отчет по гранту 14-19-01599**

(итоговый отчет см. в карточках на сайте, за исключение пункта 5.5 с публикациями за 2017 и 18-й гг., который приведен ниже)

### **5.5. Перечень публикаций по проекту за весь срок выполнения проекта**

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

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

---

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

---

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

---

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

---

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

---

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

---

7. [Иногамов Н.А., Хохлов В.А., Петров Ю.В., Жаховский В.В., Мигдал К.П., Ильнитский Д.К., Хасегава Н., Нишилино М., Ямагива М., Ишино М., Кавачи Т., Фаенов А.Я., Пикуз Т., Баба М., Минами И., Суемото Т. \(Inogamov, N. A.; Khokhov, V. A.; Petrov, Y. V.; Zhakhovsky, V. V.; Migdal, K. P.; Ilnitsky, D. K.; Hasegawa, N.; Nishikino, M.; Yamagiwa, M.; Ishino, M.; Kawachi, T.; Faenov, A. Y.; Pikuz, T.; Baba, M.; Minami, Y., Suemoto., T.\) Rarefaction after fast laser heating of a thin metal film on a glass mount.](#) *AIP Conference Proceedings* (2017 г.) [SCOPUS](#) [РИНЦ](#)

---

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

---

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

---

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

---

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

---

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

---

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

---

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

---

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

---

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

---

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

---

18. Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. (Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V. & Khokhlov, V. A.) **Warm Dense Matter in Extremely Small Volume - Hydrodynamics of Nanofilms Triggered by Laser Irradiation at Diffraction Limit** Conference Proceedings of the 20th Biennial Conference of the APS

19. Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. (Inogatov, N.; Zhakhovsky, V. & Khokhlov, V.) **Laser Ablation of Metal into Liquid: near Critical Point Phenomena and Hydrodynamic Instability** Conference Proceedings of the 20th Biennial Conference of the APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter. Bulletin of the American Physical Society (2018 г.) <sup>SCOPUS</sup>

---

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

---

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

---

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

---

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

---

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

---

25. Игнатов А.И., Жаховский В.В., Мерзликун А.М., Иногамов Н.А. (Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogatov, N., A.) **Laser-induced formation of holograms for generation of plasmons** Journal of Physics: Conference Series (2018 г.) <sup>WOS SCOPUS</sup>

---

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

---

27. [Иногамов Н.А., Жаховский В.В. Хохлов В.А. \(Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V. & Khokhlov, V. A.\) \*\*Laser ablation caused by geometrically constrained illumination and inventive target design\*\* Journal of Physics: Conference Series \(2018 г.\)](#) <sup>WOS SCOPUS</sup>

---

28. [Иногамов Н.А., Жаховский В.В. Хохлов В.А. \(N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov\) \*\*Warm dense matter in extremely small volume - Hydrodynamics of nanofilms triggered by laser irradiation at diffraction limit\*\* AIP Conference Proceedings \(2018 г.\)](#) <sup>WOS SCOPUS РИНЦ</sup>

---

29. [Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. \(Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Khokhlov V.A.\) \*\*ДИНАМИКА АБЛЯЦИИ ЗОЛОТА В ВОДУ\*\* Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики \(2018 г.\)](#) <sup>WOS SCOPUS РИНЦ</sup>

---

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

---

31. [Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Хохлов В.А. \(Inogamov, N.; Zhakhovsky, V. & Khokhlov, V.\) \*\*Laser ablation of metal into liquid: Near critical point phenomena and hydrodynamic instability\*\* AIP Conference Proceedings \(2018 г.\)](#) <sup>WOS SCOPUS РИНЦ</sup>

---

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

---

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

---

34. Хохлов В.А., Жаховский В.В., Петров Ю.В., Шепелев В.В., Ильницкий Д.К., Мигдал К.П., Иногамов Н.А. (Khokhlov, V. A.; Zhakhovsky, V. V.; Petrov, Y. V.; Shepelev, V. V.; Ilnitsky, D. K.; Migdal, K.

*P. & Inogamov, N. A.) Dynamics of ruthenium mirror under action of soft x-ray ultrashort laser pulse*  
Journal of Physics: Conference Series (2018 г.) <sup>WOS SCOPUS</sup>

---

**35. [Егорова М.С., Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Жаховский В.В. \(M.S.Egorova, S.A.Dyachkov, A.N. Parshikov, V.V. Zhakhovsky\) Parallel SPH modeling using dynamic domain decomposition and load balancing displacement of Voronoi subdomains](#) Computer Physics Communications (2019 г.)** <sup>WOS SCOPUS Q1</sup>

---

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

Безусловно разработанные коды и полученные физические результаты имеют отношение к совершенствованию применяемых в нашей стране технологий.