

Форма «Т». Титульный лист заявки в Российский научный фонд
Конкурс 2019 года «Проведение фундаментальных научных исследований и
поисковых научных исследований отдельными научными группами»

Название проекта Физика лазерного воздействия на материалы: теория, моделирование и приложения	Номер проекта 19-19-00670	
	Код типа проекта: ОНК(2019)	
	Отрасль знания: 09	
	Основной код классификатора: 09-202 Дополнительные коды классификатора: 02-204 09-203	
	Код ГРНТИ 29.33.47	
Фамилия, имя, отчество (при наличии) руководителя проекта: Анисимов Сергей Иванович	Контактные телефон и e-mail руководителя проекта: +79032130112, s.i.anisimov@mail.ru	
Полное и сокращенное наименование организации, через которую должно осуществляться финансирование проекта: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН		
Объем финансирования проекта в 2019 г. 6000 тыс. руб.	Год начала проекта: 2019	Год окончания проекта: 2021
Фамилии, имена, отчества (при наличии) основных исполнителей (полностью)	Жаховский Василий Викторович Иногамов Наиль Алимович Петров Юрий Васильевич (руководитель проекта в данной графе не указывается)	
Гарантирую, что при подготовке заявки не были нарушены авторские и иные права третьих лиц и/или имеется согласие правообладателей на представление в Фонд материалов и их использование Фондом для проведения экспертизы и для обнародования (в виде аннотаций заявок).		
Подпись руководителя проекта _____/С.И. Анисимов/		Дата регистрации заявки 14.11.2018 г.
Подпись руководителя организации* * Либо уполномоченного представителя, действующего на основании доверенности или распорядительного документа. В случае подписания формы уполномоченным представителем организации (в т.ч. - руководителем филиала) к печатному экземпляру заявки прилагается копия распорядительного документа или доверенности, заверенная печатью организации. Непредставление копии распорядительного документа или доверенности в случае подписания формы уполномоченным представителем организации, а также отсутствие расшифровки подписи, является основанием недопуска заявки к конкурсу.		
_____/_____/ Печать (при наличии) организации		

Форма 1. Сведения о проекте

1.1. Название проекта

на русском языке

Физика лазерного воздействия на материалы: теория, моделирование и приложения

на английском языке

The physics of laser action on materials: theory, simulations and applications

1.2. Приоритетное направление развития науки, технологий и техники в Российской Федерации, критическая технология

Указывается согласно перечню (Указ Президента Российской Федерации от 7 июля 2011 года №899) в случае, если тематика проекта может быть отнесена к одному из приоритетных направлений, а также может внести вклад в развитие критических технологий Российской Федерации.

2. Индустрия наносистем.

7. Компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий.

Направление из Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации (при наличии)

Утверждена Указом Президента Российской Федерации от 1 декабря 2016 г. № 642 «О Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации».

Н1 Переход к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта

1.3. Ключевые слова (приводится не более 15 терминов)

на русском языке

создание наноструктур и метаповерхностей, лазер и плазмоника, абляция в жидкость, фрагментация капель, компьютерная физика, полупроводники

на английском языке

creation of nanostructures and meta-surfaces, laser and plasmonics, ablation into liquid, droplet fragmentation, computer physics, semiconductors

1.4. Аннотация проекта (объемом не более 2 стр.; в том числе кратко – актуальность решения указанной выше научной проблемы и научная новизна)

Данная информация может быть опубликована на сайте Фонда в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет».

на русском языке

С пучками частиц и света связаны новаторские технологии обработки. Поток электронов, сфокусированный ионный пучок (FIB) и лазерное воздействие - вот новые инструменты, на много порядков повышающие прецизионность изготовления по сравнению, скажем, со сверлом, традиционно применяемом в машиностроении. С другой стороны, лазеры непрерывного действия и порошковые мишени при 3D-печати позволяют легко обойти проблемы топологического плана, которые неизбежны при обычных путях создания сложных трехмерных объектов, например, решетчатых изделий или изделий с запутанной внутренней геометрией. В настоящем проекте рассматриваются фундаментальные проблемы, которые возникают именно в лазерных приложениях, поскольку лазерное микро-структурирование существенно экономичнее, чем абляция с помощью электронов или FIB.

При этом электронный микроскоп и FIB тоже применяются в проекте, но в качестве диагностического оборудования, при совместной работе с экспериментаторами, см., например, [1-3].

Перспективные и уже используемые технологии, которые изучаются в данной заявке, основаны на тонком управлении пространственно-временными распределениями вложенной лазерной энергии. Управление осуществляется двумя способами. Во-первых, путем возбуждения поверхностных плазмон-поляритонных (ППП) мод [4]. И, во-вторых, путем применения сложных пучков [2,5] – здесь говорится о формирующих пучок фазовых пластинках и вихреобразном воздействии в оптике [5] или в рентгене [2].

Речь идет об изготовлении голограмм, метаповерхностей, метаматериалов, т.е. материалов со свойствами, которые не встречаются среди естественных веществ [1]. Появление необычных характеристик обусловлено точным упорядочиванием, структурированием на микро- и на наноуровне для использования интерференционных эффектов между светом и ППП электромагнитными (ЭМ) полями [1]. Именно для этого требуется прецизионность.

Другими важными, но не исследованными или недостаточно исследованными направлениями в нашем проекте являются абляция металлов и полупроводников в жидкость [6], лазерная фрагментация жидких капель [7], абляция тугоплавких металлов и спекание/плавление порошковых мишеней [8].

Накопленный в коллективе опыт позволяет в настоящей заявке взяться за эти сложные, нужные для приложений проблемы.

Обсудим актуальность и новизну. Возбуждение ППП мод электромагнитным (ЭМ) излучением лазера обсуждается давно [9]. В этих работах ищется резонанс между приходящей плоской ЭМ волной и соответствующей ППП модой с равной частотой, представленную в спектре ППП мод. Спектр ППП мод связан со случайной начальной шероховатостью отражающей поверхности. Интерференция ЭМ волны лазера и ПП-поляритонов бесспорно влияет на формирование поверхностных периодических структур LIPSS (laser induced periodic surface structures). Для создания LIPSS используют широкий пучок (много длин волн укладывается в пятне на поверхности) и многократное облучение. LIPSS вырастает постепенно «из ничего». Пространственный период LIPSS контролируется плохо.

В предлагаемом нами подходе сразу создается ППП мода с частотой по времени, требуемой для интерференции с лазером. В предыдущей нашей работе для этого использовалась конфигурация Кретчманна [4]. В новом проекте источником ППП поля является локализованное пространственное возмущение на поверхности в виде бугорка-купола. Процессы формирования такого бугорка одиночным выстрелом изучены в наших предыдущих работах [10]. ЭМ волна второго выстрела в ту же точку или рядом с ней, во-первых, генерирует бегущую ППП моду с нужной частотой и, во-вторых, интерферирует с этой ППП модой, создавая стоячую волну. В результате действия стоячей волны вместо бугорка возникает сложная картина впечатанной в материал пространственной интерференции, наблюдавшаяся нашими коллегами [11]. Мы создадим физическую модель и объясним, как происходит впечатывание стоячей волны, как управлять картиной, каковы оптимальные условия (фокусировка, длительность, интенсивность) - в этом заключается новизна по сравнению с работами [4] и [11]. Актуальность задачи связана с проблемами создания метаматериалов.

Исключительно востребованными являются работы по физическим моделям и моделированию абляции металлов в жидкость с формированием наночастиц. Актуальность соответствующих приложений в электронике, катализе, нанотехнологиях, биомедицине детально освещена в недавних обзорах [12]. На сегодня отсутствует описание того, как образуются наночастицы, и каким образом они попадают в жидкость. Описана только начальная стадия процесса [6] и конечная стадия с пузырьком [13]. Изученный участок начальной стадии [6] еще очень далек от образования пузырька. Тогда как конечная стадия опирается на довольно простой подход с уравнением Релея-Плессета в сферической геометрии [13]. Такой подход никак не связан с абляцией на начальной стадии, которая протекает в одномерной геометрии – диаметр пятна нагрева порядка долей миллиметра, а толщина слоя прогрева порядка 100 нм. В нашей работе по проекту будут созданы теория и вычислительный аппарат всех стадий процесса от поглощения лазерной энергии до формирования пузырька и перехода наночастиц в паро-жидкостную смесь на примере воды. Подход будет опираться на уравнения состояния и межатомные потенциалы взаимодействия металлов и воды. Уравнения состояния используются в гидродинамических расчетах, а потенциалы взаимодействия – при молекулярно-динамическом моделировании.

Сложнейшими являются задачи с лазерным дроблением капель. Лазерное воздействие порождает резко нестационарное трехмерное многомасштабное течение, в котором важен учет всех факторов от горячей плазмы до эффектов прочности/разрушения и капиллярного разбрызгивания [7,14]. Нам удалось создать код, описывающий фрагментацию микрокапли олова, см. [7] и кино в файле «SV.mp4», (доступны на сайте <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/index.html>, см. комментарии в ссылке [7]). Физическая модель, разработанная нами, включает в себя EAM (embedded atom method) потенциал взаимодействия атомов жидкого олова. Фрагментация оловянной капли – это важный раздел комплексной программы, относящейся к созданию литографических машин будущего. В таких машинах резко уменьшена длина, связанная с дифракционным пределом, поскольку используется вакуумный ультрафиолет с энергией фотона 90 эВ и длиной волны ЭМ излучения 13.5 нм. Задача разрабатывалась совместно с сотрудниками института спектроскопии РАН и ОИВТ РАН.

В новом проекте будет решена задача о воздействии лазерного луча жесткого рентгена (фотон 8 кэВ, длительность импульса 30 фс) на микрокаплю воды. Соответствующие опыты [14] были выполнены недавно на приборе Coherent X-ray Imaging (CXI) на линейном ускорителе в Стэнфорде (Linac Coherent Light Source - LCLS). В расчетах будет использована двухтемпературная гидродинамика и новая модификация нашего многопроцессорного SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) кода [15] вместе с детальными сведениями о характеристиках воды.

Будет решена задача об абляции рутения. Это важный малоисследованный тугоплавкий металл, который применяется в рентгеновской оптике. Будет создан межатомный потенциал рутения, что не просто из-за необходимости его подгонки к большому поверхностному натяжению и высокой температуре плавления плюс дополнительные сложности кристаллографического плана (гексагональная плотноупакованная решетка задается двумя параметрами). Будет создано уравнение состояния с учетом двухтемпературных эффектов. На этой основе будут проведены двухтемпературные гидродинамические и молекулярно-динамические расчеты. Работа будет вестись совместно с экспериментом. Будут рассмотрены ультракороткие воздействия лазеров с разной длиной волны от оптического до жесткого ультрафиолета и до жесткого рентгена под разными углами падения.

Будут проведены исследования по плавлению порошков микрочастиц лазерным импульсом. Это важная новая тематика, которая мало изучена в отношении создания физических моделей и кодов для анализа происходящих процессов.

Будет продолжено совершенствование SPH кода в направлении включения фазовых переходов. Это высокопроизводительный многопроцессорный код, который используется в проекте в задачах об абляции в воду, дроблении капель и термо-гидродинамики порошков. Очень важно, что код не имеет пространственно-временных ограничений в отличие от молекулярной динамики, ограниченной масштабами порядка микрона и временами порядка десятков наносекунд. Разработанный в нашем коллективе SPH код VMD3 (Voronoi Material Dynamic Domain Decomposition) [15] эффективен при описании разрушения и фрагментации в многомерной геометрии.

Литература

- [1] Wang et al., Phys. Rev. Appl. (2017); Данилов и др., Письма в ЖЭТФ (2016); Kuchmizhak et al., Nanoscale (2016) - более подробно сведения о ссылках см. в файле 1 приложенном п. 4.13
- [2] Kohmura et al., Appl. Phys. Lett. (2018)
- [3] Ашитков и др., Письма в ЖЭТФ (2012)
- [4] Ignatov et al., J. Phys.: Conf. Ser. (2018a); Ignatov et al., J. Phys.: Conf. Ser. (2018b)
- [5] Toyoda et al., Nano Lett. (2012), Takahashi et al., Scient. Rep. (2016); Syubaev et al., Opt. Lett. (2017)
- [6] Иногамов и др., ЖЭТФ (2018); Иногамов и др., Письма в ЖЭТФ (2018)
- [7] Grigoryev et al., Phys. Rev. Appl. accepted.
Статья в виде файла http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/Grigoryev_etal_Phys.Rev.Appl_Accepted_October25.pdf и двух кинограмм в <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/SV.mp4> доступна на сайте <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/index.html>. Кино поясняет сказанное в статье.
- [8] Mindt et al., Metallurg. & Mat. Transactions (2016)
- [9] Sipe et al., Phys. Rev. B (1983); Ахманов и др., УФН (1985)
- [10] Иногамов и др., Письма ЖЭТФ (2014); Иногамов и др., ЖЭТФ (2015); Inogamov et al., J. Phys.: Conf. Ser. (2016); Inogamov et al., Appl. Phys. A (2016); Inogamov et al., Nanoscale Res. Lett. (2016); Анисимов и др., Квант. электрон. (2017); Inogamov et al., J. Phys.: Conf. Ser. (2018)
- [11] Kuchmizhak et al., Optics Lett. (2015)
- [12] Zhang et al. Chem. Rev. (2017); Xiao et al., Progr. Mat. Sci. (2017)
- [13] Lam et al., Appl. Phys. Lett. (2016)
- [14] Stan et al., Nature Phys. (2016); Stan et al., J. Phys. Chem. Lett. (2016)
- [15] Egorova et al., Com. Phys. Comm., (2019)

на английском языке

Beams of particles and light generate innovative processing technologies. Electron flux, focused ion beam (FIB) and laser irradiation are new tools that increase manufacturing precision by many orders of magnitude compared to, say, the drill traditionally used in mechanical engineering. On the other hand, continuous lasers and powder targets for 3D printing make it easy to get around topological problems that are inevitable with conventional ways of creating complex three-dimensional objects, for example, lattice products or products with intricate internal geometry. This project addresses the fundamental problems that arise precisely in laser applications, since laser micro-structuring is much more economical than ablation by means of electrons or FIB.

In this case, the electron microscope and FIB are also used in the project, but as diagnostic equipment, when working with experimenters, see, for example, [1-3].

The promising and already used technologies, which are studied in this application, are based on the subtle control of the space-time distributions of the radiated laser energy. This operation is carried out in two ways. First, by exciting surface plasmon-polariton (SPP) modes [4]. And, secondly, through the use of complex beams [2,5] - here we speak of beam-forming phase plates and vortex effects in optics [5] or in x-rays [2].

We are talking about making holograms, meta-surfaces, metamaterials, i.e. materials with properties that are not found among natural substances [1]. The appearance of unusual characteristics is due to precise ordering, structuring at the micro- and at the nanolevel for the use of interference effects between light and SPP by electromagnetic (EM) fields [1]. Just for this precision is required.

Other important directions in our project. not yet investigated or insufficiently studied, are the ablation of metals and semiconductors into a liquid [6], laser fragmentation of liquid drops [7], ablation of refractory metals, and sintering/melting of powder targets [8].

The experience accumulated in the team allows in this application to take up these complex, necessary in practice

problems.

We will discuss the relevance and novelty. The excitation of the SPP mode by electromagnetic (EM) laser radiation has been discussed for a long time [9]. In these works, a resonance is sought between the incoming flat EM wave and the corresponding SPP mode with equal frequency, represented in the spectrum of the SPP mode. The SPP mode spectrum is associated with a random initial roughness of the reflecting surface. Interference of the EM waves of a laser and PP polaritons undoubtedly influences the formation of laser induced periodic surface structures (LIPSS). To create LIPSS, a wide beam is used (many wavelengths fit in a spot on the surface) and multiple exposures. LIPSS grows gradually “out of nothing”. The spatial period of LIPSS is poorly controlled.

In our proposed approach, an SPP mode is immediately created with a frequency required for interference with the laser. In our previous work, the Kretschmann configuration [4] was used for this. In the new project, the source of the SPP field is a localized spatial perturbation on the surface in the form of a protuberance-dome. The processes of formation of such a hillock by a single shot were studied in our previous works [10]. The EM wave of the second shot at or near the same point, firstly, generates a running SPP mode with the desired frequency and, secondly, interferes with this SPP mode, creating a standing wave. As a result of the action of a standing wave, instead of a protuberance, a complex pattern arises of the spatial interference imprinted in the material, which was observed by our colleagues [11]. We will create a physical model and explain how a standing wave is impressed, how to control the picture, what are the optimal conditions (focus, duration, intensity) - this is new compared to [4] and [11]. The urgency of the problem is connected with the problems of creating metamaterials.

Works on physical models and modeling of metal ablation into a liquid with the formation of nanoparticles are extremely in demand. The relevance of appropriate applications in electronics, catalysis, nanotechnology, biomedicine is described in detail in recent reviews [12]. Today there is no description of how nanoparticles are formed, and how they get into the liquid. Only the initial stage of the process [6] and the final stage with a bubble [13] are described. The part of the initial stage studied [6] is still very far from the formation of a bubble. Whereas the final stage relies on a rather simple approach with the Rayleigh-Plesset equation in spherical geometry [13]. This approach is in no way connected with ablation at the initial stage, which proceeds in a one-dimensional geometry – the diameter of the heating spot is of the order of fractions of a millimeter, and the thickness of the heating layer is of the order of 100 nm. In our project work, a theory and a computational methods will be created for all stages of the process, from the absorption of laser energy to the formation of a bubble and the transition of nanoparticles into a vapor-liquid mixture using water as an example. The approach will be based on the equations of state and interatomic potentials of the interaction of metals and water. The equations of state are used in hydrodynamic calculations, and the interaction potentials are used in molecular dynamics simulations.

Very difficult tasks are laser crushing of droplets. The laser action generates a highly unsteady three-dimensional multiscale flow in which it is important to take into account all factors from hot plasma to strength/destruction effects and capillary spattering [7,14]. We have created a code describing the fragmentation of the tin microdroplets, see [7] and the movie in the “SV.mp4” on site <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/index.html> (comments in reference [7]). The physical model developed by us includes the EAM (embedded atom method) potential for the interaction of atoms of liquid tin. Tin drop fragmentation is an important part of a comprehensive program related to the creation of the lithographic machines of the future. In such machines, the length associated with the diffraction limit is sharply reduced, since vacuum ultraviolet with a photon energy of 90 eV and a wavelength of EM radiation of 13.5 nm is used. The task was developed jointly with the staff of the Institute of Spectroscopy RAS and JIHT RAS.

In the new project, the problem of the action of a hard X-ray laser beam (8 keV photon, pulse duration 30 fs) on a water drop will be solved. The corresponding experiments [14] were performed recently on a Coherent X-ray Imaging (CXI) device at a Stanford linac (Linac Coherent Light Source - LCLS). The calculations will use two-temperature hydrodynamics and a new modification of our multiprocessor SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) code [15], along with detailed information on the characteristics of water.

The problem of ablation of ruthenium will be solved. This is an important little-studied refractory metal, which is used in X-ray optics. The interatomic potential of ruthenium will be created, which is not just because of the need to fit it to a large surface tension and high melting point plus additional complexities of the crystallographic plan (hexagonal close-packed lattice is characterized by two parameters). The equation of state will be created taking into account the two-temperature effects. On this basis, two-temperature hydrodynamic and molecular dynamics calculations will be carried out. Work will be conducted in conjunction with the experiment. Action of ultrashort laser pulses with different wavelengths from optical to hard ultraviolet and hard x-rays at different angles of incidence will be considered.

Studies will be conducted on melting of powders of microparticles by a laser pulse. This is an important new topic that has been little studied in relation to the creation of physical models and codes for analyzing ongoing processes.

The improvement of the SPH code in the direction of the inclusion of phase transitions will be continued. This is a high-performance multiprocessor code that is used in the project in the problems of ablation into water, crushing of droplets, and

thermo-hydrodynamics of powders. It is very important that the code has no space-time limitations, in contrast to molecular dynamics, limited by the space scale of the order of a micron and by times of the order of tens of nanoseconds. The SPH code named VMD3 (Voronoi Material Dynamic Domain Decomposition) developed in our team [15] is effective in describing fracture and fragmentation in multidimensional geometry.

Literature to 1.4

- [1] Wang et al., Phys. Rev. Appl. (2017); Danilov et al., JETP Lett. (2016); Kuchmizhak et al., Nanoscale (2016) - For more information about references, see the the attached p. 4.13 file 1.
- [2] Kohmura et al., Appl. Phys. Lett. (2018)
- [3] Ashitkov et al., JETP Lett. (2012)
- [4] Ignatov et al., J. Phys.: Conf. Ser. (2018a); Ignatov et al., J. Phys.: Conf. Ser. (2018b)
- [5] Toyoda et al., Nano Lett. (2012), Takahashi et al., Scient. Rep. (2016); Syubaev et al., Opt. Lett. (2017)
- [6] Inogamov et al., JETP (2018); Inogamov et al., JETP Lett. (2018)
- [7] Grigoryev et al., Phys. Rev. Appl. accepted
- The article as a file http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/Grigoryev_etal._Phys.Rev.Appl_Accepted_October25.pdf and two films in the file <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/SV.mp4> are available on site <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/index.html>. Movie explains what was said in the article.
- [8] Mindt et al., Metallurg. & Mat. Transactions (2016)
- [9] Sipe et al., Phys. Rev. B (1983); Ахманов и др., УФН (1985)
- [10] Inogamov et al., JETP Lett. (2014); Inogamov et al., JETP (2015); Inogamov et al., J. Phys.: Conf. Ser. (2016); Inogamov et al., Appl. Phys. A (2016); Inogamov et al., Nanoscale Res. Lett. (2016); Anisimov et al., Quantum Electron. (2017); Inogamov et al., J. Phys.: Conf. Ser. (2018)
- [11] Kuchmizhak et al., Optics Lett. (2015)
- [12] Zhang et al. Chem. Rev. (2017); Xiao et al., Progr. Mat. Sci. (2017)
- [13] Lam et al., Appl. Phys. Lett. (2016)
- [14] Stan et al., Nature Phys. (2016); Stan et al., J. Phys. Chem. Lett. (2016)
- [15] Egorova et al., Com. Phys. Comm., (2019)

1.5. Ожидаемые результаты и их значимость (указываются ожидаемые результаты и их научная и общественная значимость (оценка соответствия запланированных результатов мировому уровню исследований, возможность практического использования запланированных результатов проекта в экономике и социальной сфере))

Данная информация может быть опубликована на сайте Фонда в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет».

на русском языке

А) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазмонных и лазерных ЭМ полей. Широкие возможности создания сложных пространственных структур на поверхности связаны с интерференцией плазмонного и лазерного ЭМ полей (мотивация: изготовление голограмм, метаповерхностей). Плазмонная волна создается тем же лазерным импульсом на пространственной неоднородности плоской поверхности мишени. Вследствие интерференции формируется стоячая волна. В стоячей волне максимумы нагрева находятся в пучностях (горячие гребни). Между гребнями располагаются узлы, в которых нагрева нет. Нас интересуют амплитуда воздействий, которая достаточна для полного или частичного плавления пленки. Длительность импульса меньше времени механического отскока тонкой пленки от подстилающей диэлектрической подложки и меньше времени перетока тепла из пучностей в узлы.

Будет промоделировано формирование купола первым выстрелом. Для этого будет использован ранее разработанный подход, см. ссылки [10] к пункту 1.4 заявки и кино в виде файлов "Au-220.gif", "Au-225.gif" и "Au-226.avi" на сайте <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/index.html>. Будет рассчитано методами численной электродинамики ближнее ЭМ стоячей волны, связанной с куполом. Будет рассчитан нагрев пленки в стоячем поле за счет поглощения ЭМ поля стоячей волны в скин-слое пленки. Будет промоделировано методами молекулярной динамики и SPH как движение пленки, так и тепловые процессы в движущейся пленке. В результате будут получены данные относительно порогов формирования и о характеристиках пространственной структуры, состоящей из купола и отпечатка стоячей волны в пленке и подложке. Результаты будут сопоставлены с экспериментом из ссылки [11] к пункту 1.4 и новыми опытами Владивостокской группы.

Будет понято, что происходит вследствие освещения указанной выше структуры третьим выстрелом. Для этого будет выполнено дополнительное электродинамическое моделирование.

На сегодня в мировой литературе нет ни описания, ни решения такой проблемы. Это обусловлено трудностями

создания физической модели и численной схемы, которая сопрягает электродинамический расчет с тепло-гидро-физическим моделированием. От разработки проблемы есть существенная польза, связанная с технологиями создания метаповерхностей и голограмм.

Будет объяснено формирование радиальной гофрировки на куполах, см. пример, показанный на рис. 1 (здесь и далее - рисунок в приложенном п.4.13 файле 1).

Б) Действие вихревых пучков.

Относительно недавно аудитория, работающая в области лазерных применений, была в достаточной мере шокирована работами [5] (см. литературу к п. 1.4; несколько статей в Nature) по вихревым пучкам с острой фокусировкой (т.е. с размером пятна на облучаемой мишени порядка длины волны). Типичные образования в виде закрученных спиралевидных острий показаны на рис. 2. Авторы работ из группы проф. Т. Омацу увязывают формирование хиральных структур с угловым моментом, приносимым фотонами вихревого пучка. Причем при создании подобных закрученных острий авторы используют лазеры с разной длительностью импульса и разные мишени. Но никаких количественных расчетов, которые бы объясняли происхождение структур, на сегодня не имеется. В проекте будет создана теория, найдено объяснение феномену, решена эта задача и проведены численные расчеты. Результаты будут сопоставлены с опытами, которые ведутся в ФИАНе в отделении проф. А.А. Ионина.

Работа представляется практически значимой. Она представляет собой новый вариант фундаментальной проблемы, относящейся к взаимодействию лазерного излучения с веществом. Такая вихревая обработка открывает широкие дополнительные технологические возможности: фильтрация молекул на базе их хиральности, формирование хиральных плазмонных устройств (освещение структуры возвращает в отраженном свете вихревую волну), создание высокочувствительных сенсоров и др. см. [5] в п. 1.4.

В) Образование наночастиц при абляции в жидкость.

Будет решена весьма трудная проблема об абляции металла в жидкость. Эта проблема актуальна в силу ее востребованности во многих приложениях, см. обзоры [12] в списке литературы к пункту 1.4; по проблеме проводятся международные конференции, см. сайт конференции ANGEL этого года: <http://angel-conference.org/en>. В настоящее время имеются только самые первые попытки решения данной проблемы, важной для оптимизации очень затратных (в смысле стоимости) технологий [12] лазерной фабрикации наночастиц. Эти попытки покрывают только или начальную (см. [6] в пункте 1.4), или конечную (см. [13] в п.1.4) стадии имеющих место процессов.

В работе по проекту будет получено исчерпывающее сквозное решение, которое охватывает начальную стадию, следует за развитием явлений на нескольких промежуточных стадиях и непрерывно переходит на стадию парообразования в горячем приконтактном слое жидкости с возникновением парового пузырька, его расширением, остановкой и началом возвратного движения, приводящего к сжатию пузырька. Успех такой работы сильно помог бы группам, занимающимся фабрикацией наночастиц. Расчеты сначала будут выполнены для случая воды. Будут использованы детальная информация, имеющаяся в литературе по свойствам воды.

Г) Лазерная фрагментация жидких капель и струй.

Очень сложными являются задачи о фрагментации жидких микрокапель путем лазерного воздействия. Трудности связаны с богатой физикой (от взаимодействия излучения и создания экстремальных условий по температуре и давлению до капиллярных явлений) и резко нестационарным трехмерным характером течений. Причем структура течения иерархическая, покрывает несколько порядков во времени и в пространстве: от быстрых до медленных процессов и по пространственной шкале от порядка размера капли до мельчайших фрагментов дробления. У нас есть положительный опыт решения проблемы, см. ссылку [7] в п. 1.4.

В проекте будет решена задача о воздействии тонким цилиндрическим пучком жесткого рентгена на микрокаплю воды или на жидкую струю. Диаметр пучка 1 мкм, размер капли и диаметр струи – несколько десятков мкм. Постановка задачи показана на рис. 3 в файле 1 приложенном 4.13.

Типичные данные опытов, проведенных на Стэнфордском ускорителе (SLAC) на рентгеновском лазере на свободных электронах Linac Coherent Light Source (LCLS), показаны на рис. 4. Использован прибор Coherent X-ray Imaging (CXI). Рисунок взят из статьи Stan et al., J. Phys. Chem. Lett. V. 7(11), 2055–2062 (2016).

Рис. 4 иллюстрирует картину разлета и фрагментации жидкой капли воды после ультракороткого (30 фс) воздействия пучка жесткого рентгена (8 кэВ).

Для решения этой проблемы будет модифицирован комплекс программ и добавлены новые подходы, как в физике, так и в используемых алгоритмах. По физике речь идет об описании взаимодействия рентгеновского пучка и в описании двухтемпературных явлений. Большой опыт исследования рентгеновских воздействий в коллективе имеется [1]. То же относится к двухтемпературным моделям [2]. В алгоритм SPH будут встроены подпрограммы с рентгеновской физикой и двухтемпературными эффектами, а также детальные сведения об уравнении состояния воды.

Кроме проблемы с жестким импульсным рентгеном и каплей воды, будут продолжены исследования по капле олова. Предстоит заменить уравнение состояния Ми-Грюнайзена, применявшееся в работе [7] (см. литературу к п. 1.4), на

табличное уравнение состояния.

Д) Абляция тугоплавких металлов.

Первым в заявке в разделе по тугоплавким веществам является пример с рутением. Это важный конструкционный материал, который применяется в рентгеновской оптике. Поэтому необходимо исследовать его поведение в различных режимах облучения.

Будет создан потенциал межатомного взаимодействия рутения. Будет разработано уравнение состояния рутения с учетом двухтемпературных эффектов. Для разработки потенциала и для создания уравнения состояния будут проведены DFT (density functional theory) расчеты. Они будут выполнены с помощью пакетов квантово-механических вычислений (VASP, Elk и др.). В таких расчетах определяется холодная кривая рутения. Она необходима для построения потенциала межатомного взаимодействия методом согласования по стрессу (stress-matching). В DFT вычислениях будут определены двухтемпературные эффекты. Для этого будет выполнена серия расчетов по электронной температуре, в которых в ГПУ кристалле рутения возбуждается электронная подсистема до заданной температуры. В результате определяются электронные вклады в давление и внутреннюю энергию, и находится электронная теплоемкость. Эти величины являются нетривиальными функциями плотности и температуры. Их нельзя аппроксимировать функциями, которые соответствуют свободному Ферми-газу.

Далее будут выполнены двухтемпературные гидродинамические и молекулярно-динамические расчеты. Работа будет вестись совместно с экспериментом. Будут рассмотрены ультракороткие воздействия лазеров с разной длиной волны от оптического до жесткого ультрафиолета и до жесткого рентгена под разными углами падения. Нашим коллективом начаты предварительные работы по данному направлению см. [3].

Е) Лазерное плавление порошков.

Важной и сложной является проблема плавления порошков с помощью лазерного пучка. Важность проблемы связана с современными технологиями трехмерной печати изделий. При таком подходе некоторые трудные вопросы, относящиеся к изготовлению изделий сложной формы, снимаются, см. п. 1.4. Изготовление изделий путем плавления порошков оказывается дешевле и технически проще, чем традиционные методики, связанные с отливками. С другой стороны исследования в этой области на сегодня находятся в начальном состоянии. Анализируется механика сыпучих сред (soft matter) [4,5] в связи с вопросом наполнения камеры порошком до плавления. А вот проблема плавления фактически остается нерешенной.

Пока исследователи рассматривают задачи о озерце расплава (melting pool), говорят про термокапиллярную конвекцию, вызванную зависимостью коэффициента поверхностного натяжения от температуры (эффект Марангони). При этом вопрос о плавлении собственно порошка остается неисследованным. Здесь нельзя применять постановку в духе задачи Стефана, поскольку среда не является однородной.

В нашем коллективе есть опыт решения задач метания порошков ударной волной и опыт анализа ударной компрессии пористых сред. Но задача о плавлении стоит особняком. Давления относительно небольшие, ударная компактификация места не имеет. Необходимо сосредоточиться на термодинамике и кинетике плавления, на тепловых эффектах, а затем на вопросах ре-кристаллизации расплава. По проблеме затвердевания жидкой фазы в нашей группе выполнено достаточно много работ.

В проекте будет решена задача о плавлении порошка металлических микрочастиц лазерным импульсом.

Ж) Вычислительная физика, крупномасштабное высокопроизводительное численное моделирование.

Важнейшую роль в исполнении проекта будут играть вычислительные методики. В нашем распоряжении мощные эффективные гидродинамические и молекулярно-динамические коды. В работе по проекту эти коды будут совершенствоваться и наполняться новой физикой. Развитие кодов само по себе является практически важной задачей. Будут развиты и применены:

(1) одномерная двухтемпературная гидродинамическая программа в лагранжевых координатах с полной физикой (поглощение, теплопроводность, электрон-ионный обмен) и табличным уравнением состояния, примеры применения см. в [6] в списке литературы к п. 1.4; программа будет использоваться применительно к задачам А, Б, В, Г, Д;

(2) многопроцессорная высокопроизводительная программа молекулярно-динамического моделирования с глубоким распараллеливанием. В настоящее время разработана важная модификация программы, которая включает в себя блок Монте-Карло. Это позволяет моделировать задачи плавления и рекристаллизации металлов. Как известно, в металлах электронная теплопроводность намного превосходит теплопроводность, связанную с тепловым движением ионов.

Разработана методика масштабирования расчета по капиллярному и тепловому безразмерным параметрам. Масштабирование по размерам и времени опирается на полную свободу в задании коэффициента электронной теплопроводности k в блоке Монте-Карло, а также на некоторую свободу в вариации коэффициента поверхностного натяжения σ . Изменение коэффициента k никак не сказывается на характеристиках вещества, моделируемого с помощью EAM (embedded atom method) межатомного потенциала. К этим характеристикам относятся: сжимаемость, коэффициент теплового расширения, энергия образования дефектов, температура плавления, и др.; для построенного

ЕАМ эти значения с хорошей точностью соответствуют табличным значениям для данного вещества.

Это и понятно, п.ч. блок Монте-Карло является внешним по отношению к собственно молекулярно-динамической программе.

Поверхностное натяжение также регулируется в направлении уменьшения по сравнению с реальным значением примерно в два раза. В.В. Жаховским разработаны версии ЕАМ для одного вещества с разными значениями σ . При этом перечисленные выше характеристики (сжимаемость и т.д.) остаются соответствующими табличным величинам. При этом давление насыщенного пара и положение критической точки несколько меняются.

Техника масштабирования позволяет нам существенно расширить пространственно-временные пределы применения молекулярной динамики (МД). Обычно верхним пределом для МД являются размеры порядка микрона и времена порядка десятков наносекунд. МД код с Монте-Карло расширением или без него будет применен при решении всех перечисленных выше проблем А-Е.

(3) Будет разработаны усовершенствованные модели материалов для применения в SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) коде. Этот код будет использоваться при решении проблемы В в списке выше; В – абляция в жидкость. С помощью SPH кода мы снимем ограничения по линейным размерам и по длительности моделируемого периода времени; такие ограничения присущи молекулярно-динамическому коду.

Новые физические модели для SPH расчетов включают в себя табличные уравнения состояния материалов с фазовыми превращениями и модели прочности вещества на разрыв в твердом и жидком состояниях в широком диапазоне температур и скоростей деформации. Будет выполнена большая трудная работа по учету в SPH коде капиллярных эффектов.

Код SPH будет приспособлен для решения проблемы Г-дробление капли или струи воды узким пучком жесткого рентгена из американского XFEL/LCLS (x-ray free electron laser/ Linac Coherent Light Source) лазера на линейном ускорителе SLAC в Стэнфорде.

С помощью модификации кода SPH будет выполнено моделирование задачи о лазерном сильном нагреве и плавлении мезоскопических объектов – порошков микрочастиц (задача Е в списке выше).

(4) Будет разработан новый потенциал межатомного взаимодействия рутения с помощью подхода, комбинирующего метод катящегося многоугольника (симплекс) с Монте-Карло случайными блужданиями. Параметры потенциала подгоняются посредством сравнения по напряжениям (stress-matching). Зависимости напряжений от плотности и ориентации кристалла при низкой температуре (холодные кривые) находятся с помощью DFT (density functional theory) вычислений – см. следующий пункт. Холодные кривые требуются для stress-matching.

(5) Применение пакетов квантово-механических DFT (density functional theory) вычислений VASP, Elk и др. при конструировании межатомного потенциала взаимодействия рутения.

(6) Применение пакетов COMSOL Multiphysics® и LS-DYNA для решения проблем в задачах А, Б.

(7) В качестве важнейшего инструмента в нашем коллективе применяются комбинации программ и основанные на этом гибридные подходы. Это позволяет в приемлемые сроки описать задачи, которые кажутся нерешаемыми на первый взгляд.

Именно так была решена задача о дроблении капли олова лазерным ударом по освещаемой полусфере шаровидной капли, см. работу [7] в списке литературы к п. 1.4. Дело в том, что код SPH, примененный в этой задаче, не может охватить и зону поглощения лазерного излучения порядка 100 нм, и весь радиус капли 50 мкм. Отношение размеров 500, если положить даже 10 SPH частиц на зону поглощения, то число частиц превышает десятки миллиардов.

Это неподъемный объем даже для нашего SPH кода, производительность которого увеличена на много порядков по сравнению с обычными (до 10⁵ частиц) однопроцессорными версиями за счет применения алгоритма с глубоким распараллеливанием и автобалансировкой между вычислительными узлами, см. описание в работе [15] в списке литературы к п. 1.4. Обычная загрузка для нашей многопроцессорной версии составляет десятки миллионов частиц.

Поэтому был применен гибридный подход, при котором абсорбция в зоне поглощения, формирование волны сжатия и распространение ее в толщу капли рассчитывалось отдельно. А затем полученное поле гидродинамических переменных переносилось в SPH код.

Другой пример эффективного гибридного подхода описан в работах [10] в списке литературы к п. 1.4. Была создана физическая модель, которая позволила нам использовать комбинацию из лагранжевой двухтемпературной гидродинамической программы (1) и МД-МК (молекулярная динамика и Монте-Карло) программы (2) для решения проблемы лазерного блистеринга тонкопленочных покрытий. В результате была решена практически весьма значимая задача о лазерном формировании метаповерхностей (см. [1] в п. 1.4) за счет создания массивов микро- нанокуполов.

Аналогичные приемы будут применены при решении заявленных выше проблем А-Е.

Литература к п. 1.5

[1] Предыдущие работы коллектива по рентгеновским источникам

A.Ya. Faenov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, V.A. Khokhlov, K. Nishihara, Y. Kato, M. Tanaka, T.A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, T. Nakamura, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, Low-threshold ablation of dielectrics irradiated by picosecond soft x-ray laser pulses, *Appl. Phys. Lett.* V. 94, 231107 (2009);

N.A. Inogamov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovskii, Yu.V. Petrov, I.Yu. Skobelev, K. Nishihara, Y. Kato, M. Tanaka, T.A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Spallative Ablation of Metals and Dielectrics, *Contrib. Plasma Phys.*, V. 49(7-8), 455-466 (2009);

N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, A.Y. Faenov, V.A. Khokhlov, V.V. Shepelev, I.Y. Skobelev, Y. Kato, M. Tanaka, T.A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, Y.V. Petrov, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Spallative ablation of dielectrics by x-ray laser, *Appl. Phys. A* V. 101(1), 87-96 (2010); arXiv:0912.3184 [physics.optics];

M. Ishino, A.Ya. Faenov, M. Tanaka, N. Hasegawa, M. Nishikino, S. Tamotsu, T.A. Pikuz, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, I.Yu. Skobelev, V.E. Fortov, V.A. Khokhlov, V.V. Shepelev, T. Ohba, T. Kaihori, Y. Ochi, T. Imazono, T. Kawachi, Nanoscale surface modifications and formation of conical structures at aluminum surface induced by single shot exposure of soft x-ray laser pulse, *J. Appl. Phys.*, V. 109, 013504 (2011) [6 pages];

N.A. Inogamov, A.Ya. Faenov, V.V. Zhakhovskii, I.Yu. Skobelev, V.A. Khokhlov, Y. Kato, M. Tanaka, T.A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, Yu.V. Petrov, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Interaction of short laser pulses in wavelength range from infrared to x-ray with metals, semiconductors, and dielectrics, *Contrib. Plasma Phys.*, V. 51, No. 4, 361 – 366 (2011);

Y. Cherednikov, N.A. Inogamov, H.M. Urbassek, Atomistic modeling of ultrashort-pulse ultraviolet laser ablation of a thin LiF film, *J. Opt. Soc. Am. B*, V. 28(No. 8) 1817-1824 (2011);

N.A. Inogamov, A.Ya. Faenov, V.V. Zhakhovskiy, T.A. Pikuz, I.Yu. Skobelev, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, V.V. Shepelev, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Y. Fukuda, M. Kando, T. Kawachi, M. Nagasono, H. Ohashi, M. Yabashi, K. Tono, Y. Senda, T. Togashi, and T. Ishikawa, Two-Temperature Warm Dense Matter Produced by Ultrashort Extreme Vacuum Ultraviolet-Free Electron Laser (EUV-FEL) Pulse, *Contrib. Plasma Phys.*, V. 51, No. 5, 419 – 426 (2011);

Н.А. Иногамов, С.И. Анисимов, В.В. Жаховский, А.Ю. Фаенов, Ю.В. Петров, В.А. Хохлов, В.Е. Фортов, И.Ю. Скобелев, Ю. Като, Т.А. Пикуз, В.В. Шепелев, Ю. Фукуда, М. Танака, М. Кишимото, М. Ишино, М. Нишикино, М. Кандо, Т. Кавачи, М. Нагасоно, Н. Охаша, М. Ябаша, К. Тано, Ю. Сенда, Т. Тогаши, Т. Ишикава, Абляция диэлектриков под действием коротких импульсов рентгеновских плазменных лазеров и лазеров на свободных электронах, *Оптический Журнал* т. 78, вып. 8, 5-15 (2011);

N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, V.V. Zhakhovskiy, A.Ya. Faenov, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, V.E. Fortov, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, I.Yu. Skobelev, Y. Kato, T.A. Pikuz, V.V. Shepelev, Y. Fukuda, M. Tanaka, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, M. Kando, T. Kawachi, M. Nagasono, H. Ohashi, M. Yabashi, K. Tono, Y. Senda, T. Togashi, T. Ishikawa, Ablation by short optical and X-ray laser pulses, *Proc. SPIE*, V. 7996, 79960T (2011);

Ya. Cherednikov, N.A. Inogamov, and H.M. Urbassek, Influence of defects on extreme ultraviolet laser ablation of LiF, *Phys. Rev. B* V. 88, 134109 (2013);

M. Ishino, A. Faenov, M. Tanaka, S. Tamotsu, T. Pikuz, N. Hasegawa, M. Nishikino, N. Inogamov, I. Skobelev, V. Fortov, G. Norman, S. Starikov, V. Stegailov, T. Kaihori, T. Kawachi, and M. Yamagiwa, Nano-meter scale modifications on material surfaces induced by soft x-ray laser pulse irradiations, *X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications X*, edited by Annie Klisnick, Carmen S. Menoni, *Proc. of SPIE* Vol. 8849, 88490F (2013);

N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, Yu.N. Emirov, K.V. Khichshenko, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, M. Ishino, M. Kando, N. Hasegawa, M. Nishikino, P.S. Komarov, B.J. Demaske, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, T. Kawachi, I.I. Oleynik, Ultrafast lasers and solids in highly excited states: results of hydrodynamics and molecular dynamics simulations, *J. Phys.: Conf. Ser.* v. 510, 012041 (2014);

M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, and M. Yamagiwa, Very low electron temperature in warm dense matter formed by focused picosecond soft x-ray laser pulses, *J. Appl. Phys.* V. 116, 183302 (2014). doi: 10.1063/1.4901943;

Inogamov, N.A., Zhakhovskiy, V.V., Ashitkov, S.I., Emirov, Yu.N., Faenov, A.Ya., Petrov, Yu.V., Khokhlov, V.A., Ishino, M., Demaske, B.J., Tanaka, M., Hasegawa, N., Nishikino, M., Tamotsu, S., Pikuz, T.A., Skobelev, I.Y., Ohba, T., Kaihori, T., Ochi, Y., Imazono, T., Fukuda, Y., Kando, M., Kato, Y., Kawachi, T., Anisimov, S.I., Agranat, M.B., Oleynik, I.I., Fortov, V.E., Surface nanodeformations caused by ultrashort laser pulse, *Engineering Failure Analysis*, V. 47, 328-337 (2015);

Y. Rosandi, F.C. Kabeer, Y. Cherednikov, E.S. Zijlstra, M.E. Garcia, N.A. Inogamov, and H.M. Urbassek, Melting of Al Induced by Laser Excitation of 2p Holes, *Mater. Res. Lett.* V. 3(3), 149-155 (2015);

N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, D.K. Il'nitskiy, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eyama, N. Kakimoto, T. Tomita, M. Baba, Y. Minami, T. Suemoto, and T. Kawachi, Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump--X-ray probe experiment, *Appl. Phys. B* V. 119, 413-419 (2015).

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, X-Ray Lasers 2016, Proceedings of the 15th International Conference on X-Ray Lasers, Editors: Kawachi, T., Bulanov, S.V., Daido, H., Kato, Y. (Eds.);

M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, M. Yamagiwa, "Low electron temperature in ablating materials formed by picosecond soft x-ray laser pulses," Proc. SPIE 9589, X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications XI, 958904 (September 22, 2015); doi:10.1117/12.2186053;

Masahiko Ishino, Nail A. Inogamov, Satoshi Tamotsu, Vasily V. Zhakhovskiy, Noboru Hasegawa, Igor Yu. Skobelev, Anatoly Ya. Faenov, Tatiana A. Pikuz, Katsuhiko Mikami, Tetsuya Kawachi, Masaharu Nishikino, Study of damage structure formation on aluminum film targets by picosecond soft X-ray laser ablation around threshold region, Applied Physics A 124:649 (8 pages) (2018) <https://doi.org/10.1007/s00339-018-2072-9>;

N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovskiy and Yu.V. Petrov, Energy redistribution between layers in multi-layered target heated by x-ray pulse, Journal of Physics: Conf. Series V. 946, 012009 (2018) doi :10.1088/1742-6596/946/1/012009

[2] Предыдущие работы коллектива по физике двухтемпературных явлений (несколько избранных работ за последние годы)

N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, V.V. Zhakhovskiy, V.A. Khokhlov, B.J. Demaske, S.I. Ashitkov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, I.I. Oleynik, Two-temperature thermodynamic and kinetic properties of transition metals irradiated by femtosecond lasers, Intern. Symp. High Power Laser Ablation 2012; AIP Conf. Proc. Vol. 1464, 593-608 (2012);

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

Ю.В. Петров, Н.А. Иногамов, Снятие моттовского межзонного s-d увеличения электросопротивления никеля и платины за счет возбуждения электронов фемтосекундным лазерным импульсом, Письма ЖЭТФ Т. 98, 316-322 (2013);

K.P. Migdal, Yu.V. Petrov, and N.A. Inogamov, Kinetic coefficients for d-band metals in two-temperature states created by femtosecond laser irradiation, Fundamentals of Laser-Assisted Micro- and Nanotechnologies 2013, edited by Vadim P. Veiko, Tigran A. Vartanyan, Proc. of SPIE Vol. 9065, 906503 (2013);

D.K. Il'nitsky, V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, Yu.V. Petrov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, and S.I. Anisimov, Two-temperature hydrodynamics of laser-generated ultrashort shock waves in elasto-plastic solids, J. Phys.: Conf. Ser. v. 500, 032021 (2014);

Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse, Appl. Phys. B V. 119, 401--411 (2015);

Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, and K.P. Migdal, Two-temperature Heat Conductivity of Gold, PIERS Proceed. (ISSN 1559-9450), Prague, Czech Republic, July 6-9, 2015, pp. 2431-2435 (2015);

K.P. Migdal, D.K. Il'nitsky, Yu.V. Petrov, and N.A. Inogamov, Equations of state, energy transport and two-temperature hydrodynamic simulations for femtosecond laser irradiated copper and gold, J. Phys.: Conf. Series V. 653, 012086 (2015);

Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, K. P. Migdal, V. A. Khokhlov, and K. V. Khishchenko, Thermal conductivity of condensed gold in states with the strongly excited electron subsystem, J. Phys.: Conf. Series V. 653, 012087 (2015);

K.P. Migdal, Yu.V. Petrov, D.K. Il'nitsky, V.V. Zhakhovskiy, N.A. Inogamov, K.V. Khishchenko, D.V. Knyazev, P.R. Levashov, Heat conductivity of copper in two-temperature state, Appl. Phys. A V. 122, 408 (5 pages) (2016);

Ю.В. Петров, К.П. Мигдал, Н.А. Иногамов, С.И. Анисимов, "Процессы переноса в металле с горячими электронами, возбужденными лазерным импульсом" Письма ЖЭТФ т. 104, вып. 6, стр. 446-454 (2016);

Petrov Y.V., Mokshin A.V., Galimzyanov B.N., Inogamov N.A. Electrical resistivity and thermal conductivity of liquid aluminum in the two-temperature state IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series V. 946, 012096 (2018);

[3] <https://www.usasymposium.com/hpla/agenda.php> Simulations of Damage of Ru Thin Films Induced by Single-Shot fs EUV FEL Pulses, Mr. Igor Milov, MESA+ Institute for Nanotechnology, University of Twente;

V.A. Khokhlov, I. Milov, I.A. Makhotkin, V.V. Zhakhovskiy, D.K. Il'nitsky, K.P. Migdal, V.V. Shepelev, Y.V. Petrov, and N.A. Inogamov, Dynamics of ruthenium mirror under action of soft x-ray or optical ultrashort laser pulse, Journal of Physics: Conf. Series, accepted

[4] H. Mindt, M. Megahed, N. Lavery, M. Holmes, S. Brown, Powder Bed Layer Characteristics: The Overseen First-Order Process Input, Metallurgical & Materials Transactions. Part A, V. 47, Issue 8, 3811-3822 (2016)

[5] Christoph Meier, Reimar Weissbach, Johannes Weinberg, Wolfgang A. Wall, A. John Hart, Modeling and Characterization of Cohesion in Fine Metal Powders with a Focus on Additive Manufacturing Process Simulations, arXiv:1804.06816v3 [cs.CE] 25 May 2018

A) Spatially distributed heating due to a combination of plasmon and laser EM fields.

The wide possibilities for creating complex spatial structures on the surface are associated with the interference of the plasmon and laser EM fields (motivation: making holograms and meta-surfaces). The plasmon wave is created by the same laser pulse on the spatial inhomogeneity of the flat surface of the target. Due to interference, a standing wave is formed. In the standing wave, the heating maximums are in the antinodes (hot ridges). There are nodes between the ridges, there is no heating in nodes. We are interested in the amplitude of the laser action, which is sufficient to fully or partially melt the film. The pulse duration is less than the time of mechanical rebound of a thin film from the underlying dielectric substrate and less than the time of heat transfer from the antinodes into the nodes.

The formation of the dome by the first shot will be simulated. For this, the previously developed approach will be used, see references [10] to section 1.4 of the application and the movies "Au-220.gif", "Au-225.gif" and "Au-226.avi" on the site <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/index.html>. Near EM field of a standing wave associated with a laser, surface and dome will be calculated by numerical methods of electrodynamics. The heating of the film in the standing wave due to the absorption of the EM field of the standing wave in the skin layer of the film will be calculated. Both film movement and thermal processes in a moving film will be modeled by using molecular dynamics and SPH method. As a result, data will be obtained on the formation thresholds and on the characteristics of the spatial structure consisting of the dome and the standing wave imprint in the film and substrate. The results obtained will be compared with the results of experiments from reference [11] to section 1.4 and the new experiments of the Vladivostok group.

It will be understood what happens as a result of lighting the above structure with the third shot. For this, additional electrodynamic modeling will be performed.

Today in the world literature there is neither a description nor a solution to such a problem. This is due to the difficulties of creating a physical model and a numerical scheme that matches the electrodynamic calculation with thermal-hydro-physical modeling. From the decision of the problem there are significant benefits associated with the creation of technologies for meta-surfaces and holograms.

The formation of radial guffing on the domes will be explained, see the example shown in fig. 1 (Hereinafter - figure in the attached to the application p. 4.13 file 1).

B) Action of vortex beams.

Relatively recently, the audience working in the field of laser applications was quite shocked by the work [5] (see literature to section 1.4; several Nature articles) on vortex beams with acute focusing (i.e., spot size on an irradiated target about the wavelength). Typical formations in the form of twisted spiral tips are shown in fig. 2 in file attached to the application. The authors of works from the group of prof. T. Omatsu associate the formation of chiral structures with the angular momentum brought by the photons of the vortex beam. Moreover, when creating such twisted tips, the authors use lasers with different pulse durations and different targets. But no quantitative calculations that would explain the origin of the structures are not available today. The project will create a theory, find an explanation for the phenomenon, solve this problem and carry out numerical calculations. The results will be compared with the experiments that are conducted in the FIAN in the department of prof. A.A. Ionin.

The work is practically significant. It represents a new variant of the fundamental problem related to the interaction of laser radiation with matter. Such a vortex treatment opens wide additional technological possibilities: filtering of molecules based on their chirality, the formation of chiral plasmon devices (illumination of the structure returns a vortex wave in reflected light), the creation of highly sensitive sensors, etc., see [5] in section 1.4.

C) The formation of nanoparticles during ablation into a liquid.

A very difficult problem on the ablation of a metal into a liquid will be solved. This problem is relevant due to its importance in many applications, see the reviews [12] in the list of references to section 1.4; International conferences are held on the problem; see this year's ANGEL conference website: <http://angel-conference.org/en>. Currently, there are only the very first attempts to solve this problem, which is important for optimizing the very costly (in the financial term) technologies [12] of laser fabrication of nanoparticles. These attempts cover only either the initial (see [6] in section 1.4) or the final (see [13] in 1.4) stages of the processes taking place.

In the project, an exhaustive end-to-end solution will be obtained that covers the initial stage, follows the development of phenomena at several intermediate stages and continuously moves to the vaporization stage in the hot contact layer of the liquid with the appearance of the vapor bubble, its expansion, stop of expansion and the beginning of the return movement leading to the compression of the bubble. The success of such work would greatly help the groups involved in the fabrication of nanoparticles. Calculations will first be performed for the case of water. Detailed information available in the literature on water properties will be used.

In addition to problems with a hard impulse X-ray and a drop of water, research on a drop of tin will be continued. It is necessary to replace the equation of state of Mi-Grüneisen, used in [7] (see the literature for § 1.4), with a tabular equation of state.

D) Laser fragmentation of liquid droplets and jets.

The problems of fragmentation of liquid microdroplets by laser action are very complex. Difficulties are associated with rich physics (from the interaction of radiation with the target matter and the creation of extreme conditions in temperature and pressure to capillary phenomena) and the sharply unsteady three-dimensional nature of flows. Moreover, the flow structure is hierarchical, covers several orders of magnitude in time and space: from fast to slow processes and on a spatial scale from the order of the size of a drop to the smallest fragments of fragmentation. We have a positive experience in solving the problem, see reference [7] in section 1.4.

The project will solve the problem of the impact of a thin cylindrical beam of hard X-rays on a microdroplet of water or a liquid jet. The beam diameter is 1 μm , the size of the droplet and the diameter of the jet are several tens of μm . Task setting is shown in fig. 3. Typical data of the experiments conducted by the Stanford accelerator Linac Coherent Light Source are shown in fig. 4. Coherent X-ray Imaging (CXI) instrument was used.

To solve the problem presented in Fig. 3 and 4, the complex of programs will be modified and new approaches will be added, both in physics and in the algorithms used. In physics, we are talking about the description of the interaction of the X-ray beam and in the description of two-temperature phenomena. There is extensive experience in the study of X-ray effects in a team [1]. Also applies to two-temperature models [2]. Subroutines with X-ray physics and two-temperature effects, as well as detailed information about the equation of state of water, will be inserted into the SPH algorithm.

E) Ablation of refractory metals.

The first in the application in the section on refractory substances is the example of ruthenium. This is an important structural material used in X-ray optics. Therefore, it is necessary to investigate its behavior in different modes of irradiation.

A potential of interatomic interaction of ruthenium will be created. An equation of state for ruthenium will be developed taking into account two-temperature effects. DFT (density functional theory) calculations will be carried out to develop the potential and to create the equation of state. They will be performed using quantum-mechanical computation packages (VASP, Elk, etc.). In such calculations, the cold ruthenium curve is determined. It is necessary for building the interatomic interaction potential using the stress matching algorithm. In DFT calculations, two-temperature effects will be defined. For this, a series of calculations will be performed on the electron temperature, in which the electron subsystem is excited to a given temperature in the hcp ruthenium crystal. As a result, electronic contributions to pressure and internal energy are determined, and the electronic heat capacity is found. These values are non-trivial functions of density and temperature. They cannot be approximated by functions that correspond to the free Fermi gas.

Next, two-temperature hydrodynamic and molecular-dynamic calculations will be performed. Work will be conducted in conjunction with the experiment. Ultrashort action of lasers with different wavelengths from optical to hard ultraviolet and hard x-rays at different angles of incidence will be considered. Our team has begun preliminary work in this area [3].

F) Laser melting of powders.

The problem of melting powders using a laser beam is an important and complex. The importance of the problem is connected with modern technologies of three-dimensional printing of objects. With this approach, some difficult problems related to the manufacture of objects of complex shape are removed, see section 1.4. Manufacturing of objects by melting powders is cheaper and technically easier than traditional methods associated with castings. On the other hand, research in this area is currently in its initial state. The mechanics of flowing media (soft matter) [4,5] is analyzed in connection with the process of filling the chamber with powder before melting. But the problem of melting actually remains unresolved.

While researchers are considering problems on the melting pool, they speak about thermocapillary convection caused by the temperature dependence of the surface tension coefficient (the Marangoni effect). In this case, the question of melting the powder itself remains unexplored. Here it is impossible to apply the statement as in the Stefan problem, since the medium is not homogeneous.

Our team has experience in solving problems of throwing powders with a shock wave and experience in analyzing of shock compression of porous media. But the melting problem stands alone. The pressure is relatively small, the shock compactification has no place. It needs to focus on thermodynamics and melting kinetics, on thermal effects, and then on the problem of melt recrystallization. A lot of work has been done on the problem of solidification of the liquid phase in our group.

The project will solve the problem of melting of a powder of metal microparticles with a laser pulse.

G) Computational physics, large-scale high-performance numerical simulation.

Computational techniques play the most important role in the execution of the project. We have powerful effective hydrodynamic and molecular dynamics codes. In the project, these codes will be improved and filled with new physics. The development of codes in itself is a practically important task. Next methods will be developed and applied:

(1) one-dimensional two-temperature hydrodynamic program in Lagrangian coordinates with complete physics (absorption, thermal conductivity, electron-ion exchange) and a tabular equation of state; for examples of application, see [6] in the list of references to § 1.4; the program will be used in relation to tasks A, B, C, D, E;

(2) multiprocessor high-performance program for molecular dynamics simulation with deep parallelization. At present, an important modification of the program has been developed, which includes the Monte Carlo block. This allows us to simulate the problem of melting and recrystallization of metals. As is known, in metals the electron thermal conductivity is much higher than the thermal conductivity associated with the thermal motion of ions.

A method has been developed for scaling calculation by capillary and thermal dimensionless parameters. Scaling in size and time relies on complete freedom in setting the coefficient of electron thermal conductivity κ in the Monte Carlo block, as well as on some freedom in varying the surface tension coefficient σ . A change in the coefficient κ has no effect on the characteristics of the substance modeled by the EAM (embedded atom method) of the interatomic potential. These characteristics include: compressibility, coefficient of thermal expansion, energy of formation of defects, melting point, and others; for the constructed EAM, these values with good accuracy correspond to the table values for this substance.

This is understandable, since the Monte Carlo block is external to the molecular dynamics program itself.

The surface tension is also adjustable in the direction of decreasing compared to the actual value approximately two times. V.V. Zhakhovsky developed EAM versions for one substance with different σ values. At the same time, the characteristics listed above (compressibility, etc.) remain in accordance with the table values. The pressure of saturated steam and the position of the critical point vary somewhat.

The scaling technique allows us to significantly expand the spatial-temporal limits of the application of molecular dynamics (MD). Usually, the upper limit for MD is sizes of the order of microns and times of the order of tens of nanoseconds. The MD code with a Monte-Carlo extension or without it will be applied when solving all the problems listed above, A – F.

(3) Improved material models will be developed for use in the SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) code. This code will be used to solve problem C in the list above; C - ablation into fluid. Using the SPH code, we will remove restrictions on linear sizes and on the duration of the simulated time period; such limitations are inherent in molecular dynamics code.

New physical models for SPH calculations include tabular equations of state of materials with phase transformations and models of substance tensile strength in solid and liquid states in a wide range of temperatures and strain rates. A lot of hard work will be done to account for capillary effects in the SPH code.

The SPH code will be adapted to solve problem D; D is a splitting of a drop or jet of water by a narrow beam of hard x-rays from the American XFEL / LCLS (X-ray free electron laser / Linac Coherent Light Source) SLAC laser at Stanford.

By modifying the SPH code, the problem of laser heating and melting of mesoscopic objects – powders of microparticles (problem E in the list above) will be modeled.

(4) Use of packages of quantum-mechanical programs of the density functional theory and the simplex method for constructing the interatomic potential in ruthenium.

A new potential of the interatomic interaction of ruthenium will be developed using an approach combining the rolling polygon method (simplex method) with Monte Carlo with random walks. The parameters of the potential are determined from comparison with stresses (stress-matching), calculated in dependence on the density and orientation of the crystal at low temperature (cold curves) using the packages of quantum-mechanical programs of the density functional theory VASP, Elk, Abinit.

(5) Use of COMSOL Multiphysics © and LS-DYNA packages for calculating plasmon and laser electromagnetic fields and vortex electromagnetic beams in the problems A, B.

(6) As a major tool in our team, combinations of programs and hybrid approaches based on them are used. This allows in a reasonable time to describe the tasks that seem unsolvable at first glance.

This is how the problem of crushing a drop of tin by a laser stroke at the illuminated hemisphere of a spherical drop was solved; see [7] in the list of references to section 1.4. The fact is that the SPH code used in this problem cannot cover the laser absorption zone of the order of 100 nm and the entire radius of a drop of 50 μm . The size ratio is 500; if we even put 10 SPH particles per absorption zone, then the number of particles exceeds tens of billions.

This is an unaffordable number even for our SPH code, whose performance has been increased by many orders of magnitude compared to the usual (up to 10⁵ particles) single-processor versions due to the use of an algorithm with deep parallelization and auto-balancing between compute nodes, see the description in [15] in the list of references to section 1.4. Normal loading for our multiprocessor version is tens of millions of particles.

Therefore, a hybrid approach was applied in which the absorption in the absorption zone, the formation of a compression wave and its propagation into the drop interior were calculated separately. And then the resulting field of hydrodynamic variables was transferred to the SPH code.

Another example of an effective hybrid approach is described in [10] in the list of references to section 1.4. A physical model was created that allowed us to use a combination of the Lagrangian two-temperature hydrodynamic program (1) and the MD-MC (molecular dynamics and Monte Carlo) program (2) to solve the problem of laser blistering of thin-film coatings. As a result, the practically very significant problem of laser formation of meta-surfaces (see [1] in section 1.4) was solved by

creating arrays of micro-nano-caps.

Similar techniques will be applied when solving the above problems A-F.

H) Characteristics of silicon irradiated by laser

See form 4

I) New approaches to the calculation of the coefficient of electron-ion interaction in metals

See form 4

Literature to 1.5

[1] Previous publications of the team on X-ray sources

A.Ya. Faenov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, V.A. Khokhlov, K. Nishihara, Y. Kato, M. Tanaka, T.A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, T. Nakamura, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, Low-threshold ablation of dielectrics irradiated by picosecond soft x-ray laser pulses, *Appl. Phys. Lett.* V. 94, 231107 (2009);

N.A. Inogamov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovskii, Yu.V. Petrov, I.Yu. Skobelev, K. Nishihara, Y. Kato, M. Tanaka, T.A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Spallative Ablation of Metals and Dielectrics, *Contrib. Plasma Phys.*, V. 49(7-8), 455-466 (2009);

N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, A.Y. Faenov, V.A. Khokhlov, V.V. Shepelev, I.Y. Skobelev, Y. Kato, M. Tanaka, T.A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, Y.V. Petrov, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Spallative ablation of dielectrics by x-ray laser, *Appl. Phys. A* V. 101(1), 87-96 (2010); arXiv:0912.3184 [physics.optics];

M. Ishino, A.Ya. Faenov, M. Tanaka, N. Hasegawa, M. Nishikino, S. Tamotsu, T.A. Pikuz, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, I.Yu. Skobelev, V.E. Fortov, V.A. Khokhlov, V.V. Shepelev, T. Ohba, T. Kaihori, Y. Ochi, T. Imazono, T. Kawachi, Nanoscale surface modifications and formation of conical structures at aluminum surface induced by single shot exposure of soft x-ray laser pulse, *J. Appl. Phys.*, V. 109, 013504 (2011);

N.A. Inogamov, A.Ya. Faenov, V.V. Zhakhovskii, I.Yu. Skobelev, V.A. Khokhlov, Y. Kato, M. Tanaka, T.A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, Yu.V. Petrov, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Interaction of short laser pulses in wavelength range from infrared to x-ray with metals, semiconductors, and dielectrics, *Contrib. Plasma Phys.*, V. 51, No. 4, 361 – 366 (2011);

Y. Cherednikov, N.A. Inogamov, H.M. Urbassek, Atomistic modeling of ultrashort-pulse ultraviolet laser ablation of a thin LiF film, *J. Opt. Soc. Am. B*, V. 28(No. 8) 1817-1824 (2011);

N.A. Inogamov, A.Ya. Faenov, V.V. Zhakhovskii, T.A. Pikuz, I.Yu. Skobelev, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, V.V. Shepelev, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Y. Fukuda, M. Kando, T. Kawachi, M. Nagasono, H. Ohashi, M. Yabashi, K. Tono, Y. Senda, T. Togashi, and T. Ishikawa, Two-Temperature Warm Dense Matter Produced by Ultrashort Extreme Vacuum Ultraviolet-Free Electron Laser (EUV-FEL) Pulse, *Contrib. Plasma Phys.*, V. 51, No. 5, 419 – 426 (2011);

N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovskii, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, V.E. Fortov, I.Yu. Skobelev, Y. Kato, V.V. Shepelev, Y. Fukuda, M. Tanaka, M. Ishino, M. Nishikino, M. Kando, T. Kawachi, M. Kishimoto, M. Nagasono, K. Tano, T. Ishikawa, N. Ohashi, M. Yabashi, T. Togashi, Y. Senda, Ablation of insulators under the action of short pulses of X-ray plasma lasers and free-electron lasers, *J. Opt. Technol.*, V. 78, 473-480 (2011)

N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, V.V. Zhakhovskii, A.Ya. Faenov, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, V.E. Fortov, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, I.Yu. Skobelev, Y. Kato, T.A. Pikuz, V.V. Shepelev, Y. Fukuda, M. Tanaka, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, M. Kando, T. Kawachi, M. Nagasono, H. Ohashi, M. Yabashi, K. Tono, Y. Senda, T. Togashi, T. Ishikawa, Ablation by short optical and X-ray laser pulses, *Proc. SPIE*, V. 7996, 79960T (2011);

Ya. Cherednikov, N.A. Inogamov, and H.M. Urbassek, Influence of defects on extreme ultraviolet laser ablation of LiF, *Phys. Rev. B* V. 88, 134109 (2013);

M. Ishino, A. Faenov, M. Tanaka, S. Tamotsu, T. Pikuz, N. Hasegawa, M. Nishikino, N. Inogamov, I. Skobelev, V. Fortov, G. Norman, S. Starikov, V. Stegailov, T. Kaihori, T. Kawachi, and M. Yamagiwa, Nano-meter scale modifications on material surfaces induced by soft x-ray laser pulse irradiations, *X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications X*, edited by Annie Klisnick, Carmen S. Menoni, *Proc. of SPIE Vol. 8849, 88490F* (2013);

N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, Yu.N. Emirov, K.V. Khichshenko, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, M. Ishino, M. Kando, N. Hasegawa, M. Nishikino, P.S. Komarov, B.J. Demaske, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, T. Kawachi, I.I. Oleynik, Ultrafast lasers and solids in highly excited states: results of hydrodynamics and molecular dynamics simulations, *J. Phys.: Conf. Ser.* v. 510, 012041 (2014);

M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, and M. Yamagiwa, Very low electron temperature in warm dense matter formed by focused picosecond soft x-ray laser pulses, *J. Appl. Phys.* V. 116, 183302 (2014). doi: 10.1063/1.4901943;

Inogamov, N.A., Zhakhovskii, V.V., Ashitkov, S.I., Emirov, Yu.N., Faenov, A.Ya., Petrov, Yu.V., Khokhlov, V.A., Ishino, M., Demaske, B.J., Tanaka, M., Hasegawa, N., Nishikino, M., Tamotsu, S., Pikuz, T.A., Skobelev, I.Y., Ohba, T., Kaihori, T., Ochi, Y.,

Imazono, T., Fukuda, Y., Kando, M., Kato, Y., Kawachi, T., Anisimov, S.I., Agranat, M.B., Oleynik, I.I., Fortov, V.E., Surface nanodeformations caused by ultrashort laser pulse, *Engineering Failure Analysis*, V. 47, 328-337 (2015);

Y. Rosandi, F.C. Kabeer, Y. Cherednikov, E.S. Zijlstra, M.E. Garcia, N.A. Inogamov, and H.M. Urbassek, Melting of Al Induced by Laser Excitation of 2p Holes, *Mater. Res. Lett.* V. 3(3), 149-155 (2015);

N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, D.K. Ilnitsky, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eyama, N. Kakimoto, T. Tomita, M. Baba, Y. Minami, T. Suemoto, and T. Kawachi, Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump--X-ray probe experiment, *Appl. Phys. B* V. 119, 413-419 (2015).

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, *X-Ray Lasers 2016, Proceedings of the 15th International Conference on X-Ray Lasers*, Editors: Kawachi, T., Bulanov, S.V., Daido, H., Kato, Y. (Eds.);

M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, M. Yamagiwa, "Low electron temperature in ablating materials formed by picosecond soft x-ray laser pulses," *Proc. SPIE 9589, X-Ray Lasers and Coherent X-Ray Sources: Development and Applications XI*, 958904 (September 22, 2015);

Masahiko Ishino, Nail A. Inogamov, Satoshi Tamotsu, Vasily V. Zhakhovskiy, Noboru Hasegawa, Igor Yu. Skobelev, Anatoly Ya. Faenov, Tatiana A. Pikuz, Katsuhiko Mikami, Tetsuya Kawachi, Masaharu Nishikino, Study of damage structure formation on aluminum film targets by picosecond soft X-ray laser ablation around threshold region, *Applied Physics A* 124:649 (8 pages) (2018);

N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovskiy and Yu.V. Petrov, Energy redistribution between layers in multi-layered target heated by x-ray pulse, *Journal of Physics: Conf. Series* V. 946, 012009 (2018);

[2] Previous work of the team on the physics of two-temperature phenomena (several selected publications in recent years)

N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, V.V. Zhakhovskiy, V.A. Khokhlov, B.J. Demaske, S.I. Ashitkov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, I.I. Oleynik, Two-temperature thermodynamic and kinetic properties of transition metals irradiated by femtosecond lasers, *Intern. Symp. High Power Laser Ablation 2012; AIP Conf. Proc. Vol. 1464*, 593-608 (2012);

Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, K.P. Migdal, Thermal Conductivity and the Electron– Ion Heat Transfer Coefficient in Condensed Media with a Strongly Excited Electron Subsystem, *JETP Lett.*, V. 97, 20– 27 (2013);

Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, Elimination of the Mott Interband s– d Enhancement of the Electrical Resistance of Nickel and Platinum Owing to the Excitation of Electrons by Femtosecond Laser Pulses, *JETP Letters*, V. 98, 278– 284 (2013);

K.P. Migdal, Yu.V. Petrov, and N.A. Inogamov, Kinetic coefficients for d-band metals in two-temperature states created by femtosecond laser irradiation, *Fundamentals of Laser-Assisted Micro- and Nanotechnologies 2013*, edited by Vadim P. Veiko, Tigran A. Vartanyan, *Proc. of SPIE* V. 9065, 906503 (2013);

D.K. Ilnitsky, V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, Yu.V. Petrov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, and S.I. Anisimov, Two-temperature hydrodynamics of laser-generated ultrashort shock waves in elasto-plastic solids, *J. Phys.: Conf. Ser. V. 500*, 032021 (2014);

Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse, *Appl. Phys. B* V. 119, 401--411 (2015);

Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, and K.P. Migdal, Two-temperature Heat Conductivity of Gold, *PIERS Proceed. (ISSN 1559-9450)*, Prague, Czech Republic, July 6-9, 2015, pp. 2431-2435 (2015);

K.P. Migdal, D.K. Ilnitsky, Yu.V. Petrov, and N.A. Inogamov, Equations of state, energy transport and two-temperature hydrodynamic simulations for femtosecond laser irradiated copper and gold, *J. Phys.: Conf. Series* V. 653, 012086 (2015);

Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, K. P. Migdal, V. A. Khokhlov, and K. V. Khishchenko, Thermal conductivity of condensed gold in states with the strongly excited electron subsystem, *J. Phys.: Conf. Series* V. 653, 012087 (2015);

K.P. Migdal, Yu.V. Petrov, D.K. Ilnitsky, V.V. Zhakhovskiy, N.A. Inogamov, K.V. Khishchenko, D.V. Knyazev, P.R. Levashov, Heat conductivity of copper in two-temperature state, *Appl. Phys. A* V. 122, 408 (5 pages) (2016);

Yu. V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, Transport Processes in a Metal with Hot Electrons Excited by a Laser Pulse, *JETP Lett.*, V. 104, 431-439 (2016);

Petrov Y.V., Mokshin A.V., Galimzyanov B.N., Inogamov N.A. Electrical resistivity and thermal conductivity of liquid aluminum in the two-temperature state *IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series* V. 946, 012096 (2018);

[3] <https://www.usasymposium.com/hpla/agenda.php> Simulations of Damage of Ru Thin Films Induced by Single-Shot fs EUV FEL Pulses, Mr. Igor Milov, MESA+ Institute for Nanotechnology, University of Twente;

V.A. Khokhlov, I. Milov, I.A. Makhotkin, V.V. Zhakhovskiy, D.K. Ilnitsky, K.P. Migdal, V.V. Shepelev, Y.V. Petrov, and N.A. Inogamov, Dynamics of ruthenium mirror under action of soft x-ray or optical ultrashort laser pulse, *Journal of Physics: Conf. Series*, accepted

[4] H. Mindt, M. Megahed, N. Lavery, M. Holmes, S. Brown, Powder Bed Layer Characteristics: The Overseen First-Order Process Input, Metallurgical & Materials Transactions. Part A, V. 47, Issue 8, 3811-3822 (2016)

[5] Christoph Meier, Reimar Weissbach, Johannes Weinberg, Wolfgang A. Wall, A. John Hart, Modeling and Characterization of Cohesion in Fine Metal Powders with a Focus on Additive Manufacturing Process Simulations, arXiv:1804.06816v3 [cs.CE] 25 May 2018

1.6. В состав научного коллектива будут входить:

Несоответствие состава научного коллектива (в том числе отсутствие информации в соответствующих полях формы) требованиям пункта 12 конкурсной документации является основанием недопуска заявки к конкурсу.

10 исполнителей проекта (включая руководителя),

В соответствии с требованиями пункта 12 конкурсной документации от 4 до 10 человек. Вне зависимости от того, в трудовых или гражданско-правовых отношениях исполнители состоят с организацией.

в том числе

5 исполнителей в возрасте до 39 лет включительно,

из них:

2 очных аспирантов, адъюнктов, интернов, ординаторов, студентов.

1.7. Планируемый состав научного коллектива с указанием фамилий, имен, отчеств (при наличии) членов коллектива, их возраста на момент подачи заявки, ученых степеней, должностей и основных мест работы, формы отношений с организацией (трудовой договор, гражданско-правовой договор) в период реализации проекта

1. Анисимов Сергей Иванович, 83 года, доктор физ.-мат. наук, член-корр. РАН, г.н.с. ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, трудовой договор, руководитель проекта;

2. Иногамов Наиль Алимович, 67 лет, доктор физ.-мат. наук, в.н.с. ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, трудовой договор;

3. Петров Юрий Васильевич, 69 лет, доктор физ.-мат. наук, с.н.с. ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, трудовой договор;

4. Хохлов Виктор Александрович, 65 лет, кандидат физ.-мат. наук, н.с. ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, трудовой договор;

5. Жаховский Василий Викторович, 55 лет, кандидат физ.-мат. наук, в.н.с., Центр фундаментальных и прикладных исследований (ЦФПИ) ФГУП "ВНИИА", трудовой договор;

до 39 лет:

6. Мигдал Кирилл Петрович, 30 лет, кандидат физ.-мат. наук, с.н.с., Центр фундаментальных и прикладных исследований (ЦФПИ) ФГУП "ВНИИА", трудовой договор;

7. Григорьев Сергей Юрьевич, 28 лет, м.н.с., кандидат физ.-мат. наук, ФГУП "ВНИИА", трудовой договор;

8. Дьячков Сергей Александрович, 27 лет, с.н.с., Центр фундаментальных и прикладных исследований (ЦФПИ) ФГУП ВНИИА, трудовой договор;

9. Егорова Мария Сергеевна, 27 лет, Центр фундаментальных и прикладных исследований (ЦФПИ) ФГУП "ВНИИА", аспирант, трудовой договор;

10. Мурзов Семен Александрович, 26 лет, Московский физико-технический институт (государственный университет), аспирант, трудовой договор

Соответствие профессионального уровня членов научного коллектива задачам проекта

Иногамов Наиль Алимович. Имеет большой опыт построения физических моделей для задач взаимодействия лазерного излучения с веществом. Его работы по исследованию абляции под действием ультракоротких лазерных импульсов, ее механизмов и результатов получили мировое признание. К числу таких широко известных, часто цитируемых работ относятся

Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V.; Khokhlov, V. A.; Petrov, Y. V. & Migdal, K. P. Solitary Nanostructures Produced by Ultrashort Laser Pulse. Nanoscale Research Letters, 2016, 11, 177[1-13]

Inogamov, N. A., Zhakhovsky, V. V., Ashitkov, S. I., Emirov, Yu. N., Faenov, A. Ya., Petrov, Yu. V., Khokhlov, V. A., Ishino, M., Demaske, B. J., Tanaka, M., Hasegawa, N., Nishikino, M., Tamotsu, S., Pikuz, T. A., Skobelev, I. Ya., Ohba, T., Kaihori, T., Ochi, Y., Imazono, T., Fukuda, Y., Kando, M., Kato, Y., Kawachi, T., Anisimov, S. I., Agranat, M. B., Oleynik, I. I. & Fortov, V. E. Surface Nanodeformations Caused by Ultrashort Laser Pulse, Engineering Failure Analysis, 47, 328-337 (2015)

N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, S.I. Anisimov, A.M. Oparin, N.V. Shaposhnikov, D. von der Linde, J. Meyer-ter-Vehn, Expansion of matter heated by an ultrashort laser pulse, JETP Lett., 69 (4), 310-316 (1999)

Петров Юрий Васильевич. Провел важные исследования термодинамических и кинетических свойств металлов и диэлектриков в состояниях, возникающих под действием лазерного излучения, а также их оптических характеристик. Для осуществления проекта представляют интерес такие работы, как

Петров, Ю. В.; Мигдал, К. П.; Иногамов, Н. А. & Анисимов, С. И. Процессы переноса в металле с горячими электронами,

возбужденными лазерным импульсом Письма в ЖЭТФ, 2016, 104, 446-454

Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, K. P. Migdal, V. A. Khokhlov, K. V. Khishchenko. Thermal conductivity of condensed gold in states with the strongly excited electron subsystem *Journal of Physics: Conference Series*, 2015, v. 653, 012087

Ю.В. Петров, Н.А. Иногамов, К.П. Мигдал. Теплопроводность и коэффициент электрон-ионного теплообмена в конденсированных средах с сильно возбужденной электронной подсистемой, Письма в ЖЭТФ, 97(1), 24-31 (2013)

Хохлов Виктор Александрович. Создал лагранжевые гидродинамические коды, имеющие большое значение для решения задач по проекту, как в самостоятельном применении, так и в сочетании с молекулярно-динамическим моделированием. Эти коды, содержащие двухтемпературную термодинамику в широком диапазоне электронных и ионных температур и плотности и двухтемпературные коэффициенты переноса, опробованы при выполнении таких значительных работ, как

Иногамов Н. А., Жаховский В. В., Хохлов В. А., Динамика абляции золота в воду ЖЭТФ, 154, № 1(7), 92-123 (2018)

Иногамов, Н. А.; Хохлов, В. А., Жаховский, В. В. Формирование уединенной микроструктуры и абляция в прозрачный диэлектрик при субнаносекундном лазерном воздействии Письма, 108(7), 470-477 (2018)

Иногамов Н. А., Жаховский В. В., Хохлов В. А., Струеобразование при отрыве металлической пленки от подложки в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса ЖЭТФ, Т. 147, В. 1, С. 20-26 (2015)

Жаховский Василий Викторович. На высоком мировом уровне, зачастую опережая его, выполняет работы по молекулярно-динамическому и гидродинамическому моделированию задач лазерной абляции. Применение параллельных вычислений, большое, доходящее до сотен миллионов число частиц, адекватные потенциалы их взаимодействий создают основу надежных молекулярно-динамических расчетов. Хорошо известны такие из них, как B.J. Demaske, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, I.I. Oleynik, Ultrashort shock waves in nickel induced by femtosecond laser pulses, *Phys. Rev. B*, 87(5), 054109 (2013) [9 pages]

V.V. Zhakhovsky, M.M. Budzevich, N.A. Inogamov, I.I. Oleynik, C.T. White, Two-Zone Elastic-Plastic Single Shock Waves in Solids, *Phys. Rev. Lett.* 107, 135502 (2011) [4 pages]

B.J. Demaske, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, I.I. Oleynik, Ablation and spallation of gold films irradiated by ultrashort laser pulses, *Phys. Rev. B* 82, 064113 (2010) [5 pages]

Мигдал Кирилл Петрович. Имеет важный для задач проекта опыт работы с использованием теории функционала плотности. С применением пакетов программ на ее основе (VASP, Elk, Abinit) получены электронные энергетические зоны многих металлов, их термодинамические функции (внутренняя энергия, теплоемкость, давление), проводимость, коэффициент электронной теплопроводности в том числе в двухтемпературном состоянии. Этот ценный для осуществления проекта опыт изложен в частности, в работах

Migdal, K. P.; Petrov, Y. V.; Il'nitsky, D. K.; Zhakhovsky, V. V.; Inogamov, N. A.; Khishchenko, K. V.; Knyazev, D. V. & Levashov, P. R. Heat conductivity of copper in two-temperature state. *Appl. Phys. A*, 122, 408[1-5] (2016)

Migdal K.P., Il'nitsky D.K., Petrov Yu.V., Inogamov N.A., Equations of state, energy transport and two-temperature hydrodynamic simulations for femtosecond laser irradiated copper and gold. *Journal of Physics: Conference Series*, v. 653, 012086 (2015)

Petrov, Y. V.; Migdal, K. P.; Knyazev, D. V.; Inogamov, N. A. & Levashov, P. R. Transport properties of copper with excited electron subsystem. *J. Phys.: Conf. Ser.*, V. 774, No. 1, 012103[1-17] (2016)

Григорьев Сергей Юрьевич. Является признанным специалистом в области численного гидродинамического моделирования. Нужный для проекта специалист. Особенности важен его опыт в области применения кода SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) и при использовании молекулярной динамики. О его высоком научном уровне свидетельствуют такие работы, как

Dyachkov S. A., Parshikov A. N., Egorova M. S., Grigoryev, S. Y., Zhakhovsky V. V., Medin S. S., Explicit failure model for boron carbide ceramics under shock loading, *J. Appl. Phys.*, 124(8), 085902 (2018)

Grigoryev, S. Y.; Dyachkov, S. A.; Khokhlov, V. A.; Zhakhovsky, V. V.; Parshikov, A. N. & Inogamov, N. A. Liquid tin droplet fragmentation by ultra-short laser pulse, *J. Phys.: Conf. Ser.*, (2018), accepted

Дьячков Сергей Александрович. Подготовил к защите, назначенной на декабрь 2018 г., диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Квазиклассическая модель термодинамических свойств электронов с учетом состояний дискретного спектра и область ее применимости». Работа, выполненная в диссертации, интересна для исследования термодинамических свойств материалов в ходе осуществления проекта. Для задач

проекта важны работы С.А. Дьячкова по молекулярно-динамическому моделированию и использованию численного метода SPH:

S. A Dyachkov, A. N. Parshikov, V. V. Zhakhovsky, SPH simulation of boron carbide under shock compression with different failure models, J. Phys.: Conf. Ser., 815(1), 012012 (2017)

Dyachkov S. A., Egorova M. S., Murzov S. A., Parshikov A. N. and Zhakhovsky V. V., Auto-balancing algorithm for parallel SPH simulation of materials in extremes, Lobachevskii J. Math. 38, 893–897 (2017)

Егорова Мария Сергеевна. Во время учебы в аспирантуре хорошо овладела численными методами гидродинамики. В частности, ее умение работать с многомерным гидродинамическим кодом SPH является существенным вкладом в выполнение задач проекта. О высоком уровне подготовки к этим задачам можно судить по работам M. S. Egorova, S. A. Dyachkov, A. N. Parshikov, V. V. Zhakhovsky, A. A. Serezhkin, I. S. Menshov, D. B. Rogozkin, S. E. Kuratov, Shock-induced ejecta from a layer of spherical particles. Part I: SPH meso-scale simulation, J. Phys.: Conf. Ser., 815(1), 012012 (2017)

Dyachkov S. A., Egorova M. S., Murzov S. A., Parshikov A. N. and Zhakhovsky V. V., Auto-balancing algorithm for parallel SPH simulation of materials in extremes, Lobachevskii J. Math. 38, 893–897 (2017)

Также см. работу Егоровой и др. [15] в списке литературы к п. 1.4 (аннотация).

Мурзов Семен Александрович. Учится в аспирантуре, за время учебы получил хорошую подготовку по численным методам гидродинамики, молекулярной динамики (МД) и SPH коду, что будет использовано при выполнении работ по проекту. Виртуозно владеет пакетом AtomEye, позволяющим строить графические изображения атомов в трехмерном пространстве, что важно для иллюстрации и понимания результатов, которые получаются в МД симуляциях. Вот несколько его работ

S. A. Murzov, V. V. Zhakhovsky, Extinction and growth of cylindrical hotspots in AB model explosive: molecular dynamics studies, J. Phys.: Conf. Ser., 815(1), 012034 (2017)

Dyachkov S. A., Egorova M. S., Murzov S. A., Parshikov A. N. and Zhakhovsky V. V., Auto-balancing algorithm for parallel SPH simulation of materials in extremes, Lobachevskii J. Math. 38, 893–897 (2017)

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

1.8. Планируемый объем финансирования Фондом проекта по годам (указывается в тыс. рублей):

Несоответствие планируемого объема финансирования проекта (в том числе отсутствие информации в соответствующих полях формы) требованиям пункта 10 конкурсной документации является основанием недопуска заявки к конкурсу.

2019 г. - 6000 тыс. рублей,

2020 г. - 6000 тыс. рублей,

2021 г. - 6000 тыс. рублей.

1.9. Научный коллектив по результатам проекта в ходе его реализации предполагает опубликовать в рецензируемых российских и зарубежных научных изданиях не менее

15 публикаций,

из них

12 в изданиях, индексируемых в базах данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus).

Приводятся данные за весь период выполнения проекта. Уменьшение количества публикаций (в том числе отсутствие информации в соответствующих полях формы) по сравнению с порогом, установленным в п. 16.2 конкурсной документации является основанием недопуска заявки к конкурсу.

Информация о научных изданиях, в которых предполагается опубликовать результаты проекта, в том числе следует указать в каких базах индексируются данные издания - «Сеть науки» (Web of Science Core Collection), «Скопус» (Scopus), РИНЦ, иные базы, а также указать тип публикации - статья, обзор, тезисы, монография, иной тип

Статьи в журналах Physical Review Applied (WoS, Scopus, РИНЦ - Q1), Plasma Physics (WoS, Scopus, РИНЦ), Physical Review B (WoS, Scopus, РИНЦ), Journal of Applied Physics (WoS, Scopus, РИНЦ), AIP Conference Proceedings (WoS, Scopus, РИНЦ), Journal of Physics: Conference Series (WoS, Scopus, РИНЦ), ЖЭТФ (WoS, Scopus, РИНЦ), Письма в ЖЭТФ (WoS, Scopus, РИНЦ), УФН (WoS, Scopus, РИНЦ)

1.10. Число публикаций членов научного коллектива, опубликованных в период с 1 января 2014 года до даты подачи

заявки,

72, из них

58 – опубликованы в изданиях, индексируемых в Web of Science Core Collection или в Scopus.

1.11. Планируемое участие научного коллектива в международных коллаборациях (проектах) (при наличии)

Руководитель проекта подтверждает, что

- все члены научного коллектива (в том числе руководитель проекта) удовлетворяют пунктам 6, 7, 13 конкурсной документации;
- на весь период реализации проекта он будет состоять в трудовых отношениях с организацией;
- при обнародовании результатов любой научной работы, выполненной в рамках поддержанного Фондом проекта, он и его научный коллектив будут указывать на получение финансовой поддержки от Фонда и организацию, а также согласны с опубликованием Фондом аннотации и ожидаемых результатов поддержанного проекта, соответствующих отчетов о выполнении проекта, в том числе в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»;
- помимо гранта Фонда проект не будет иметь других источников финансирования в течение всего периода практической реализации проекта с использованием гранта Фонда;
- проект не является аналогичным по содержанию проекту, одновременно поданному на конкурсы научных фондов и иных организаций;
- проект не содержит сведений, составляющих государственную тайну или относимых к охраняемой в соответствии с законодательством Российской Федерации иной информации ограниченного доступа;
- доля членов научного коллектива в возрасте до 39 лет включительно в общей численности членов научного коллектива будет составлять не менее 50 процентов в течение всего периода практической реализации проекта;
- в установленные сроки будут представляться в Фонд ежегодные отчеты о выполнении проекта и о целевом использовании средств гранта.

Подпись руководителя проекта _____/С.И. Анисимов/

Форма 2. Сведения о руководителе и основных исполнителях проекта

собираются автоматически (частично) на основе анкетных данных руководителя и исполнителей, подтвердивших свое участие. Список исполнителей формируется в "Форме Т"

Форма 2. Сведения о руководителе

2.1. Фамилия, имя, отчество (при наличии)

на русском языке

Анисимов Сергей Иванович

на английском языке фамилия и инициалы

Anisimov S.I.

WoS ResearcherID (при наличии)

Можно получить, зарегистрировавшись по адресу www.ResearcherID.com.

Scopus AuthorID (при наличии)

Scopus AuthorID формируется в базе данных Scopus автоматически при появлении у автора хотя бы одной статьи в данной базе. AuthorID указан в авторском профиле, который становится доступен, если при поиске автора в базе данных Scopus (Author Search) в результатах поиска нажать на фамилию автора.
7006395343

2.2. Дата рождения (указывается цифрами – число, месяц, год)

11.12.1934

2.3. Гражданство

РОССИЯ

2.4. Ученая степень, год присуждения

В случае наличия нескольких ученых степеней, указывается та из них, которая наиболее соответствует тематике проекта.
Доктор физико-математических наук, 1970

2.5. Награды и премии за научную деятельность, членство в ведущих научных сообществах (при наличии), участие в редколлегиях ведущих рецензируемых научных изданий (при наличии), участие в оргкомитетах или программных комитетах известных международных конференций, иной опыт организации международных мероприятий

Гос. премия СССР, 1986; орден "Знак почета", 1975; премия им.Столетова, 2011; премия им. Ландау и Спитцера; член Редколлегии международного Инженерно-физического журнала; International High Power Laser Ablation & Directed Energy Symposium - член программного комитета HPLA; почетный профессор Университета г. Осака (Япония)

2.6. Основное место работы на момент подачи заявки – должность, полное наименование организации (сокращенное наименование организации)

Руководитель проекта может на момент подачи заявки не являться работником организации, но, в случае победы в конкурсе, должен заключить с ней трудовой договор. В случае, если руководитель проекта не является гражданином Российской Федерации, организацией должны быть выполнены все процедуры, предусмотренные законодательством Российской Федерации при трудоустройстве иностранных граждан.
главный научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, Московская обл)

2.7. Область научных интересов – ключевые слова (приводится не более 15 ключевых слов)

на русском языке

экстремальные состояния вещества, взаимодействие лазерного излучения с веществом, нелинейная динамика, фазовые превращения, гидродинамические неустойчивости

на английском языке

extreme states of matter, the interaction of laser radiation with matter, nonlinear dynamics, phase transitions, hydrodynamic instabilities

2.8. Область научных интересов – коды по классификатору Фонда

02-402 02-501 02-302 02-502

2.9. Перечень публикаций руководителя проекта, опубликованных в период с 1 января 2014 года до даты подачи заявки, подтверждающий выполнение условия пункта 9 конкурсной документации

Достаточно привести ссылки на публикации в количестве, равном установленному в конкурсной документации порогу. В случае представления публикации в изданиях, индексируемых в базе данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus), входящих в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR (принадлежность издания к Q1 определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>), данная статья в настоящем пункте указывается как одна публикация, но учитывается как две публикации. При этом необходимо указать на принадлежность издания к Q1 и на год принадлежности издания к Q1. Несоответствие количества публикаций (в том числе отсутствие информации в соответствующих полях формы или отсутствие информации о принадлежности издания к Q1), приводимое в перечне и/или численно в строке ниже, требованиям пункта 9 конкурсной документации является основанием недопуска заявки к конкурсу в соответствии с подпунктом «е» пункта 21 конкурсной документации.

на английском языке

1. Abarzhi, S. I., Ilyin, D. V., Goddard, I. W. A., Anisimov, S. I. Interface dynamics: Mechanisms of stabilization and destabilization and structure of flow fields, Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS), 2018, www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1714500115
Импакт-фактор 9.38 (Q1)
2. 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, www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1714503115 [9 pages].
Импакт-фактор 9.38 (Q1)
3. B. Rethfeld, D. Ivanov, M. Garcia, S. Anisimov, Modelling ultrafast laser ablation, J. Phys. D: Appl. Phys. 50, 193001 (2017), WoS: 000399252000001, Scopus: 2-s2.0-85018404681.
Импакт-фактор 2.373 (Q1)
4. 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, 47(6), 509-521 (2017), WoS: 000404958300003, Scopus: 2-s2.0-85021829753.
Импакт-фактор 1.151
5. V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, MD simulation of steady shock-wave fronts with phase transition in single-crystal iron, AIP Conf. Proc, 1793, 070003 (2017), WoS: 000404282600135, Scopus: 2-s2.0-85017037315.
6. Ю.В. Петров, К.П. Мигдал, Н.А. Иногамов, С.И. Анисимов, Процессы переноса в металле с горячими электронами, возбужденными лазерным импульсом, Письма в ЖЭТФ, 104 (6), 446-454 (2016), WoS: 000390022200013, Scopus: 2-s2.0-85002763645.
Импакт-фактор 1.363
7. V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovsky, K.V. Khishchenko, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, Metal film on a substrate: Dynamics under the action of ultrashort laser pulse, J. Phys.: Conf. Ser. 774, 012100 (2016) [Proc. XXXI International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS 2016), 1–6 March 2016, Elbrus, Russia], WoS: 000403483200101, Scopus: 2-s2.0-85007124204.
8. Petrov, Y. V., Khokhlov, V. A., Inogamov, N. A., Khishchenko, K. V., Anisimov, S. I., Reflectance of thin silver film on the glass substrate at the interaction with femtosecond laser pulses, J. Phys.: Conf. Ser., 774, 012099 (2016) [Proc. XXXI International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS 2016), 1–6 March 2016, Elbrus, Russia], WoS: 000403483200100
9. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, S.I. Ashitkov, Yu.N. Emirov, A.Ya. Faenov, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, M. Ishino, B.J. Demaske, M. Tanaka, N. Hasegawa, M. Nishikino, S. Tamotsu, T.A. Pikuz, I.Y. Skobelev, T. Ohba, T. Kaihori, Y. Ochi, T. Imazono, Y. Fukuda, M. Kando, Y. Kato, T. Kawachi, S.I. Anisimov, M.B. Agranat, I.I. Oleynik, V.E. Fortov, Surface nanodeformations caused by ultrashort laser pulse, Engineering Failure Analysis, 47(Pt.B), 328-337 (2015), WoS: 000347757600009.
Импакт-фактор 2.157 (Q1)
10. М.Б. Агранат, С.И. Ашитков, А.В. Овчинников, Д.С. Ситников, А.А. Юркевич, О.В. Чефонов, Л.Т. Перельман, С.И. Анисимов, В.Е. Фортов, Тепловое излучение горячих электронов металла, Письма в ЖЭТФ, 101 (9), 671-676 (2015), WoS: 000358576200003, Scopus: 2-s2.0-84938094729.
Импакт-фактор 1.363
11. Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, K.P. Migdal, V.A. Khokhlov, K.V. Khishchenko, Thermal conductivity of condensed gold in states with the strongly excited electron subsystem, J. Phys.: Conf. Ser. 653, 012087 (2015), WoS: 000368507600087, Scopus: 2-s2.0-84958970206.

12. M.I. Tribelsky, S.I. Anisimov, Tuned Mullins-Sekerka instability: Exact results, Phys. Rev. E 90, 042403 (2014), WoS: 000344241700003, Scopus: 2-s2.0-84908431443.

Импакт-фактор 2.284 (Q1)

13. Н.А. Иногамов, В. В. Жаховский, Ю.В. Петров, В.А. Хохлов, С.И. Ашитков, К.П. Мигдал, Д. К. Ильницкий, Ю.Н. Эмиров, П.С. Комаров, М.Б. Агранат, С.И. Анисимов, В.Е. Фортов, Действие ультракороткого лазерного импульса на металлы: двухтемпературная релаксация, вспенивание расплава и замораживание разрушающейся нанопены, Оптический журнал, 81(5), 5-26 (2014), WoS: 000338929900002, Scopus: 2-s2.0-84902137675.

Импакт-фактор 0,615

14. D.K. Ilnitsky, V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, S.I. Anisimov, Two-temperature hydrodynamics of laser-generated ultrashort shock waves in elasto-plastic solids, J. Phys. Conf. Ser., 500, 032021 (2014), WoS: 000337722900033, Scopus: 2-s2.0-84902313295.

15. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, Yu.N. Emirov, K.V. Khichshenko, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, M. Ishino, M. Kando, N. Hasegawa, M. Nishikino, P.S. Komarov, B.J. Demaske, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, T. Kawachi, I.I. Oleynik, Ultrafast lasers and solids in highly excited states: results of hydrodynamics and molecular dynamics simulations, J. Phys. Conf. Ser., 510, 012041 (2014), WoS: 000350296800041.

Для русскоязычных названий сведения приводятся на русском языке и в переводе на английский язык. При этом должно быть понятно, что речь идет об одном и том же документе (например, добавляйте слово «перевод»).

Перечень содержит 19 публикаций в изданиях, индексируемых в Web of Science Core Collection, Scopus.

Перечень содержит 5 публикаций в изданиях, входящих в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по Scopus SJR.

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

2.10. Основные научные результаты руководителя проекта за период с 1 января 2014 года (результаты должны подтверждаться сведениями из заявки, например - публикациями) на русском языке

Член-корр. РАН Сергей Иванович Анисимов является автором основополагающих работ в области взаимодействия лазерного излучения с веществом, начиная с широко известных высокоцитируемых статей и обзоров [1-3], монографии [4], до вышедших недавно в престижных научных журналах статей [5-7].

Все работы, указанные в п. 4.7 заявки, сделаны при его если и не непосредственном участии, то детальном обсуждении.

Основные результаты, полученные в работах С.И. Анисимова, начиная с 2014 года (ссылки 5-16 в списке литературы к этому пункту).

В обзорной статье [5] рассмотрены основные аспекты абляции конденсированных сред под действием ультракоротких лазерных импульсов от поглощения импульсов ультракороткой длительности, создания двухтемпературного состояния, гидродинамического разлета до нанодеформации облучаемой поверхности.

Рассмотрены фундаментальные вопросы поведения жидкостей на поверхности раздела, стабилизации поверхности, перемешивания жидкостей. Проведено молекулярно-динамическое моделирование массообмена на поверхности раздела жидкой и паровой фаз [6-7].

Показана возможность существования вызванной короткоимпульсным лазерным воздействием ударной волны, остающейся упругой, несмотря на то, что давление в ней значительно превосходит классический предел упругости (сверхупругая ударная волна) и сложной ударной волны, состоящей из синхронно движущихся сверхупругой и пластической ударных волн [8].

Разработан механизм образования наноструктур на поверхности мишени под действием лазерного излучения как оптического, так и рентгеновского диапазона в результате вспенивания под поверхностным горячим жидком слоем с последующим замерзанием возникших структур [9-11].

Исследованы особенности образования поверхностных наноструктур при воздействии лазерного излучения на металлические пленки, лежащие на диэлектрической подложке. Показан механизм возникновения бугорков, струй в вершинах бугорков и оторвавшихся капель [12,13].

Изучены очень важные для проводимых расчетов свойства веществ в двухтемпературном состоянии, возникающем при воздействии ультракоротких лазерных импульсов [14,15].

Рассмотрены оптические свойства металлов в двухтемпературных состояниях при воздействии фемтосекундных импульсов лазерного излучения [16].

Литература к п. 2.10

1. С.И. Анисимов, Б.Л. Капелиович, Т.Л. Перельман, Электронная эмиссия с поверхности металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов, ЖЭТФ, 66 (2), 776-779 (1974)].
2. С.И. Анисимов, А.М. Прохоров, В. Е. Фортвов, Применение мощных лазеров для исследования вещества при сверхвысоких давлениях, УФН, 142, 395-434 (1984)
3. С.И. Анисимов, Б.С. Лукьянчук, Избранные задачи теории лазерной абляции, УФН, 172, 301– 333 (2002)
4. S.I. Anisimov, V.A. Khokhlov, *Instabilities in Laser-Matter Interaction*, CRC Press, Published March 23, 1995, 160 Pages. ISBN 9780849386602 - CAT# 8660
5. B. Rethfeld, D. Ivanov, M. Garcia, S. Anisimov, Modelling ultrafast laser ablation, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 50, 193001 (2017)
6. S.I. Abarzhi, D.V. Ilyin, W.A. Goddard III, S.I. Anisimov, Interface dynamics: Mechanisms of stabilization and destabilization and structure of flow fields, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* (2018), <https://doi.org/10.1073/pnas.1714500115>
7. 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, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* (2018), <https://doi.org/10.1073/pnas.1714503115>
8. D.K. Il'nitsky, V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, S.I. Anisimov, Two-temperature hydrodynamics of laser-generated ultrashort shock waves in elasto-plastic solids, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 500, 032021 (2014)
9. Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, Ю.В. Петров, В.А. Хохлов, С.И. Ашитков, К.П. Мигдал, Д.К. Ильницкий, Ю.Н. Эмиров, П.С. Комаров, М.Б. Агранат, С.И. Анисимов, В.Е. Фортвов, Действие ультракороткого лазерного импульса на металлы: двухтемпературная релаксация, вспенивание расплава и замораживание разрушающейся нанопены, *Оптический журнал*, 81, 5-26 (2014)
10. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, Y.N. Emirov, K.V. Khichshenko, A.Y. Faenov, T.A. Pikuz, M. Ishino, M. Kando, N. Hasegawa, M. Nishikino, P.S. Komarov, B.J. Demaske, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, T. Kawachi, I.I. Oleynik, Ultrafast lasers and solids in highly excited states: results of hydrodynamics and molecular dynamics simulations, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 510(1), 012041 (2014)
11. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, S.I. Ashitkov, Yu.N. Emirov, A.Ya. Faenov, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, M. Ishino, B.J. Demaske, M. Tanaka, N. Hasegawa, M. Nishikino, S. Tamotsu, T.A. Pikuz, I.Ya. Skobelev, T. Ohba, T. Kaihori, Y. Ochi, T. Imazono, Y. Fukuda, M. Kando, Y. Kato, T. Kawachi, S.I. Anisimov, M.B. Agranat, I.I. Oleynik, V.E. Fortov, Surface nanodeformations caused by ultrashort laser pulse, *Engineering Failure Analysis*, 47, 328-337 (2015)
12. С.И. Анисимов, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, С.А. Мурзов, В.А. Хохлов, О формировании и кристаллизации жидкой струи, возникающей при воздействии на пленку остророфокусированным лазерным пучком, *Квантовая электроника*, 47(6), 509-5219 (2017)
13. Khokhlov, V. A.; Zhakhovsky, V. V.; Khishchenko, K. V.; Inogamov, N. A. & Anisimov, S. I. Metal film on substrate: dynamics under action of ultra-short laser pulse. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 774, No. 1, 012100[1-10] (2016)
14. Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, K.P. Migdal, V.A. Khokhlov, K.V. Khishchenko, Thermal conductivity of condensed gold in states with the strongly excited electron subsystem, *J. Phys. Conf. Ser.*, 653, 012087 (2015)
15. Ю.В. Петров, К.П. Мигдал, Н.А. Иногамов, С.И. Анисимов, Процессы переноса в металле с горячими электронами, возбужденными лазерным импульсом, *Письма в ЖЭТФ*, 104, 446-454 (2016)
16. Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, K.V. Khishchenko, S.I. Anisimov, Reflectance of thin silver film on the glass substrate at the interaction with femtosecond laser pulses, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 774, 012099 (2016)

на английском языке

Corresponding Member of RAS Sergei Ivanovich Anisimov is the author of the fundamental work in the field of interaction of laser radiation with matter, starting with well-known highly cited articles and reviews [1-3], monograph [4], to articles that have appeared recently in prestigious scientific journals [5-7].

All the works specified in section 4.7 of the application were made with his, if not directly participating, then detailed discussion.

The main results obtained in the works of S.I. Anisimov, starting in 2014 (references 5-16 in the list of references to this section).

In a review article [5], the main aspects of the ablation of condensed media under the action of ultrashort laser pulses from the absorption of ultrashort pulses, the creation of a two-temperature state, hydrodynamic expansion to the nano-deformation of the irradiated surface are considered.

The fundamental questions of the behavior of liquids at the interface, stabilization of the surface, mixing of liquids are considered. Molecular dynamics modeling of mass transfer at the interface of the liquid and vapor phases was carried out [6-

7].

The possibility of the existence of a shock wave caused by a short-pulse laser action remaining elastic, despite the fact that the pressure in it significantly exceeds the classical elastic limit (superelastic shock wave) and a complex shock wave consisting of synchronously moving superelastic and plastic shock waves was shown [8].

A mechanism has been developed for the formation of nanostructures on the target surface under the action of laser radiation of both the optical and X-ray ranges as a result of foaming under the surface hot liquid layer with subsequent freezing of the structures that have appeared [9-11].

The features of the formation of surface nanostructures under the action of laser radiation on metal films lying on a dielectric substrate are investigated. The mechanism of the occurrence of hillocks, jets at the tops of the hillocks and detached drops is shown [12,13].

The very important for the ablation modeling properties of substances in the two-temperature state, which arise under the action of ultrashort laser pulses, are studied [14,15]

The optical properties of metals in two-temperature states under the action of femtosecond pulses of laser radiation are considered [16].

Literature to section 2.10

1. S.I. Anisimov, B.L. Kapeliovich, T.L. Perelman, Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses, *Sov. Phys. JETP* 39(2), 375-377 (1974).
2. S.I. Anisimov, A.M. Prokhorov, V.E. Fortov, Application of high-power lasers to study matter at ultrahigh pressures, *Soviet Physics Uspekhi*, 27, 181–205 (1984)
3. S.I. Anisimov, B.S. Luk'yanchuk, Selected problems of laser ablation theory, *Soviet Physics Uspekhi*, 45, 293–324 (2002)
4. S.I. Anisimov, V.A. Khokhlov, *Instabilities in Laser-Matter Interaction*, CRC Press, Published March 23, 1995, 160 Pages. ISBN 9780849386602 - CAT# 8660
5. B. Rethfeld, D. Ivanov, M. Garcia, S. Anisimov, Modelling ultrafast laser ablation, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 50, 193001 (2017)
6. S.I. Abarzhi, D.V. Ilyin, W.A. Goddard III, S.I. Anisimov, Interface dynamics: Mechanisms of stabilization and destabilization and structure of flow fields, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* (2018), <https://doi.org/10.1073/pnas.1714500115>
7. V.V. Zhakhovskiy, 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, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* (2018), <https://doi.org/10.1073/pnas.1714503115>
8. D.K. Ilnitsky, V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, Yu.V. Petrov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, S.I. Anisimov, Two-temperature hydrodynamics of laser-generated ultrashort shock waves in elasto-plastic solids, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 500, 032021 (2014)
9. N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov, S. I. Anisimov, V. V. Zhakhovskii, S. I. Ashitkov, P. S. Komarov, M. B. Agranat, V. E. Fortov, K. P. Migdal, D. K. Il'nitskii, and Yu. N. Emirov The effect of an ultrashort laser pulse on metals: Two-temperature relaxation, foaming of the melt, and freezing of the disintegrating nanofoam *Journal of Optical Technology*, Vol. 81, Issue 5, pp. 233-249 (2014)
10. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, Y.N. Emirov, K.V. Khichshenko, A.Y. Faenov, T.A. Pikuz, M. Ishino, M. Kando, N. Hasegawa, M. Nishikino, P.S. Komarov, B.J. Demaske, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, T. Kawachi, I.I. Oleynik, Ultrafast lasers and solids in highly excited states: results of hydrodynamics and molecular dynamics simulations, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 510(1), 012041 (2014)
11. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, S.I. Ashitkov, Yu.N. Emirov, A.Ya. Faenov, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, M. Ishino, , B.J. Demaske, M. Tanaka, N. Hasegawa, M. Nishikino, S. Tamotsu, T.A. Pikuz, I.Ya. Skobelev, T. Ohba, T. Kaihori, Y. Ochi, T. Imazono, Y. Fukuda, M. Kando, Y. Kato, T. Kawachi, S.I. Anisimov, M.B. Agranat, I.I. Oleynik, V.E. Fortov, Surface nanodeformations caused by ultrashort laser pulse, *Engineering Failure Analysis*, 47, 328-337 (2015)
12. S. I. Anisimov, V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, S. A. Murzov, V. A. Khokhlov Formation and crystallisation of a liquid jet arising under irradiation of a film by a tightly focused laser beam, *Quantum electronics*, 47 (6), 509-521 (2017)
13. Khokhlov, V. A.; Zhakhovskiy, V. V.; Khishchenko, K. V.; Inogamov, N. A. & Anisimov, S. I. Metal film on substrate: dynamics under action of ultra-short laser pulse, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 774, No. 1, 012100[1-10] (2016)
14. Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, K.P. Migdal, V.A. Khokhlov, K.V. Khishchenko, Thermal conductivity of condensed gold in states with the strongly excited electron subsystem, *J. Phys. Conf. Ser.*, 653, 012087 (2015)
15. Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, Transfer processes in a metal with hot electrons excited by a laser pulse, *JETP Lett.*, 104(6), 431-439 (2016)
16. Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, K.V. Khishchenko, S.I. Anisimov, Reflectance of thin silver film on the glass substrate at the interaction with femtosecond laser pulses, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 774, 012099 (2016)

2.11. Общее число публикаций за период с 1 января 2014 года, 18, из них:

14 - опубликовано в изданиях, индексируемых в Web of Science Core Collection или Scopus.

2.12. Дополнительный список публикаций руководителя проекта за последние 5 лет (монографии, результаты интеллектуальной деятельности, имеющие правовую охрану, публикации в ведущих рецензируемых научных изданиях, публикации в изданиях, индексируемых в системах цитирования Web of Science Core Collection, Scopus, приводится не более 10 публикаций, при наличии публикации в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» указывается ссылка на нее (обязательно для публикаций в индексируемых изданиях), указывается, при наличии, импакт-фактор научного издания (по JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition))
на английском языке

Пункт не является обязательным к заполнению. Могут приводиться публикации, свидетельствующие о научной квалификации и достижениях руководителя проекта, за исключением публикаций, указанных в п. 2.9 настоящей формы.

2.13. Опыт руководства и выполнения научных проектов (указываются наименования фондов (организаций), номера, названия проектов и сроки выполнения за последние 5 лет)

Программа фундаментальных исследований Президиума РАН

«Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии» (2018)

п/п "Физические процессы в наноразмерных поверхностных структурах, инициированные воздействием оптических или рентгеновских лазеров", руководитель

Программа фундаментальных исследований Президиума РАН

«Теплофизика высоких плотностей энергии» (2015-2017)

п/п "Формирование ударных волн в средах с полиморфными превращениями и кинетика нуклеации под действием фемтосекундного лазера", руководитель

Программа фундаментальных исследований Президиума РАН

"Энергетика и механика быстропотекающих процессов и самоорганизация в плазменных, газовых и конденсированных средах" (2013-2014)

п/п "Исследования быстропотекающих процессов, инициированных ультракоротким оптическим или рентгеновским лазерным воздействием: двухтемпературная теплофизика и транспортные свойства, упруго-пластические ударные волны, и самоорганизация наноструктур под действием облучения", руководитель

Грант РФФИ 14-19-01599 «Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в трехмерной геометрии», 2014-2016-2018, руководитель;

Грант РФФИ-16-02-00864 "Термодинамика и кинетика при лазерном воздействии: применение кинетических уравнений и квантово-механического моделирования", руководитель

В том числе проектов, финансируемых РФФИ (при наличии):

Являлся руководителем проекта № 14-19-01599, 2014-2016 гг.

Являюсь руководителем проекта № 14-19-01599 (продление), 2017-2018 гг.

2.14. Планируемое участие в научных проектах (в любом качестве) в 2019 году

Общее количество – 2, из них:

руководство – 2, участие в качестве исполнителя – 0,

а именно:

Гос. задание ИТФ РАН, программа фундаментальных исследований Президиума РАН, проект в ИТФ РАН - руководитель
подана заявка РФФИ-19-02-00678-а - руководитель

(указываются в том числе грантодатели или заказчики проектов и источник финансирования, например – государственное задание учредителя, гранты РФФИ,

2.15. Доля рабочего времени, которую планируется выделить на руководство данным проектом в случае победы в конкурсе Фонда -

75 процентов.

Имеется в виду – от полной занятости в рамках трудовых или гражданско-правовых правоотношений, т.е. занятость в свободное от основной работы время также должна учитываться.

2.16. Предполагаемая форма трудовых отношений с организацией, через которую будет осуществляться финансирование:

Организация будет являться основным местом работы (характер работы – не дистанционный): **да;**

Трудовой договор по совместительству (характер работы – не дистанционный): **нет;**

Трудовой договор о дистанционной работе: **нет.**

2.17. Опыт образовательной деятельности за последние 5 лет (указывается информация о руководстве аспирантами, адъюнктами, интернами, ординаторами, разработке и чтении новых образовательных курсов в российских и зарубежных вузах)

2.18. Почтовый адрес

107207 г. Москва, ул. Байкальская, д. 38, корп. 3, кв. 10

2.19. Контактный телефон

+79032130112

2.20. Электронный адрес (E-mail)

s.i.anisimov@mail.ru

2.21. Участие в проекте:

Руководитель проекта

2.22. Файлы с дополнительной информацией (резюме, другая дополнительная информация, которая, по мнению руководителя проекта, может быть полезна для принятия решения о целесообразности финансирования данного проекта)

В формате pdf, до 3 Мб.

на русском языке

Файл, скачать

на английском языке

С условиями конкурса Фонда (в том числе, с пунктами 6 - 8 конкурсной документации) ознакомлен и согласен.
Подтверждаю свое участие в проекте.

Фамилия, имя и отчество	Анисимов Сергей Иванович
Данные документа, удостоверяющего личность (серия, номер, сведения о дате и органе выдачи)	<hr/> <hr/> <hr/> <p style="color: red; text-align: center;">Внимание! Данное поле заполняется вручную в печатном экземпляре заявки. Заполнение обязательно!</p>
Адрес проживания	107207 г. Москва, ул. Байкальская, д. 38, корп. 3, кв. 10
Оператор персональных данных	Российский научный фонд

Я выражаю согласие** на обработку указанным выше оператором персональных данных, внесенных в настоящую форму мною лично.

Обработка Российским научным фондом (адрес: г. Москва, ул. Солянка, д. 12 - 14, строение 3) указанных выше персональных данных может осуществляться **посредством** их сбора, систематизации, накопления, хранения, уточнения, использования, блокирования, распространения на официальном сайте Российского научного фонда, передачи и уничтожения **с целью** проведения экспертизы заявок на конкурсы, проводимые Российским научным фондом, экспертизы проектов и программ, финансируемых Российским научным фондом, подготовки аналитических материалов по конкурсам, долговременного сохранения документированной информации об участниках программ, получивших финансирование Российского научного фонда, общедоступного раскрытия информации о руководителях программ и проектов, финансируемых Российским научным фондом. Указанная обработка моих данных может осуществляться в течение 75 лет со дня заполнения настоящей формы в печатной форме. Хранение настоящей формы может быть поручено ООО «РАЙСВОЛФ» (107150, Москва, ул. Бойцовая, д. 22), оказывающему Российскому научному фонду услуги архивного хранения документов. Настоящее согласие может быть отозвано посредством направления на указанный выше адрес оператора персональных данных заявления с требованием о прекращении обработки персональных данных. Заявление должно содержать номер документа, удостоверяющего личность субъекта персональных данных; сведения о дате выдачи указанного документа и выдавшем его органе, а также собственноручную подпись субъекта персональных данных.

** Заполнение является обязательным в соответствии с требованиями Федерального закона от 27 июля 2006 г. №152-ФЗ «О персональных данных».

Подпись руководителя проекта _____/С.И. Анисимов/

Дата подписания «___» _____ 2018 г.

Форма 2. Сведения об основном исполнителе проекта

2.1. Фамилия, имя, отчество (при наличии)

на русском языке

Жаховский Василий Викторович

на английском языке фамилия и инициалы

Zhakhovsky V.

WoS ResearcherID (при наличии)

Можно получить, зарегистрировавшись по адресу www.ResearcherID.com.

G-9560-2011

Scopus AuthorID (при наличии)

Scopus AuthorID формируется в базе данных Scopus автоматически при появлении у автора хотя бы одной статьи в данной базе. AuthorID указан в авторском профиле, который становится доступен, если при поиске автора в базе данных Scopus (Author Search) в результатах поиска нажать на фамилию автора.

2.2. Дата рождения (указывается цифрами – число, месяц, год)

14.01.1963

2.3. Гражданство

РОССИЯ

2.4. Ученая степень, год присуждения

В случае наличия нескольких ученых степеней, указывается та из них, которая наиболее соответствует тематике проекта.

Кандидат физико-математических наук, 1997

2.5. Награды и премии за научную деятельность, членство в ведущих научных сообществах (при наличии), участие в редколлегиях ведущих рецензируемых научных изданий (при наличии)

стипендия постдока от Японского Общества Содействия Науки, Osaka University, fellow ID No. P98042 (1998-2000);

награда за академические успехи Osaka University (2000-2001);

стипендия исследователя от Японского Общества Содействия Науки, Osaka University, fellow ID No. L03541 (2003-2004);

член American Physical Society, ID number 61069853;

рецензент журналов Physical Review B, Journal of Applied Physics, Applied Physics Letters, Journal of Physical Chemistry

2.6. Основное место работы на момент подачи заявки – должность, полное наименование организации (сокращенное наименование организации)

ведущий научный сотрудник, федеральное государственное унитарное предприятие "Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова" (ФГУП "ВНИИА", г Москва)

2.7. Область научных интересов – ключевые слова (приводится не более 15 ключевых слов)

на русском языке

ударные волны и детонация, лазерная абляция и откол, межатомные потенциалы, молекулярно-динамическое моделирование

на английском языке

shock wave, detonation, ablation, spallation, femtosecond laser, interatomic potential, molecular dynamics simulation

2.8. Область научных интересов – коды по классификатору Фонда

09-202 02-201 02-204 02-206

2.9. Общее число публикаций за период с 1 января 2014 года, 59, из них:

59 - опубликовано в изданиях, индексируемых в Web of Science Core Collection или Scopus.

2.10. Список публикаций основного исполнителя проекта за последние 5 лет (монографии, результаты интеллектуальной деятельности, имеющие правовую охрану, публикации в ведущих рецензируемых научных изданиях, публикации в изданиях, индексируемых в системах цитирования Web of Science Core Collection, Scopus, приводится не более 10 публикаций, при наличии публикации в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» указывается ссылка на нее (обязательно для публикаций в индексируемых изданиях), указывается, при наличии, импакт-фактор научного издания (по JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition)) на английском языке

Egorova M.S., Dyachkov S.A., Parshikov A.N., Zhakhovsky V.V., "Parallel SPH modeling using dynamic domain decomposition and load balancing displacement of Voronoi subdomains", Computer Physics Communications, 234, 112-125 (2019)

Ishino M., Inogamov N.A., Tamotsu S., Zhakhovsky V.V., Hasegawa N., Skobelev I.Y., Faenov A.Y., Pikuz T.A., Mikami K., Kawachi T., Nishikino M., "Study of damage structure formation on aluminum film targets by picosecond soft X-ray laser ablation around threshold region", Applied Physics A: Materials Science and Processing, 124, 649 (2018)

Dyachkov S.A., Parshikov A.N., Egorova M.S., Grigoryev S.Yu., Zhakhovsky V.V., Medin S.A., "Explicit failure model for boron carbide ceramics under shock loading", Journal of Applied Physics, 124, 085902 (2018)

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, doi:10.1073/pnas.1714503115 (2018)

Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Khokhlov V.A., "Dynamics of Gold Ablation into Water", JETP, 127, 79-106 (2018) [перевод]

Kohmura Y., Zhakhovsky V., Takei D., Suzuki Y., Takeuchi A., Inoue I., Inubushi Y., Inogamov N., Ishikawa T., Yabashi M., "Nanostructuring of multi-layer material by single x-ray vortex pulse with femtosecond duration", Applied Physics Letters, 112, 123103 (2018)

B. Albertazzi, N. Ozaki, V. Zhakhovsky, A. Faenov, H. Habara, M. Harmand, N. Hartley, et al, "Dynamic fracture of tantalum under extreme tensile stress", Science Advances, 3, e1602705 (2017)

N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov, Y. V. Petrov, K. P. Migdal, "Solitary Nanostructures Produced by Ultrashort Laser Pulse", Nanoscale Research Letters, 11, 177 (2016)

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, 122, 432 (2016)

N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, and V. A. Khokhlov, "Jet Formation in Spallation of a Metal Film from a Substrate under the Action of a Femtosecond Laser Pulse", JETP, 120, 15 - 48 (2015) [перевод]

V. V. Zhakhovsky, M. M. Budzevich, A. C. Landerville, I. I. Oleynik, and C. T. White, "Laminar, cellular, transverse, and multi-headed pulsating detonations in condensed phase energetic materials from molecular dynamics simulations", Phys. Rev. B, 90, 033312 (2014)

B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, I. I. Oleynik, "Ultrashort shock waves in nickel induced by femtosecond laser pulses", Phys. Rev. B 87, 054109 (2013)

Для русскоязычных названий сведения приводятся на русском языке и в переводе на английский язык. При этом должно быть понятно, что речь идет об одном и том же документе (например, добавляйте слово «перевод»).

2.11. Опыт руководства научными проектами и участия в них (указываются наименования фондов (организаций), номера, названия проектов и сроки выполнения за последние 5 лет)

грант от Office of Naval Research & Naval Research Laboratory "Atomic-scale mechanisms of hypervelocity chemistry and detonation", 01.09.2009-31.08.2012

грант NSF 1008676 "Atomic-scale Materials World Network: Formation of nanostructures at materials surfaces exposed to femtosecond laser pulses: experiment and theory" 01.06.2010-31.05.2013

РФФИ 14-08-00980 "Выявление предельных режимов тепломассопереноса в двухфазных системах на основе учета неравновесности вблизи межфазных поверхностей жидкость - пар" 2014-2016

РФФИ 13-08-01095 "Фемтосекундные лазеры, ударные волны и исследования упруго-пластических явлений, полиморфных превращений и разрушения на предельно коротких временах нагружения", 2013-2015

РНФ 14-19-01599 "Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в трехмерной геометрии" 2014-2016

2.12. Планируемое участие в научных проектах (в любом качестве) в 2019 году

Общее количество – 2, из них:

руководство – 0, участие в качестве исполнителя – 2,

а именно:

1 грант РНФ, 1 грант РФФИ

(указываются в том числе грантодатели или заказчики проектов и источник финансирования, например – государственное задание учредителя, гранты РФФИ, ФПИ, РНФ, иных фондов или иных организаций, государственный контракт (заказчик, программа), иной хозяйственный договор, иные гранты и субсидии).

2.13. Доля рабочего времени, которую планируется выделить на участие в данном проекте в случае победы в конкурсе Фонда -

60 процентов.

Имеется в виду – от полной занятости в рамках трудовых или гражданско-правовых правоотношений, т.е. занятость в свободное от основной работы время также должна учитываться.

2.14. Участие в образовательной деятельности (указывается информация о руководстве аспирантами, адъюнктами, интернами, ординаторами, разработке и чтении новых образовательных курсов в российских и зарубежных вузах)

летний курс для выпускников и исследователей Osaka University "Direct Particle Methods in Computational Physics", 2003

руководитель дипломной работы студента 5 курса МФТИ Семена Мурзова

2.15. В 2017 или в 2018 годах участвовал в качестве руководителя проекта, финансируемого Фондом (руководителя направления комплексной научной программы организации) или исполнителя проекта, финансируемого Фондом (комплексной научной программы организации) в следующих проектах (при наличии):

Являлся исполнителем проекта № 14-19-01599, 2014-2016 гг.

Являюсь исполнителем проекта № 14-19-01599 (продление), 2017-2018 гг.

2.16. Контактный телефон, электронный адрес (E-mail)

+79647998254, basi1z@gmail.com

2.17. Участие в проекте:

Основной исполнитель проекта

С условиями конкурса Фонда (в том числе, с пунктами 7 и 8 конкурсной документации) ознакомлен и согласен.
Подтверждаю свое участие в проекте.

Фамилия, имя и отчество	Жаховский Василий Викторович
Данные документа, удостоверяющего личность (серия, номер, сведения о дате и органе выдачи)	<hr/> <hr/> <hr/> <p style="color: red; text-align: center;">Внимание! Данное поле заполняется вручную в печатном экземпляре заявки. Заполнение обязательно!</p>
Адрес проживания	105037, Москва, 2ая Парковая, 11, 19
Оператор персональных данных	Российский научный фонд

Я выражаю согласие** на обработку указанным выше оператором персональных данных, внесенных в настоящую форму мною лично.

Обработка Российским научным фондом (адрес: г. Москва, ул. Солянка, д. 12 - 14, строение 3) указанных выше персональных данных может осуществляться **посредством** их сбора, систематизации, накопления, хранения, уточнения, использования, блокирования, распространения на официальном сайте Российского научного фонда, передачи и уничтожения **с целью** проведения экспертизы заявок на конкурсы, проводимые Российским научным фондом, экспертизы проектов и программ, финансируемых Российским научным фондом, подготовки аналитических материалов по конкурсам, долговременного сохранения документированной информации об участниках программ, получивших финансирование Российского научного фонда, общедоступного раскрытия информации о руководителях программ и проектов, финансируемых Российским научным фондом. Указанная обработка моих данных может осуществляться в течение 75 лет со дня заполнения настоящей формы в печатной форме. Хранение настоящей формы может быть поручено ООО «РАЙСВОЛФ» (107150, Москва, ул. Бойцовая, д. 22), оказывающему Российскому научному фонду услуги архивного хранения документов. Настоящее согласие может быть отозвано посредством направления на указанный выше адрес оператора персональных данных заявления с требованием о прекращении обработки персональных данных. Заявление должно содержать номер документа, удостоверяющего личность субъекта персональных данных; сведения о дате выдачи указанного документа и выдавшем его органе, а также собственноручную подпись субъекта персональных данных.

** Заполнение является обязательным в соответствии с требованиями Федерального закона от 27 июля 2006 г. №152-ФЗ «О персональных данных».

Подпись исполнителя проекта _____/В.В. Жаховский/

Дата подписания «___» _____ 2018 г.

Форма 2. Сведения об основном исполнителе проекта

2.1. Фамилия, имя, отчество (при наличии)

на русском языке

Иногамов Наиль Алимович

на английском языке фамилия и инициалы

Inogamov N.

WoS ResearcherID (при наличии)

Можно получить, зарегистрировавшись по адресу www.ResearcherID.com.

Q-8112-2016

Scopus AuthorID (при наличии)

Scopus AuthorID формируется в базе данных Scopus автоматически при появлении у автора хотя бы одной статьи в данной базе. AuthorID указан в авторском профиле, который становится доступен, если при поиске автора в базе данных Scopus (Author Search) в результатах поиска нажать на фамилию автора.

7004135519

2.2. Дата рождения (указывается цифрами – число, месяц, год)

28.01.1951

2.3. Гражданство

РОССИЯ

2.4. Ученая степень, год присуждения

В случае наличия нескольких ученых степеней, указывается та из них, которая наиболее соответствует тематике проекта.

Доктор физико-математических наук, 1990

2.5. Награды и премии за научную деятельность, членство в ведущих научных сообществах (при наличии), участие в редколлегиях ведущих рецензируемых научных изданий (при наличии)

Член Ученых советов ИТФ им. Ландау РАН (с 1993-), МФТИ (с 2009-), ИКИ РАН (с 2012-).

Почетная грамота Президиума Российской академии наук за многолетнюю плодотворную научную деятельность. Visiting scientist of MPI fuer Quantenoptik, Garching, Germany (1985; 1988, 1989); and of MPI fuer Astrophysik, Garching, Germany (1995-2000; 2002-2006; 2008-2015); and of TU Kaiserslautern, Fachbereich Physik, Kaiserslautern, Germany (2006); and of Ecole Normale Superieure (ENS), Paris, France (1996); and of Commissariat a l'Energie Atomique (CEA), Paris, France (2000-2002); Visiting associate professor of Institute for Scientific Interchange (ISI), Torino, Italy (1991); Visiting Professor of Institute for Laser Engineering, Osaka University, Osaka, Japan (2007).

2.6. Основное место работы на момент подачи заявки – должность, полное наименование организации (сокращенное наименование организации)

ведущий научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, Московская обл)

2.7. Область научных интересов – ключевые слова (приводится не более 15 ключевых слов)

на русском языке

взаимодействие лазерного излучения с веществом, ударные волны, гидродинамические неустойчивости

на английском языке

laser-matter interaction, shocks, hydrodynamic instabilities

2.8. Область научных интересов – коды по классификатору Фонда

01-205 09-202 02-210 02-501 01-305 02-204 02-303 02-206

2.9. Общее число публикаций за период с 1 января 2014 года, 72, из них:

62 - опубликовано в изданиях, индексируемых в Web of Science Core Collection или Scopus.

2.10. Список публикаций основного исполнителя проекта за последние 5 лет (монографии, результаты интеллектуальной деятельности, имеющие правовую охрану, публикации в ведущих рецензируемых научных изданиях, публикации в изданиях, индексируемых в системах цитирования Web of Science Core Collection, Scopus, приводится не более 10 публикаций, при наличии публикации в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» указывается ссылка на нее (обязательно для публикаций в индексируемых изданиях), указывается, при наличии, импакт-фактор научного издания (по JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition))

на английском языке

1. M. Ishino, N.A. Inogamov, S. Tamotsu, V.V. Zhakhovsky, N. Hasegawa, I.Yu. Skobelev, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, K. Mikami, T. Kawachi, M. Nishikino, Study of damage structure formation on aluminum film targets by picosecond soft X-ray laser ablation around threshold region, Appl. Phys. A 124, 649 (2018).
Impact Factor 1.604
2. Y. Kohmura, V. Zhakhovsky, D. Takei, Y. Suzuki, A. Takeuchi, I. Inoue, Y. Inubushi, N. Inogamov, T. Ishikawa, M. Yabashi, Nano-structuring of multi-layer material by single x-ray vortex pulse with femtosecond duration, Appl. Phys. Lett. 112, 123103 (2018), WoS: 000428458100028, Scopus: 2-s2.0-85044311645.
Impact Factor 3.495
3. X.W. Wang, A.A. Kuchmizhak, X. Li, S. Juodkazis, O.B. Vitrik, Yu.N. Kulchin, V.V. Zhakhovsky, P.A. Danilov, A.A. Ionin, S.I. Kudryashov, A.A. Rudenko, N.A. Inogamov, Laser-Induced Translative Hydrodynamic Mass Snapshots: Noninvasive Characterization and Predictive Modeling via Mapping at Nanoscale, Phys. Rev. Applied 8, 044016 (2017); arXiv:1703.06758, WoS: 000413732900004, Scopus: 2-s2.0-85032255765.
Impact Factor 4.782 (Q1)
4. B. Albertazzi, N. Ozaki, V. Zhakhovsky, A. Faenov, H. Habara, M. Harmand, N. Hartley, D. Ilnitsky, N. Inogamov, Y. Inubushi, T. Ishikawa, T. Katayama, T. Koyama, M. Koenig, A. Krygier, T. Matsuoka, S. Matsuyama, E. McBride, K.P. Migdal, G. Morard, H. Ohashi, T. Okuchi, T. Pikuz, N. Purevjav, O. Sakata, Y. Sano, T. Sato, T. Sekine, Y. Seto, K. Takahashi, K. Tanaka, Y. Tange, T. Togashi, K. Tono, Y. Umeda, T. Vinci, M. Yabashi, T. Yabuuchi, K. Yamauchi, H. Yumoto, R. Kodama, Dynamic fracture of tantalum under extreme tensile stress, Science Advances, 3(6), e1602705 (2017), WoS: 000406370700022, Scopus: 2-s2.0-85033801127. (Q1)
5. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, Laser-induced spalling of thin metal film from silica substrate followed by inflation of microbump, Appl. Phys. A 122(4), 432 (2016), WoS: 000375444000014, Scopus: 2-s2.0-84961564529.
Impact Factor 1.604
6. T.A. Pikuz, A.Ya. Faenov, N. Ozaki, N.J. Hartley, B. Albertazzi, T. Matsuoka, K. Takahashi, H. Habara, Y. Tange, S. Matsuyama, K. Yamauchi, R. Ochante, K. Sueda, O. Sakata, T. Sekine, T. Sato, Y. Umeda, Y. Inubushi, T. Yabuuchi, T. Togashi, T. Katayama, M. Yabashi, M. Harmand, G. Morard, M. Koenig, V. Zhakhovsky, N. Inogamov, A.S. Safronova, A. Stafford, Yu. Skobelev, S.A. Pikuz, T. Okuchi, Y. Seto, K.A. Tanaka, T. Ishikawa, R. Kodama, Indirect monitoring shot-to-shot shock waves strength reproducibility during pump-probe experiments, J. Appl. Phys. 120, 035901 (2016), WoS: 000381382500041, Scopus: 2-s2.0-84979298684.
Impact Factor 2.176
7. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, Solitary Nanostructures Produced by Ultrashort Laser Pulse, Nanoscale Res. Lett., 11(1), 177 (2016), WoS: 000373635900001, Scopus: 2-s2.0-84962783595.
Impact Factor 3.125 (Q1)
8. 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(24), 12352-12361 (2016), WoS: 000378244900031, Scopus: 2-s2.0-84975502561.
Impact Factor 7.233 (Q1)
9. Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, Transfer processes in a metal with hot electrons excited by a laser pulse, JETP Lett., 104(6), 431-439 (2016), WoS: 000390022200013, Scopus: 2-s2.0-85002763645.
Impact Factor 1.363
10. 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), WoS: 000395060400004, Scopus: 2-s2.0-85014010995.
Impact Factor 1.363
11. Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse, Appl. Phys. B 119(3), 401-411 (2015), WoS: 000354618000002, Scopus: 2-

s2.0-84923240976.

Impact Factor 1.881

12. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, D.K. Ilitsky, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Tomita, T. Kawachi, Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump—X-ray probe experiment, Appl. Phys. B 119(3), 413-419 (2015), WoS: 000354618000003, Scopus: 2-s2.0-84922970376.

Impact Factor 1.881

13. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, S.I. Ashitkov, Yu.N. Emirov, A.Ya. Faenov, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, M. Ishino, B.J. Demaske, M. Tanaka, N. Hasegawa, M. Nishikino, S. Tamotsu, T.A. Pikuz, I.Y. Skobelev, T. Ohba, T. Kaihori, Y. Ochi, T. Imazono, Y. Fukuda, M. Kando, Y. Kato, T. Kawachi, S.I. Anisimov, M.B. Agranat, I.I. Oleynik, V.E. Fortov, Surface nanodeformations caused by ultrashort laser pulse, Engineering Failure Analysis, 47(Pt.B), 328-337 (2015), WoS: 000347757600009.

Impact Factor 2.157 (Q1)

14. Y. Rosandi, F.C. Kabeer, Ya. Cherednikov, E.S. Zijlstra, M.E. Garcia, N.A. Inogamov, H.M. Urbassek, Melting of Al Induced by Laser Excitation of 2p Holes, Materials Research Letters, 3 (3), 149-155 (2015), WoS: 000372219300005.

Impact Factor 6.161 (Q1)

15. M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, M. Yamagiwa, Very low electron temperature in warm dense matter formed by focused picosecond soft x-ray laser pulses, J. Appl. Phys. 116, 183302 (2014), WoS: 000345216300009, Scopus: 2-s2.0-84910600658.

Impact Factor 2.176

Для русскоязычных названий сведения приводятся на русском языке и в переводе на английский язык. При этом должно быть понятно, что речь идет об одном и том же документе (например, добавляйте слово «перевод»).

2.11. Опыт руководства научными проектами и участия в них (указываются наименования фондов (организаций), номера, названия проектов и сроки выполнения за последние 5 лет)

Программа фундаментальных исследований Президиума РАН

«Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии» (2018), исполнитель

Программа фундаментальных исследований Президиума РАН

«Теплофизика высоких плотностей энергии» (2015-2017), исполнитель

Программа фундаментальных исследований Президиума РАН

"Энергетика и механика быстропротекающих процессов и самоорганизация в плазменных, газовых и конденсированных средах" (2013-2014), исполнитель

Грант РФФИ 14-19-01599 «Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в трехмерной геометрии», 2014-2016-2018, исполнитель

Грант РФФИ-16-02-00864 "Термодинамика и кинетика при лазерном воздействии: применение кинетических уравнений и квантово-механического моделирования", исполнитель

Грант РФФИ-16-08-01181 "Формирование наночастиц и генерация ударных волн лазерным воздействием: многофазные и полиморфные структурные превращения", руководитель

2.12. Планируемое участие в научных проектах (в любом качестве) в 2019 году

Общее количество – 3, из них:

руководство – 1, участие в качестве исполнителя – 2,

а именно:

Гос. задание ИТФ РАН - исполнитель,

подана заявка РФФИ-19-02-00678-а - исполнитель

подана заявка РФФИ-19-08-00817-а - руководитель

(указываются в том числе грантодатели или заказчики проектов и источник финансирования, например – государственное задание учредителя, гранты РФФИ, ФПИ, РНФ, иных фондов или иных организаций, государственный контракт (заказчик, программа), иной хозяйственный договор, иные гранты и субсидии).

2.13. Доля рабочего времени, которую планируется выделить на участие в данном проекте в случае победы в конкурсе Фонда -

70 процентов.

Имеется в виду – от полной занятости в рамках трудовых или гражданско-правовых правоотношений, т.е. занятость в свободное от основной работы время также должна учитываться.

2.14. Участие в образовательной деятельности (указывается информация о руководстве аспирантами, адъюнктами, интернами, ординаторами, разработке и чтении новых образовательных курсов в российских и зарубежных вузах)

1. Курс "Взаимодействие излучения с веществом". Московский физико-технический институт, ФОПФ, кафедра физики и технологии наноструктур

2. Курс "Лазерная физика". Московский физико-технический институт, ФФКЭ, кафедра фотоники

Подготовил к защите аспиранта Кирилла Петровича Мигдала. Защита диссертации на соискание ученой степени кфмн состоялась осенью 2017 г., см. сайт ОИВТ https://www.jiht.ru/science/dissert-council/diss_texts/ с текстами защищенных диссертаций

Подготовил к защите соискателя Дениса Константиновича Ильницкого. Защита намечена на начало 2019 г. на мехмате МГУ

2.15. В 2017 или в 2018 годах участвовал в качестве руководителя проекта, финансируемого Фондом (руководителя направления комплексной научной программы организации) или исполнителя проекта, финансируемого Фондом (комплексной научной программы организации) в следующих проектах (при наличии):

Являлся исполнителем проекта № 14-19-01599, 2014-2016 гг.

Являюсь исполнителем проекта № 14-19-01599 (продление), 2017-2018 гг.

2.16. Контактный телефон, электронный адрес (E-mail)

+74954258767, nailinogamov@gmail.com

2.17. Участие в проекте:

Основной исполнитель проекта

С условиями конкурса Фонда (в том числе, с пунктами 7 и 8 конкурсной документации) ознакомлен и согласен.
Подтверждаю свое участие в проекте.

Фамилия, имя и отчество	Иногамов Наиль Алимович
Данные документа, удостоверяющего личность (серия, номер, сведения о дате и органе выдачи)	<hr/> <hr/> <hr/> Внимание! Данное поле заполняется вручную в печатном экземпляре заявки. Заполнение обязательно!
Адрес проживания	117588 Москва, ул. Тарусская, д. 4 кв. 230
Оператор персональных данных	Российский научный фонд

Я выражаю согласие** на обработку указанным выше оператором персональных данных, внесенных в настоящую форму мною лично.

Обработка Российским научным фондом (адрес: г. Москва, ул. Солянка, д. 12 - 14, строение 3) указанных выше персональных данных может осуществляться **посредством** их сбора, систематизации, накопления, хранения, уточнения, использования, блокирования, распространения на официальном сайте Российского научного фонда, передачи и уничтожения **с целью** проведения экспертизы заявок на конкурсы, проводимые Российским научным фондом, экспертизы проектов и программ, финансируемых Российским научным фондом, подготовки аналитических материалов по конкурсам, долговременного сохранения документированной информации об участниках программ, получивших финансирование Российского научного фонда, общедоступного раскрытия информации о руководителях программ и проектов, финансируемых Российским научным фондом. Указанная обработка моих данных может осуществляться в течение 75 лет со дня заполнения настоящей формы в печатной форме. Хранение настоящей формы может быть поручено ООО «РАЙСВОЛФ» (107150, Москва, ул. Бойцовая, д. 22), оказывающему Российскому научному фонду услуги архивного хранения документов. Настоящее согласие может быть отозвано посредством направления на указанный выше адрес оператора персональных данных заявления с требованием о прекращении обработки персональных данных. Заявление должно содержать номер документа, удостоверяющего личность субъекта персональных данных; сведения о дате выдачи указанного документа и выдавшем его органе, а также собственноручную подпись субъекта персональных данных.

** Заполнение является обязательным в соответствии с требованиями Федерального закона от 27 июля 2006 г. №152-ФЗ «О персональных данных».

Подпись исполнителя проекта _____/Н.А. Иногамов/

Дата подписания «___» _____ 2018 г.

Форма 2. Сведения об основном исполнителе проекта

2.1. Фамилия, имя, отчество (при наличии)

на русском языке

Петров Юрий Васильевич

на английском языке фамилия и инициалы

Petrov Y.

WoS ResearcherID (при наличии)

Можно получить, зарегистрировавшись по адресу www.ResearcherID.com.

Scopus AuthorID (при наличии)

Scopus AuthorID формируется в базе данных Scopus автоматически при появлении у автора хотя бы одной статьи в данной базе. AuthorID указан в авторском профиле, который становится доступен, если при поиске автора в базе данных Scopus (Author Search) в результатах поиска нажать на фамилию автора.

7101780264

2.2. Дата рождения (указывается цифрами – число, месяц, год)

18.08.1949

2.3. Гражданство

РОССИЯ

2.4. Ученая степень, год присуждения

В случае наличия нескольких ученых степеней, указывается та из них, которая наиболее соответствует тематике проекта.

Доктор физико-математических наук, 2007

2.5. Награды и премии за научную деятельность, членство в ведущих научных сообществах (при наличии), участие в редколлегиях ведущих рецензируемых научных изданий (при наличии)

Почетная грамота Президиума Российской академии наук за многолетнюю плодотворную научную деятельность

2.6. Основное место работы на момент подачи заявки – должность, полное наименование организации (сокращенное наименование организации)

старший научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, Московская обл)

2.7. Область научных интересов – ключевые слова (приводится не более 15 ключевых слов)

на русском языке

взаимодействие лазерного излучения с веществом, ультракороткие лазерные импульсы, теория конденсированного состояния, экстремальные состояния вещества

на английском языке

interaction of laser radiation with matter, ultrashort laser pulses, condensed state theory, extreme states of matter

2.8. Область научных интересов – коды по классификатору Фонда

09-202 02-201 02-204

2.9. Общее число публикаций за период с 1 января 2014 года, 24, из них:

15 - опубликовано в изданиях, индексируемых в Web of Science Core Collection или Scopus.

2.10. Список публикаций основного исполнителя проекта за последние 5 лет (монографии, результаты интеллектуальной деятельности, имеющие правовую охрану, публикации в ведущих рецензируемых научных изданиях, публикации в изданиях, индексируемых в системах цитирования Web of Science Core Collection, Scopus, приводится не

более 10 публикаций, при наличии публикации в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» указывается ссылка на нее (обязательно для публикаций в индексируемых изданиях), указывается, при наличии, импакт-фактор научного издания (по JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition))
на английском языке

1. N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, Energy redistribution between layers in multi-layered target heated by X-ray pulse, J. Phys.: Conf. Ser., 946, 012009 (2018) [Proc. XXXII Int. Conf. on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Elbrus 2017), March 1-6, 2017, Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia], Scopus: 2-s2.0-85043710264.
2. Y.V. Petrov, N.A. Inogamov, A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov, Electrical resistivity and thermal conductivity of liquid aluminum in the two-temperature state, J. Phys.: Conf. Ser., 946, 012096 (2018) [Proc. XXXII Int. Conf. on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Elbrus 2017), March 1-6, 2017, Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia], Scopus: 2-s2.0-85043702687.
3. N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, Y.V. Petrov, V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, D.K. Il'nitsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, T. Kawachi, A.Y. Faenov, T.A. Pikuz, M. Baba, Y. Minami and T. Suemoto, Rarefaction after fast laser heating of a thin metal film on a glass mount, AIP Conf. Proc., 1793, 070012 (2017), WoS: 000404282600144, Scopus: 2-s2.0-85016953873.
4. K.P. Migdal, Yu.V. Petrov, D.K. Il'nitsky, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, K.V. Khishchenko, D.V. Knyazev, P.R. Levashov, Heat conductivity of copper in two-temperature state, Appl. Phys. A 122(4), 408 (2016), WoS: 000372259900149, Scopus: 2-s2.0-84977564377.
Impact Factor 1.604
5. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, Solitary Nanostructures Produced by Ultrashort Laser Pulse, Nanoscale Res. Lett., 11(1), 177 (2016), WoS: 000373635900001, Scopus: 2-s2.0-84962783595. Импакт-фактор 3.125 (Q1)
6. Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, Transfer processes in a metal with hot electrons excited by a laser pulse, JETP Lett., 104(6), 431-439 (2016), WoS: 000390022200013, Scopus: 2-s2.0-85002763645.
Impact Factor 1.363
7. S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, A.A. Yurkevich, D.K. Il'nitsky, N.A. Inogamov, M.B. Agranat, Ablation of gold irradiated by femtosecond laser pulse: Experiment and modeling, J. Phys.: Conf. Ser. 774, 012097 (2016) [Proc. XXXI International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS 2016), 1-6 March 2016, Elbrus, Russia], Scopus: 2-s2.0-85007137247.
8. Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, K.V. Khishchenko, S.I. Anisimov, Reflectance of thin silver film on the glass substrate at the interaction with femtosecond laser pulses, J. Phys.: Conf. Ser. 774, 012099 (2016) [Proc. XXXI International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS 2016), 1-6 March 2016, Elbrus, Russia], Scopus: 2-s2.0-85007129428.
9. Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, D.V. Knyazev, N.A. Inogamov, P.R. Levashov, Transport properties of copper with excited electron subsystem, J. Phys.: Conf. Ser. 774, 012103 (2016) [Proc. XXXI International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS 2016), 1-6 March 2016, Elbrus, Russia], Scopus: 2-s2.0-85007109748.
10. Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse, Appl. Phys. B 119(3), 401-411 (2015), WoS: 000354618000002, Scopus: 2-s2.0-84923240976.
Impact Factor 1.881
11. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, S.I. Ashitkov, Yu.N. Emirov, A.Ya. Faenov, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, M. Ishino, B.J. Demaske, M. Tanaka, N. Hasegawa, M. Nishikino, S. Tamotsu, T.A. Pikuz, I.Y. Skobelev, T. Ohba, T. Kaihori, Y. Ochi, T. Imazono, Y. Fukuda, M. Kando, Y. Kato, T. Kawachi, S.I. Anisimov, M.B. Agranat, I.I. Oleynik, V.E. Fortov, Surface nanodeformations caused by ultrashort laser pulse, Engineering Failure Analysis, 47(Pt.B), 328-337 (2015), WoS: 000347757600009.
Impact Factor 2.157 (Q1)
12. K.P. Migdal, D.K. Il'nitsky, Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, Equations of state, energy transport and two-temperature hydrodynamic simulations for femtosecond laser irradiated copper and gold, J. Phys.: Conf. Ser. 653, 012086 (2015), WoS: 000368507600086, Scopus: 2-s2.0-84959017471.
13. Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, K.P. Migdal, V.A. Khokhlov, K.V. Khishchenko, Thermal conductivity of condensed gold in states with the strongly excited electron subsystem, J. Phys.: Conf. Ser. 653, 012087 (2015), WoS: 000368507600087, Scopus: 2-s2.0-84958970206.
14. Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, K.P. Migdal, Effective frequencies of electronic s-s and s-d collisions in nickel at high electron temperatures caused by femtosecond laser pulses, Izvestiya Kabardino-Balkar State University, 4 (3), 15-20 (2014).
15. N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, S.I. Anisimov, V.V. Zhakhovskii, S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, M.B. Agranat, V.E. Fortov, K.P. Migdal, D.K. Il'nitskii, Yu.N. Emirov, The effect of an ultrashort laser pulse on metals: Two-temperature relaxation,

foaming of the melt, and freezing of the disintegrating nanofoam, J. Opt. Technol., 81(5), 233-249 (2014), WoS: 000338929900002, Scopus: 2-s2.0-84902137675.
Impact Factor 0,615

Для русскоязычных названий сведения приводятся на русском языке и в переводе на английский язык. При этом должно быть понятно, что речь идет об одном и том же документе (например, добавляйте слово «перевод»).

2.11. Опыт руководства научными проектами и участия в них (указываются наименования фондов (организаций), номера, названия проектов и сроки выполнения за последние 5 лет)

Программа фундаментальных исследований Президиума РАН
«Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии» (2018), исполнитель

Программа фундаментальных исследований Президиума РАН
«Теплофизика высоких плотностей энергии» (2015-2017), исполнитель

Программа фундаментальных исследований Президиума РАН
"Энергетика и механика быстропротекающих процессов и самоорганизация в плазменных, газовых и конденсированных средах" (2013-2014), исполнитель

Грант РФФИ 14-19-01599 «Фемтосекундное лазерное плавление, кавитация и абляция в трехмерной геометрии», 2014-2016-2018, исполнитель

Грант РФФИ-16-02-00864 "Термодинамика и кинетика при лазерном воздействии: применение кинетических уравнений и квантово-механического моделирования", исполнитель

Грант РФФИ-16-08-01181 "Формирование наночастиц и генерация ударных волн лазерным воздействием: многофазные и полиморфные структурные превращения", исполнитель

2.12. Планируемое участие в научных проектах (в любом качестве) в 2019 году

Общее количество – 3, из них:

руководство – 0, участие в качестве исполнителя – 3,

а именно:

Гос. задание ИТФ РАН - исполнитель,

подана заявка РФФИ-19-02-00678-а - исполнитель

подана заявка РФФИ-19-08-00817-а - исполнитель

(указываются в том числе грантодатели или заказчики проектов и источник финансирования, например – государственное задание учредителя, гранты РФФИ, ФПИ, РФФИ, иных фондов или иных организаций, государственный контракт (заказчик, программа), иной хозяйственный договор, иные гранты и субсидии).

2.13. Доля рабочего времени, которую планируется выделить на участие в данном проекте в случае победы в конкурсе Фонда -

70 процентов.

Имеется в виду – от полной занятости в рамках трудовых или гражданско-правовых правоотношений, т.е. занятость в свободное от основной работы время также должна учитываться.

2.14. Участие в образовательной деятельности (указывается информация о руководстве аспирантами, адъюнктами, интернами, ординаторами, разработке и чтении новых образовательных курсов в российских и зарубежных вузах)

1. Научный консультант аспиранта Гелиева А.В., защитившего диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук в 2013 г.

2. Разработка и чтение семестрового курса лекций "Квантовая микрофизика" в Московском физико-техническом

институте.

3. Разработка и чтение семестрового курса лекций "Основы современной физики" в Московском физико-техническом институте.

2.15. В 2017 или в 2018 годах участвовал в качестве руководителя проекта, финансируемого Фондом (руководителя направления комплексной научной программы организации) или исполнителя проекта, финансируемого Фондом (комплексной научной программы организации) в следующих проектах (при наличии):

Являлся исполнителем проекта № 14-19-01599, 2014-2016 гг.

Являюсь исполнителем проекта № 14-19-01599 (продление), 2017-2018 гг.

2.16. Контактный телефон, электронный адрес (E-mail)

+79268534996, uvp49@mail.ru

2.17. Участие в проекте:

Основной исполнитель проекта

С условиями конкурса Фонда (в том числе, с пунктами 7 и 8 конкурсной документации) ознакомлен и согласен.
Подтверждаю свое участие в проекте.

Фамилия, имя и отчество	Петров Юрий Васильевич
Данные документа, удостоверяющего личность (серия, номер, сведения о дате и органе выдачи)	<hr/> <hr/> <hr/> Внимание! Данное поле заполняется вручную в печатном экземпляре заявки. Заполнение обязательно!
Адрес проживания	142432 Московская область, г. Черноголовка, ул. Центральная 18, кв. 230
Оператор персональных данных	Российский научный фонд

Я выражаю согласие** на обработку указанным выше оператором персональных данных, внесенных в настоящую форму мною лично.

Обработка Российским научным фондом (адрес: г. Москва, ул. Солянка, д. 12 - 14, строение 3) указанных выше персональных данных может осуществляться **посредством** их сбора, систематизации, накопления, хранения, уточнения, использования, блокирования, распространения на официальном сайте Российского научного фонда, передачи и уничтожения **с целью** проведения экспертизы заявок на конкурсы, проводимые Российским научным фондом, экспертизы проектов и программ, финансируемых Российским научным фондом, подготовки аналитических материалов по конкурсам, долговременного сохранения документированной информации об участниках программ, получивших финансирование Российского научного фонда, общедоступного раскрытия информации о руководителях программ и проектов, финансируемых Российским научным фондом. Указанная обработка моих данных может осуществляться в течение 75 лет со дня заполнения настоящей формы в печатной форме. Хранение настоящей формы может быть поручено ООО «РАЙСВОЛФ» (107150, Москва, ул. Бойцовая, д. 22), оказывающему Российскому научному фонду услуги архивного хранения документов. Настоящее согласие может быть отозвано посредством направления на указанный выше адрес оператора персональных данных заявления с требованием о прекращении обработки персональных данных. Заявление должно содержать номер документа, удостоверяющего личность субъекта персональных данных; сведения о дате выдачи указанного документа и выдавшем его органе, а также собственноручную подпись субъекта персональных данных.

** Заполнение является обязательным в соответствии с требованиями Федерального закона от 27 июля 2006 г. №152-ФЗ «О персональных данных».

Подпись исполнителя проекта _____/Ю.В. Петров/

Дата подписания «___» _____ 2018 г.

Форма 3. Сведения об организации

собираются автоматически на основе регистрационных данных организации, через которую будет осуществляться финансирование ("Форма Т")

3.1. Полное наименование *(приводится в соответствии с регистрационными документами)*

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук

3.2. Сокращенное наименование

ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН

3.3. Наименование на английском языке

L.D. Landau Institute for Theoretical Physics of Russian Academy of Sciences

3.4. Организационно-правовая форма *(указывается по ОКОПФ)*

Федеральные государственные бюджетные учреждения

3.5. Форма собственности *(указывается по ОКФС)*

Федеральная собственность

3.6. Ведомственная принадлежность

Министерство науки и высшего образования РФ

3.7. ИНН, КПП, ОГРН, ОКТМО

5031002141, 503101001, 1035006108895, 46781000

3.8. Адрес

142432, Московская обл., Ногинский р-н, г. Черноголовка, проспект Академика Семенова, д.1а

3.9. Фактический адрес

142432, Московская обл., Ногинский р-н, г. Черноголовка, проспект Академика Семенова, д.1а

3.10. Субъект Российской Федерации

Московская обл

3.11. Должность, фамилия, имя, отчество *(при наличии) руководителя организации*

врио директора, Колоколов Игорь Валентинович

3.12. Контактный телефон

4957029317

3.13. Электронный адрес *(E-mail)*

office@itp.ac.ru

Руководитель организации подтверждает, что:

- ознакомлен с условиями конкурса Фонда и согласен на финансирование проекта, в случае его поддержки, через организацию;
- согласен с пунктами 8, 14, 33, 36 конкурсной документации, иными условиями конкурса;
- подтверждает сведения о руководителе проекта, изложенные в данной заявке;
- организация исполняет обязательства по уплате налогов в бюджеты всех уровней и обязательных платежей в государственные внебюджетные фонды, платежеспособна, не находится в процессе ликвидации, не признана несостоятельной (банкротом), на ее имущество не наложен арест и ее экономическая деятельность не приостановлена;
- в случае признания заявки победителем организация берет на себя следующие обязательства:
 - заключить с членами научного коллектива гражданско-правовые или трудовые (срочные трудовые) договоры;
Если таковые не заключены ранее. В случае, если член научного коллектива не является гражданином Российской Федерации, организацией должны быть выполнены все процедуры, предусмотренные законодательством Российской Федерации при трудоустройстве иностранных граждан.
 - по поручению руководителя проекта выплачивать членам научного коллектива вознаграждение за

- выполнение работ по проекту;
- о ежегодно в установленные сроки представлять отчет о целевом использовании гранта Российского научного фонда.

Руководитель организации гарантирует, что:

- вознаграждение за выполнение работ по реализации проекта будет ежегодно получать каждый член научного коллектива;
- общий размер ежегодного вознаграждения члена научного коллектива не будет превышать 30 процентов от суммы ежегодного вознаграждения всем членам научного коллектива;
Включая установленные законодательством Российской Федерации гарантии, отчисления по страховым взносам на обязательное пенсионное страхование, на обязательное медицинское страхование, на обязательное социальное страхование на случай временной нетрудоспособности и в связи с материнством, на обязательное социальное страхование от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний.
- общий размер ежегодного вознаграждения членов научного коллектива в возрасте до 39 лет включительно не будет меньше 35 процентов от суммы ежегодного вознаграждения всех членов научного коллектива;
- общее число членов научного коллектива (вместе с руководителем научного коллектива) не будет превышать 10 человек;
- научному коллективу будет предоставлено помещение и обеспечен доступ к имеющейся экспериментальной базе для осуществления научного исследования.

Подпись руководителя организации (уполномоченного представителя, действующего на основании доверенности или распорядительного документа), **печать** (при ее наличии) **организации**

В случае подписания формы уполномоченным представителем организации (в т.ч. – руководителем филиала) к печатному экземпляру заявки прилагается копия распорядительного документа или доверенности, заверенная печатью организации.

_____/_____/_____
М.П.

Форма 4. Содержание проекта

4.1. Научная проблема, на решение которой направлен проект

на русском языке

С лазерными технологиями связаны громадные перспективы. Но при этом по многим направлениям поиск ведется вслепую, чисто экспериментальным перебором. Разумеется, из такой ситуации надо выходить. Создание теории, физических моделей, численных подходов к объяснениям и решениям – вот современный стиль, соединяющий физику и производство. В таком стиле удастся быстро двигаться от непонятого явления или самой невероятной идеи к ее практическому воплощению.

Приведем несколько примеров.

Пример 1. Еще недавно формирование бугорков на тонких пленках при остром лазерном воздействии с фокусировкой на дифракционном пределе не имело ни внятных объяснений, ни физической модели, ни расчетных методик. Между тем, явление известно из экспериментов уже достаточно давно, с 2003-2004 гг. [1]. Создание теории, сопровождающей данный процесс, позволило понять теплофизику и механику явлений, происходящих в сверхмалых объемах за фемто-пико-нано-секундные (фс-пс-нс) времена с иерархическим каскадом разновременных процессов [2]. В результате теперь есть возможности управления выращиванием «бугорков-куполов-конусов» (блистеринг тонкопленочных покрытий) заданных размеров и формы (скажем, с острием на вершине).

Это важно для настройки наноантенн, в качестве которых используются «бугорки» [3]. Соответственно можно задавать требуемую окраску поверхности (и это без красителей) при ее освещении белым светом или оптимизировать работу метаповерхности из массива бугорков в качестве сенсора [3].

Другое важное направление связано с применением бугорков в качестве генераторов капель, летящих точно в заданном направлении, в устройствах лазерной печати LIFT/LIBT (laser induced forward/backward transfer). Полная теория создана [2]. С помощью такой печати теперь создают мозаики для целей микроэлектроники (формирование чипов) и медицины (искусственные ткани организма), а также сложные трехмерные микроконструкции, см. работы израильской группы из Additive Manufacturing Lab, Orbotech Ltd. и the Hebrew University of Jerusalem [4] и группы из университета Твенте (University of Twente), Голландия [5].

Пример 2. Другой важный пример связан с объяснением происхождения интерференционных колец Ньютона к тому же с растущим по времени числом колец [6] (на сегодня имеется от 300 до 600 ссылок на эту статью в разных системах цитирования; явление обнаружено фактически случайно в опытах группы проф. Dietrich von der Linde, University of Duisburg-Essen). Благодаря созданию теории [7], и соответственно четкого понимания, теперь эти кольца применяются в качестве важного диагностического приема [8] для наблюдения за происходящим в пятне облучения на пс-нс временах. Более того, прием с кольцами Ньютона используется для слежения [9] с помощью лазера на мягком рентгене ($\lambda=13.9$ нм) за динамикой надувания пузыря расплава золота после фемтосекундного оптического воздействия (такое воздействие имеет характер резкого удара). Надо ли говорить, что применение столь коротких волн [9] для интерференции открывает новые возможности в технике pump-probe зондирования.

Пример 3. Благодаря работе над проектом РНФ 14-19-01599 вместе с созданием теории формирования куполов [2,3] была создана теория и проведено моделирование 3Д фрагментации капель олова, см. работу [7] в списке ссылок к п. 1.4. И опять разработка опиралась на гибридную модель с разделением поверхностной зоны первичного нагрева лазером и дальнейшую кумуляцию волны сжатия по направлению к центру капли. Причем с существенными отклонениями от сферической симметрии, например, максимум давления достигается на некотором расстоянии за центром по отношению к облученной полусфере.

Аналогичным является положение с пунктом В) раздела 1.5 (абляция в жидкость). Работы были начаты с поддержкой от гранта РНФ 14-19-01599. Теперь их необходимо продолжить с упором уравнение состояния и теплопроводность воды; это необходимо, чтобы дойти от начальных стадий до образования пузырька. Опять же работы ведутся гибридным способом, с сочетанием молекулярно-динамических, SPH кодов и программы двухтемпературной гидродинамики. Есть уверенность, что данная фундаментальная и очень важная для приложений работа в рамках нового проекта РНФ будет выполнена. А именно, будет выявлена и продемонстрирована экспериментаторам сквозная цепь процессов от начальных стадий с поглощением излучения до финальных стадий с эволюцией пузырька в жидкости. Такого рода исследования позволят намного упростить и удешевить производство наночастиц лазерным методом. Главное, появится возможность осмысленно управлять процессом и т.о. создавать наночастицы с требуемой структурой, например, оболочечные (core-shell particles).

Перейдем к описанию проблем 3 и И

3) Роль процессов электронной и фоновой теплопроводности в эволюции поверхности твердотельной кремниевой мишени после ультракороткого лазерного воздействия умеренной интенсивности. Кремний – один из тех материалов, для которых имеют огромную актуальность исследования по возможности обработки его поверхности на наномасштабе и получения поверхностных наноструктур заданной формы в результате протекающих после облучения процессов. При облучении, как правило, первично поверхность находится в твердой фазе. Поскольку твердый кремний является полупроводником, при температурах около комнатной доминирующий вклад в теплопроводность определяется фононами и оказывается одного уровня с типичными значениями для металлов (150 Вт/м/К). С повышением температуры упорядоченность решётки кремния падает, как и время жизни фонона, вследствие чего теплопроводность кремния при температурах выше 1000 К, но ниже температуры плавления имеет значение, на порядок меньшее, чем при комнатной температуре. Электронный вклад в теплопроводность становится заметным только после плавления решётки кремния, когда электронный спектр становится непрерывным в области энергии Ферми.

Описанная здесь картина отражает качественно поведение теплопроводности кремния с ростом температуры, какой может наблюдаться при ультракоротком лазерном воздействии. При описании такого воздействия с помощью метода двухтемпературной гидродинамики потребуется не только количественное описание полной теплопроводности в зависимости от температуры и плотности кремния, но и разделение её на вклады, соответствующие переносу электронами и решёткой/ионами. Эта задача будет решаться с помощью современных подходов по расчётам корреляторов «поток-поток» в рамках квантовой и классической молекулярной динамики (методы Кубо-Гринвуда и Грина-Кубо). В первом случае речь идёт об определении вклада электронов в теплопроводность, а во втором – решётки или ионов, если речь идёт о расплавленном состоянии.

И) Первопринципные расчёты константы электрон-фононного взаимодействия в двухтемпературных металлах в сравнении с данными симуляции электрон-фононной релаксации методом эффективного силового поля в рамках молекулярной динамики. В современных расчётах модификации поверхностей металлов с помощью ультракороткого лазерного облучения одним из ключевых параметров является темп электрон-фононного теплообмена, который определяет характерное время электрон-ионной релаксации, а также профили распределения температур электронов и ионов, и их давления в облученном приповерхностном слое. Существует несколько методов для расчёта данной величины, среди которых можно отметить метод Каганова-Лифшица-Танатарова, адаптированный авторами для двухзонных металлов (Петров, Иногамов, Мигдал, П. ЖЭТФ, 97, 24, 2013), метод Аллена (P. V. Allen, Phys.Rev.Lett, 1987) для однозонных металлов, расширенный на произвольный случай X. Wang et al (Phys. Rev. B 50, 8016, 1994). В основе второго подхода на всем протяжении с момента формулировки обобщения используется предположение о слабом изменении фононных характеристик с ростом электронной температуры. Данное предположение идеологически близко к популярной гипотезе о том, что решёточные характеристики при электронном нагреве не меняются, что лежит в основе модели двухтемпературного состояния. Однако, с развитием методов первопринципных вычислений было показано, что плотность фононных состояний будет меняться с нагревом в таких металлах, как золото или медь (V. Recoules et al, Phys. Rev. Lett, 96, 055503, 2006; D. V. Minakov, P. R. Levashov, Phys. Rev. B, 224102, 2015).

В рамках метода Аллена-Даунера существует необходимость в использовании экспериментально определенной константы электрон-фононного взаимодействия, которая определяется при низких температурах, соответствующих сверхпроводящему состоянию металла. Не проверялось, насколько использование такого численного значения в металлах, обладающих высокими электронными и ионными температурами, может оказать влияние на результат для темпа электрон-фононного взаимодействия. Такие методы первопринципных расчётов, как метод замороженных фононов и теория возмущения функционала плотности позволяют рассчитать силовые постоянные для металлов как в равновесии, так и в двухтемпературном состоянии, что позволяет определить константу электрон-фононного взаимодействия и для этого случая. Таким образом, планируется проверить справедливость используемого в литературе метода расчёта электрон-фононного теплообмена.

Кроме того, предлагается провести непосредственное моделирование электрон-фононного (электро-ионного) теплообмена в упрощенной модели electron force field, где используется полуклассическое описание валентных электронов с помощью локализованных гауссовых пакетов. В этом случае появляется возможность проследить характерные масштабы электронной и фоновой термализации, т.е. время начала двухтемпературной стадии, а также оценить непосредственно из поведения электронной и ионной температур в течение моделирования темп электрон-фононного теплообмена.

Подводя итоги данного пункта 4.1, можно сказать, имеется широкий спектр задач, важное научное направление, связанное с фундаментальными проблемами лазерного воздействия на вещество. Заявляемый проект покрывает набор важных задач в этом направлении. Выполнение проекта поможет эксперименту и ускорит переход к конкретным технологиям.

Литература к п. 4.1

- [1] Y. Nakata, T. Okada, M. Maeda, Jpn. J. Appl. Phys. V. 42, L1452 (2003);
F. Korte, J. Koch, B.N. Chichkov, Appl. Phys. A V. 79, 879 (2004);
Y. Nakata, K. Tsuchida, N. Miyanaga, T. Okada, J. Laser Micro Nanoeng. (JLMN) V. 3(2), 63–66 (2008);
A.I. Kuznetsov, J. Koch, B.N. Chichkov, Appl. Phys. A V. 94, 221–230 (2009);
Y. Nakata, T. Hiromoto, N. Miyanaga, Appl. Phys. A V. 101, 471 (2010);
C. Unger, J. Koch, L. Overmeyer, B.N. Chichkov, Opt. Express V. 20(22), 24864 (2012);
D. Wortmann, J. Koch, M. Reininghaus, C. Unger, C. Hulverscheidt, D. Ivanov, B.N. Chichkov, J. Laser Appl. V. 24, 042017 (2012);
A.I. Kuznetsov, C. Unger, J. Koch, B.N. Chichkov, Appl. Phys. A V. 106, 479–487 (2012)
- [2] Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, Формирование наноразмерных струек и капель ультракоротким лазерным импульсом при фокусировке на дифракционном пределе, Письма ЖЭТФ Т. 100 (1), 6-12 (2014);
Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, В.А. Хохлов, Струеобразование при отрыве металлической пленки от подложки в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса, ЖЭТФ Т. 147 (1), 20-56 (2015);
N. A. Inogamov and V. V. Zhakhovsky, Surface 3D nanostructuring by tightly focused laser pulse: simulations by Lagrangian code and molecular dynamics, Journal of Physics: Conference Series V. Т. 681, 012001 (2016);
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 V. 122, 432 (9 pages) (2016);
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 V. 11, 177 (2016);
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 острогофокусированным лазерным пучком, Квантовая электроника, т. 47, № 6, 509-521 (2017);
N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov, Laser ablation caused by geometrically constrained illumination and inventive target design, Journal of Physics: Conf. Series V. 946, 012008 (2018)
- [3] X.W. Wang, A.A. Kuchmizhak, X. Li, S. Juodkazis, O.B. Vitrik, Yu.N. Kulchin, V.V. Zhakhovsky, P.A. Danilov, A.A. Ionin, S.I. Kudryashov, A.A. Rudenko, and N.A. Inogamov, Laser-Induced Translative Hydrodynamic Mass Snapshots: Noninvasive Characterization and Predictive Modeling via Mapping at Nanoscale, Phys. Rev. Appl. V. 8, 044016 (2017)
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. V. 104(11), 759-765 (2016)
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 V. 8, 12352-12361 (2016)
- [4] Michael Zenou and Zvi Kotler, Printing of metallic 3D micro-objects by laser induced forward transfer, Optics Express Vol. 24, Issue 2, pp. 1431-1446 (2016) <https://doi.org/10.1364/OE.24.001431>
- [5] Ralph Pohl, Claas Willem Visser, Gert-Willem Römer, Detlef Lohse, Chao Sun, and Bert Huis in 't Veld, Ejection Regimes in Picosecond Laser-Induced Forward Transfer of Metals, Phys. Rev. Applied V. 3, 024001 (2015) DOI: 10.1103/PhysRevApplied.3.024001
- [6] K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, A. Cavalleri, D. von der Linde, A. Oparin, J. Meyer-ter-Vehn, and S. I. Anisimov, Transient States of Matter during Short Pulse Laser Ablation, Phys. Rev. Lett. V. 81, 224 (1998)
- [7] Н.А. Иногамов, А.М. Опарин, Ю.В. Петров, Н.В. Шапошников, С.И. Анисимов, Д. фон дер Линде, Ю. Майер-тер-Фен, Разлет вещества, нагретого ультракоротким лазерным импульсом, Письма в ЖЭТФ, Т. 69 (4), 284-289 (1999);
S.I. Anisimov, N.A. Inogamov, A.M. Oparin, B. Rethfeld, T. Yabe, M. Ogawa, V.E. Fortov, Pulsed laser evaporation: equation-of-state effects, Appl. Phys. A V. 69 (6), 617-620 (1999);
В.В. Жаховский, К. Нишихара, С.И. Анисимов, Н.А. Иногамов, Молекулярно-динамическое моделирование волн разрежения в средах с фазовыми переходами, Письма в ЖЭТФ, Т. 71 (4), 241-248 (2000)
- [8] Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, С.И. Ашитков, Ю.В. Петров, М.Б. Агранат, С.И. Анисимов, К. Нишихара, В.Е. Фортов, О нанотолке после воздействия ультракороткого лазерного импульса, ЖЭТФ, Т. 134(1), 5-28 (2008)
- [9] 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, X-Ray Lasers 2016, Proceedings of the 15th International Conference on X-Ray Lasers, Editors: Kawachi, T., Bulanov, S.V., Daido, H., Kato, Y. (Eds.)

на английском языке

Great prospects are associated with laser technology. But the prospecting works are mostly performed on the off-chance with

using the trial-and-error procedure in experiments. We have to get out of this situation by creating the theoretical approaches, physical models, numerical methods aimed to provide explanations and solutions. This is the modern style that combines physics and development of new technology. In this style, it is possible to move quickly from an incomprehensible phenomenon or the most incredible idea to its practical implementation.

Let's give some examples.

Example 1. Yet recently, the formation of bumps on thin films during a tightly focused laser exposure with focusing on the diffraction limit did not have any clear explanations, no physical model, or computational techniques. But the phenomenon has been known from experiments for quite some time, from 2003-2004 [1]. The creation of a theory describing this process made it possible to understand the thermophysics and mechanics of the phenomena occurring in ultralow volumes during femto-pico-nano-second (fs-ps-ns) times with a hierarchical cascade of different-time processes [2]. As a result, there are now possibilities to control the cultivation of "bumps-domes-cones" (blistering thin-film coatings) of given sizes and shapes (say, with a tip on top).

This is important for tuning the nanoantennas, which can be considered as "bumps" [3]. Accordingly, it is possible to set the desired color of the surface (without the usage of any dyes) illuminated with white light, or to optimize the meta-surface of bump array working as a sensor [3].

Another important direction involves the use of bumps as generators of droplets flying exactly in a given direction in LIFT/LIBT laser printing devices (laser induced forward / backward transfer). The complete theory is created in [2]. Using such printing, complex mosaics are now created for microelectronics (chip formation) and medicine (artificial tissues of the body), as well as complex three-dimensional microstructures, see the works of the Israeli group from the Additive Manufacturing Lab, Orbotech Ltd. and the Hebrew University of Jerusalem [4] and groups from the University of Twente, Holland [5].

Example 2. Another important example is related to the explanation of Newton's interference rings with the growing number of rings [6] (today there are 300 to 600 references to this article in different citation systems; the phenomenon was discovered virtually by chance in the experiments by the group of Prof. Dietrich von der Linde from University of Duisburg-Essen). Thanks to the developed theory [7], now this phenomenon is well understood and it is used in an important diagnostic technique [8] to observe what is happening in the irradiation spot at ps-ns times. Moreover, with using a soft X-ray laser ($\lambda = 13.9$ nm) such Newton's rings are used for tracking [9] the dynamics of inflating bubble in molten gold after a femtosecond optical pump (such irradiation has the character of a shock). Needless to say, the use of such short waves [9] for interference opens up new opportunities for improvement of the pump-probe technique.

Example 3. Thanks to the work on the project RSF 14-19-01599, in addition to the creation of the theory of dome formation [2,3] a theory of 3D fragmentation of tin droplets was developed and corresponding simulation was performed, see [7] in the list of references to p. 1.4. And again, the development was based on a hybrid model with the separation of the surface layer of primary heating by a laser pulse and further cumulation of the compression wave towards the center of the droplet. It occurs with significant deviations from spherical symmetry - for example, the pressure maximum is reached at some distance beyond the center with respect to the irradiated hemisphere.

Similar situation happens with paragraph B) of section 1.5 (ablation into a liquid). The work was started with support from the grant of the RSF 14-19-01599. Now they need to be continued with an emphasis on the equation of state and thermal conductivity of water; it is necessary to go from the initial stages to the formation of a bubble. Again, work is being done in a hybrid way, with a combination of molecular dynamics, SPH code, and two-temperature hydrodynamics programs. There is confidence that this fundamental and very important work for applications in the framework of the new RSF project will be completed. Namely, an end-to-end chain of processes from the initial stages with radiation absorption to the final stages with the evolution of a bubble in a liquid will be revealed and demonstrated to experimenters. This kind of research will greatly simplify and cheapen the manufacturing of nanoparticles by the laser method. The point is to get an opportunity for meaningful control of the processes, which opens doors to create nanoparticles with the required structure, for example, shell-core (core-shell particles).

We turn to the description of the problems of H and I.

H) The role of electron and phonon heat conduction processes in the evolution of the surface of a solid-state silicon target after ultrashort laser irradiation of moderate intensity.

Silicon is one of those materials for which the research on the possibility of treating its surface at the nanoscale and obtaining surface nanostructures of a given shape as a result of processes occurring after irradiation is of great relevance. When irradiated, as a rule, the primary surface is in the solid phase. Since solid silicon is a semiconductor, at temperatures about room temperature, the dominant contribution to thermal conductivity is determined by phonons and turns out to be at the same level with typical values for metals (150 W / m / K). With an increase in temperature, the orderliness of the silicon

lattice decreases, as does the phonon lifetime, as a result of which the thermal conductivity of silicon at temperatures above 1000 K, but below the melting point, is of an order of magnitude less than at room temperature. The electronic contribution to thermal conductivity becomes noticeable only after the melting of the silicon lattice, when the electronic spectrum becomes continuous in the region of the Fermi energy.

The picture described here reflects the qualitative behavior of the thermal conductivity of silicon with increasing temperature, which can be observed with ultrashort laser irradiation. When describing such an effect using the two-temperature hydrodynamics method, we will need not only a quantitative description of the total thermal conductivity depending on the temperature and density of silicon, but also its separation into contributions corresponding to electron and lattice/ion transfer. This task will be solved with the help of modern approaches to the calculations of flow-to-flow correlators within the framework of quantum and classical molecular dynamics (Kubo-Greenwood and Green-Kubo methods). In the first case, we are talking about determining the contribution of electrons to thermal conductivity, and in the second case, the lattice or ions, if we are talking about the molten state.

l) First-principle calculations of the electron-phonon interaction constant in two-temperature metals in comparison with the simulation data of electron-phonon relaxation by the method of an effective force field within the framework of molecular dynamics.

In conclusion of this section 4.1, we can say that there are a wide range of tasks and an important scientific direction related to the fundamental problems of laser exposure of materials. The claimed project covers a set of important tasks in this direction. Implementation of the project goals will help the experiment and accelerate the transition to required technologies.

In modern calculations of metal surface modification using ultrashort laser irradiation, one of the key parameters is the rate of electron-phonon heat transfer, which determines the characteristic time of electron-ion relaxation, as well as temperature profiles of electrons and ions, and their pressure in the irradiated surface layer. There are several methods for calculating this value, among which we can mention the Kaganov-Lifshits-Tanatarov method, adapted by the authors for two-zone metals (Petrov, Inogamov, Migdal, P. ZhETF, 97, 24, 2013), the Allen method (PB Allen, Phys. Rev.Lett, 1987) for single-band metals, extended to the arbitrary case by X. Wang et al (Phys. Rev. B 50, 8016, 1994). The second approach is based on the entire length from the moment of the formulation of the generalization, on the assumption of a weak change in the phonon characteristics with increasing electron temperature. This assumption is ideologically close to the popular hypothesis that the lattice characteristics during electronic heating do not change, which underlies the model of a two-temperature state. However, with the development of first-principle calculations, it has been shown that the density of phonon states will change with heating in metals such as gold or copper (V. Recoules et al, Phys. Rev. Lett, 96, 055503, 2006; DV Minakov, PR Levashov, Phys. Rev. B, 224102, 2015).

In the framework of the Allen-Downer method, there is a need to use an experimentally determined electron-phonon interaction constant, which is determined at low temperatures, corresponding to the superconducting state of the metal. It has not been tested to what extent the use of such a numerical value in metals with high electron and ion temperatures can affect the result for the electron-phonon interaction rate. Such methods of first-principle calculations, like the frozen phonon method and the density functional perturbation theory, allow us to calculate the force constants for metals both in equilibrium and in the two-temperature state, which allows us to determine the electron-phonon interaction constant for this case as well. Thus, it is planned to check the validity of the method of calculation of electron-phonon heat transfer used in the literature.

In addition, it is proposed to conduct a direct simulation of the electron-phonon (electron-ion) heat exchange in a simplified model of the electron force field, which uses a semiclassical description of the valence electrons using localized Gaussian packets. In this case, it is possible to trace the characteristic scales of electron and phonon thermalization, i.e. the start time of the two-temperature stage, and also to estimate directly from the behavior of the electron and ion temperatures during the simulation, the rate of electron-phonon heat exchange.

Literature to 4.1

- [1] Y. Nakata, T. Okada, M. Maeda, Jpn. J. Appl. Phys. V. 42, L1452 (2003);
- F. Korte, J. Koch, B.N. Chichkov, Appl. Phys. A V. 79, 879 (2004);
- Y. Nakata, K. Tsuchida, N. Miyanaga, T. Okada, J. Laser Micro Nanoeng. (JLMN) V. 3(2), 63–66 (2008);
- A.I. Kuznetsov, J. Koch, B.N. Chichkov, Appl. Phys. A V. 94, 221–230 (2009);
- Y. Nakata, T. Hiromoto, N. Miyanaga, Appl. Phys. A V. 101, 471 (2010);
- C. Unger, J. Koch, L. Overmeyer, B.N. Chichkov, Opt. Express V. 20(22), 24864 (2012);
- D. Wortmann, J. Koch, M. Reininghaus, C. Unger, C. Hulverscheidt, D. Ivanov, B.N. Chichkov, J. Laser Appl. V. 24, 042017 (2012);
- A.I. Kuznetsov, C. Unger, J. Koch, B.N. Chichkov, Appl. Phys. A V. 106, 479–487 (2012)

- [2] Inogamov, N. A., Zhakhovskii, V. V. Formation of nanojets and nanodroplets by an ultrashort laser pulse at focusing in the diffraction limit JETP Letters, 100, 4-10 (2014);
 Inogamov, N. A.; Zhakhovskii, V. V., Khokhlov, V. A. Jet Formation in Spallation of Metal Film from Substrate under Action of Femtosecond Laser Pulse JETP, 120, 15–48 (2015);
 N. A. Inogamov and V. V. Zhakhovskiy, Surface 3D nanostructuring by tightly focused laser pulse: simulations by Lagrangian code and molecular dynamics, Journal of Physics: Conference Series V. T. 681, 012001 (2016);
 N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, 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 V. 122, 432 (9 pages) (2016);
 N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, V.A. Khokhlov, Yu.V. Petrov, and K.P. Migdal, Solitary Nanostructures Produced by Ultrashort Laser Pulse, Nanoscale Research Letters V. 11, 177 (2016);
 Anisimov, S. I.; Zhakhovskii, V. V.; Inogamov, N. A.; Murzov, S. A. & Khokhlov, V. A. Formation and crystallisation of a liquid jet arising under irradiation of a film by a tightly focused laser beam, Quantum Electron., 47, № 6, 509-521 (2017);
 N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskiy, V.A. Khokhlov, Laser ablation caused by geometrically constrained illumination and inventive target design, Journal of Physics: Conf. Series V. 946, 012008 (2018)
- [3] X.W. Wang, A.A. Kuchmizhak, X. Li, S. Juodkazis, O.B. Vitrik, Yu.N. Kulchin, V.V. Zhakhovskiy, P.A. Danilov, A.A. Ionin, S.I. Kudryashov, A.A. Rudenko, and N.A. Inogamov, Laser-Induced Translative Hydrodynamic Mass Snapshots: Noninvasive Characterization and Predictive Modeling via Mapping at Nanoscale, Phys. Rev. Appl. V. 8, 044016 (2017)
 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. Zhakhovskiy, N.A. Inogamov, Redistribution of a Material at Femtosecond Laser Ablation of a Thin Silver Film, JETP Lett. V. 104(11), 759-765 (2016)
 A. Kuchmizhak, O. Vitrik, Yu. Kulchin, D. Storozhenko, A. Mayor, A. Mirochnik, S. Makarov, V. Milichko, S. Kudryashov, V. Zhakhovskiy, N. Inogamov, Laser printing of resonant plasmonic nanovoids, Nanoscale V. 8, 12352-12361 (2016)
- [4] Michael Zenou and Zvi Kotler, Printing of metallic 3D micro-objects by laser induced forward transfer, Optics Express Vol. 24, Issue 2, pp. 1431-1446 (2016) <https://doi.org/10.1364/OE.24.001431>
- [5] Ralph Pohl, Claas Willem Visser, Gert-Willem Römer, Detlef Lohse, Chao Sun, and Bert Huis in 't Veld, Ejection Regimes in Picosecond Laser-Induced Forward Transfer of Metals, Phys. Rev. Applied V. 3, 024001 (2015) DOI: 10.1103/PhysRevApplied.3.024001
- [6] K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, A. Cavalleri, D. von der Linde, A. Oparin, J. Meyer-ter-Vehn, and S. I. Anisimov, Transient States of Matter during Short Pulse Laser Ablation, Phys. Rev. Lett. V. 81, 224 (1998)
- [7] N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, S.I. Anisimov, A.M. Oparin, N.V. Shaposhnikov, D. Von der Linde, J. Meyer-ter-Vehn, Expansion of matter heated by an ultrashort laser pulse, JETP Lett., 69(4), 310-316 (1999);
 S.I. Anisimov, N.A. Inogamov, A.M. Oparin, B. Rethfeld, T. Yabe, M. Ogawa, V.E. Fortov, Pulsed laser evaporation: equation-of-state effects, Appl. Phys. A V. 69 (6), 617-620 (1999);
 Zhakhovskii, V. V.; Nishihara, K.; Anisimov, S. I., Inogamov, N. A. Molecular-dynamics simulation of rarefaction waves in media that can undergo phase transitions JETP Lett., 71(4), 167-172 (2000)
- [8] Inogamov, N. A.; Zhakhovskii, V. V.; Ashitkov, S. I.; Petrov, Y. V.; Agranat, M. B.; Anisimov, S. I.; Nishihara, K. & Fortov, V. E. Nanospallation induced by an ultrashort laser pulse, JETP, 2008, 107(1), 1-19 (2008)
- [9] 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, X-Ray Lasers 2016, Proceedings of the 15th International Conference on X-Ray Lasers, Editors: Kawachi, T., Bulanov, S.V., Daido, H., Kato, Y. (Eds.)

4.2. Научная значимость и актуальность решения обозначенной проблемы

на русском языке

Вопросы значимости и своевременности исследований по перечисленным в п. 1.5 проблемам обсуждались в предыдущих пунктах. Вкратце суммируем сказанное. Перечень проблем (из п. 1.5), подлежащих решению, следующий:

- А) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазменных и лазерных ЭМ полей
- Б) Действие вихревых пучков
- В) Образование наночастиц при абляции в жидкость
- Г) Лазерная фрагментация жидких капель и струй
- Д) Абляция тугоплавких металлов
- Е) Лазерное плавление порошков
- Ж) Вычислительная физика, крупномасштабное высокопроизводительное численное моделирование.

Опишем значимость и актуальность конкретно, по пунктам.

З) Характеристики кремния, облученного лазером

И) Новые подходы к расчетам коэффициента электрон-ионного взаимодействия в металлах

Опишем значимость и актуальность конкретно, по пунктам.

А) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазменных и лазерных ЭМ полей

Задача представляет большой интерес для электроники, плазмоники, для создания голограмм, для изготовления метаповерхностей, см. работы [1] и [4] в списке литературы к п. 1.4. По плазмонике ежегодно проводится несколько международных конференций. Недавно в г. Сочи прошла одна из таких конференций: METANANO 2018: <https://metanano.ifmo.ru/> собравшая около полутысячи участников и еще большее количество презентаций (работа [4] из п. 1.4 была представлена на METANANO-2018). С программным докладом выступил Андрей Гейм, нобелевский лауреат 2010 г.

Предлагаемая нами проблема представляет достаточно новое, перспективное направление в плазмонике. Речь идет о сопряжении задач плазмоники, которые имеют характер прикладной электродинамики, с возможностями современной физики взаимодействия интенсивного электромагнитного излучения с веществом. В этом случае становятся существенными роли нагрева/кристаллизации и механических эффектов, приводящие к трансформации мишени. Эта трансформация будет использована для формирования метаповерхностей.

Путь комбинации лазерного излучения и поверхностных плазмон-поляритонных мод для формирования голограмм, метаповерхностей является намного более экономичным, чем «вырезание» рельефа метаповерхности бомбардировкой электронами электронного луча в вакууме.

Б) Действие вихревых пучков

Сказанное выше по поводу применений комбинированного лазерно-плазмонного действия относится и к разделу о приложениях вихревых пучков; это формирование метаповерхностей. Кроме того, имеется ряд приложений, которые связаны именно с хиральностью закруток вершин. Массивы вихревых уединенных вершин (вихревая метаповерхность) предлагается использовать для создания сверхчувствительных сенсоров, фильтрации молекул в зависимости от их хиральности (например, очистка лекарств), для формирования хиральных плазмонных устройств, в которых освещение структуры возвращает в отраженном свете вихревую волну (которые заменяют фазовые пластинки), см. [5] в п. 1.4.

Т.о. возникает новый вариант фундаментальной проблемы, относящейся к физике взаимодействия лазерного излучения с веществом.

В) Образование наночастиц при абляции в жидкость

Лазерное формирование наночастиц имеет ряд преимуществ по сравнению с более дешевыми, но более многоступенчатыми и «грязными» средствами химического синтеза. К тому же к некоторым из структурированных наночастиц не удается подступиться химикам. Подробная информация имеется в год назад опубликованных обзорах по лазерной фабрикации наночастиц в жидкостях (приготовление коллоидных растворов наночастиц), см. [12] к п. 1.4. На рис. 5 в приложенном п.4.14 файле 2 показана схема приложений лазерного синтеза коллоидов.

Согласно статистике, собранной в статье Xiao et al., Progress in Materials Science V. 87, 140-220 (2017), см. [12] в п. 1.4, число публикаций по абляции в жидкости экспоненциально растет последние несколько лет и превысило 300 статей в год, а число цитирований достигло 7000 в год. Это свидетельствует о востребованности и актуальности тематики.

Г) Лазерная фрагментация жидких капель и струй

В случае с оловянными каплями приложения связаны с проектами создания плазменных источников коротковолнового излучения: мягкого рентгена – вакуумного ультрафиолета, которые составляют основу фотолитографических машин следующего поколения. Такие машины будут иметь гораздо большую разрешающую способность, поскольку резко уменьшится дифракционный предел, пропорциональный длине волны. Проектом занимается такой гигант, лидер в производстве машин для фотолитографии, как ASML, Голландия. Это так сказать производство средств производства, поскольку далее машины применяются в микроэлектронной промышленности для изготовления интегральных микросхем, устройств памяти и микропроцессоров.

В случае с водными каплями и струями и их облучением ультракоротким импульсом жесткого рентгена от американского XFEL лазера на SLAC, интерес представляет физика взаимодействия рентгена с жидкой средой, см. комментарии в статьях [14] к п. 1.4 проекта.

Д) Абляция тугоплавких металлов

Физика абляции металлов представляет самостоятельный интерес. На сегодня хорошо изучены в этом отношении золото, серебро, алюминий. Имеется ряд публикаций по этим металлам, в том числе много работ нашего коллектива. Из тугоплавких металлов в наших теоретических работах и работах совместно с экспериментаторами из отдела лазерной плазмы М.Б. Аграната в ОИВТ РАН был проанализирован тантал.

Рутений, детальное изучение которого будет выполнено в проекте, это малоизученный металл. Достаточно сказать, что в литературе имеется только две довольно старые публикации по EAM потенциалу рутения (M. Igarashi, M. Khantha, V. Vitek, "N-body interatomic potential for hexagonal close-packed metals", Phil. Mag. B, 63, 603-627 (1991), S. Chen, J. Xu, H. Zhang, "A new scheme of many-body potentials for hcp metals", Computational Materials Science, 29, 428–436 (2004)). Они описывают рутений в малой окрестности равновесной плотности и комнатных температур. Между тем, для наших целей необходим потенциал, пригодный при значительных растяжениях и заметных сжатиях и при сильных нагревах, что соответствует условиям лазерного облучения оптическими и рентгеновскими лазерами.

Ценность исследования в том, что рутений – это важный материал рентгеновской оптики, а также материал защитных пленок, в том числе и в фотолитографических машинах, обсуждавшихся выше.

Е) Лазерное плавление порошков

Технологии 3D принтинга, называемые также аддитивными технологиями, весьма популярны в СМИ. Говорится о всемогуществе такого рода производства. На самом деле на сегодня с этими процессами связано много фундаментальных проблем. Наиболее существенные из них, относящиеся именно к лазеру, будут рассмотрены в нашем проекте. Без решения этих проблем невозможно успешное продвижение на данном направлении.

Ж) Вычислительная физика, крупномасштабное высокопроизводительное численное моделирование
Алгоритмы, ускорение вычислений, использование многопроцессорных кодов, расширение пространственно-временных масштабов (в случае с молекулярной динамикой) – вот актуальные вызовы, которые стоят перед вычислительной физикой. В нашем проекте будет выполнено существенное продвижение по совершенствованию программных комплексов, по насыщению их реальной физикой.

Такая физика включает в себе множество составляющих – от описания поглощения лазерной энергии до процессов переноса тепла, диффузии, моделирования сложных, зачастую трехмерных движений расплавов и деформируемого твердого тела с пакетом упруго-пластических явлений плюс фазовые переходы плавление/кристаллизация, интенсивное испарение, охлаждение и конденсация. Причем, как правило, процессы протекают быстро и зачастую далеки от термодинамического равновесия.

Этот раздел работы имеет исключительно ясное практическое значение.

З) Характеристики кремния, облученного лазером

При описании теплопроводности возбужденной ультракоротким лазером электронной подсистемы кремния до сих пор используются полученные из справочников значения, не учитывающие эволюцию данной величины, кроме наиболее резкого её изменения в точке плавления. В то же время проведенные ранее авторами исследования показали важность адекватного определения зависимости коэффициента теплопроводности от электронной и ионной температур и плотности. Сама актуальность исследования обработки поверхности кремниевых пленок ультракоротким лазером и решение связанных с этим задач не вызывает сомнений, так как может рассматриваться как один из перспективных методов обработки поверхности с разрешением несколько десятков нанометров.

И) Новые подходы к расчетам коэффициента электрон-ионного взаимодействия в металлах

Как было упомянуто выше, в разделе 4.1, для решения задачи о темпе электрон-фононного теплообмена используются всего два распространенных способа (модифицированный метод Каганова-Лифшица-Танатарова и метод Аллена-Даунера), между которыми не существует однозначной теоретической связи, что позволило бы установить границы их взаимной совместимости. Нужно отметить, что данные, полученные вторым путем, наиболее распространены в сторонних источниках, в которых зависимости электрон-фононного теплообмена от электронной температуры использованы для решения различных задач на условия протекания электрон-ионной релаксации. При этом оценка учёта влияния электронного нагрева на фонный спектр и на результаты метода Аллена-Даунера представляется одной из важных задач. Для расчета электрон-ионной релаксации будет использован современный подход электронного силового поля (electron force field), применимый для описания такой релаксации в разных фазах нагретого вещества.

на английском языке

Relevance and timeliness of research on the problems listed in section 1.5 were discussed in the previous sections. Briefly

summarize what has been said. The list of problems (from section 1.5) to be solved is as follows:

- A) Spatially distributed heating due to a combination of plasmon and laser EM fields
- B) Action of vortex beams
- C) The formation of nanoparticles during ablation into a liquid
- D) Laser fragmentation of liquid droplets and jets
- E) Ablation of refractory metals
- F) Laser melting of powders
- G) Computational physics, large-scale high-performance numerical simulation

We describe the importance and relevance specifically, by points.

A) Spatially distributed heating due to a combination of plasmon and laser EM fields

The task is of great interest for electronics, plasmonics, for the creation of holograms, for the manufacture of meta-surfaces, see [1] and [4] in the references to 1.4. In plasmonics, several international conferences are held annually. Recently in Sochi one of the following conferences took place: METANANO 2018: <https://metanano.ifmo.ru/> which gathered about half a thousand participants and even more presentations (the work [4] from section 1.4 was presented at METANANO-2018). A keynote address was made by Andrei Geim, Nobel Prize winner in 2010.

The problem proposed by us is a fairly new, promising direction in plasmonics. We are talking about the conjugation of plasmonic problems, which have the character of applied electrodynamics, with the possibilities of modern physics of the interaction of intense electromagnetic radiation with matter. In this case, the role of heating/crystallization and mechanical effects, leading to the transformation of the target, become essential. This transformation will be used to form meta-surfaces.

The path of the combination of laser radiation and surface plasmon-polariton modes for the formation of holograms, meta-surfaces is much more economical than “cutting out” the relief of the meta-surface by the electron beam bombardment in a vacuum.

B) Action of vortex beams

What has been said above regarding applications of the combined laser-plasmon action also applies to the section on applications of vortex beams - this is the formation of meta-surfaces. In addition, there are a number of applications that are associated precisely with the chirality of the twists of the vortices. It is proposed to use arrays of solitary vortex vortices (vortex meta-surface) to create supersensitive sensors, filter molecules depending on their chirality (for example, purification of medicaments), to form chiral plasmon devices in which the illumination of the structure returns vortex wave in reflected light (which will replace phase plates), see [5] in section 1.4.

So a new variant of the fundamental problem arises, relating to the physics of the interaction of laser radiation with matter.

C) The formation of nanoparticles during ablation into a liquid

Laser formation of nanoparticles has several advantages compared with cheaper, but more multistage and “dirty” means of chemical synthesis. In addition, chemists have not been able to approach some of the structured nanoparticles. Detailed information is available in reviews, published a year ago, concerning the laser fabrication of nanoparticles in liquids (preparation of colloidal solutions of nanoparticles), see [12] to section 1.4. In fig. 5 in the attached to the application p. 4.14 file 2 a diagram of applications of laser synthesis of colloids is shown.

According to statistics collected in an article by Xiao et al., *Progress in Materials Science* 87, 140-220 (2017), see [12] in section 1.4, the number of publications on ablation in a fluid has increased exponentially over the past few years and exceeded 300 articles per year, and the number of citations reached 7,000 per year. This indicates the relevance and necessity of the subject.

D) Laser fragmentation of liquid droplets and jets

In the case of tin drops, applications are associated with projects for creating plasma sources of short-wave radiation: soft X-rays – vacuum ultraviolet, which form the basis of the next-generation photolithographic machines. Such machines will have a much higher resolution, since the diffraction limit, proportional to the wavelength, will sharply decrease. The project is engaged in such a giant, a leader in the production of machines for photolithography, as ASML, Holland. This is, so to speak, the production of means of production, as further these machines are used in the microelectronic industry for the manufacture of integrated circuits, memory devices and microprocessors.

In the case of water droplets and jets and their irradiation with an ultrashort hard X-ray pulse from an American XFEL laser on an SLAC, the physics of x-ray interaction with a liquid medium is of interest, see comments in [14] to section 1.4 of the project.

E) Ablation of refractory metals

The physics of metal ablation is of independent interest. Today, gold, silver, aluminum are well studied in this respect. There are a number of publications on these metals, including many of the work of our team. Of refractory metals tantalum was analyzed in our theoretical work and in collaboration with experimenters from the laser plasma department under the guidance of M.B. Agranat at IIHT RAS.

Ruthenium, a detailed study of which will be performed in the project, is a little-studied metal. Suffice it to say that in the literature there are only two rather old publications on the EAM potential of ruthenium (M. Igarashi, M. Khantha, V. Vitek, "N-body interatomic potential for hexagonal close-packed metals", *Phil. Mag. B*, 63, 603-627 (1991), S. Chen, J. Xu, H. Zhang, "A new scheme of many-body potentials for hcp metals", *Computational Materials Science*, 29, 428-436 (2004)). They describe ruthenium in a small neighborhood of the equilibrium density and room temperatures. Meanwhile, for our purposes, a potential is needed that is suitable for significant stretching and noticeable compression and for strong heating, which corresponds to the conditions of laser irradiation with optical and X-ray lasers.

The value of the study is that ruthenium is an important material of X-ray optics, as well as the material of protective films, including in photolithographic machines, discussed above.

F) Laser melting of powders

3D printing technologies, also called additive technologies, are very popular in the media. Sometimes they talk about the omnipotence of this kind of production. In fact, today many fundamental problems are connected with these processes. The most significant of them, referring specifically to the laser, will be considered in our project. Without solving these problems, it is impossible to successfully advance in this direction.

G) Computational physics, large-scale high-performance numerical simulation

Algorithms, acceleration of computations, the use of multiprocessor codes, the expansion of space-time scales (in the case of molecular dynamics) - these are the actual challenges facing computational physics. In our project, significant progress will be made to improve the software systems, to saturate them with real physics.

Such physics includes many components - from describing the absorption of laser energy to the processes of heat transfer, diffusion, modeling of complex, often three-dimensional movements of melts and a deformable solid with a package of elastic-plastic phenomena plus melting/crystallization phase transitions, intensive evaporation, cooling and condensation. Moreover, as a rule, the processes proceed quickly and often far from thermodynamic equilibrium.

This section of work has extremely clear practical value.

H) Characteristics of silicon irradiated by laser

In describing the thermal conductivity of the electron subsystem of silicon excited by an ultrashort laser, the values obtained from the reference books are still used and do not take into account the evolution of this quantity, except for its most dramatic change at the melting point. At the same time, previous

studies by the authors showed the importance of adequately determining the dependence of the thermal conductivity on the electron and ion temperature and density. The very relevance of studying the surface treatment of silicon films with an ultrashort laser and solving related problems is beyond doubt, since it can be considered as one of the most promising surface treatment methods with a resolution of

several tens of nanometers.

I) New approaches to the calculation of the coefficient of electron-ion interaction in metals

As mentioned above, in Section 4.1, to solve the electron-phonon heat exchange rate problem, only two common methods are used (the modified Kaganov-Lifshitz-Tanatarov method and the Allen-Downer method), between which there is no unambiguous theoretical connection that would allow boundaries of their mutual compatibility. It should be noted that the data obtained in the second way are most common in third-party sources, in which the dependences of electron-phonon heat transfer on electron temperature are used to solve various problems on the conditions of electron-ion relaxation. At the same time, the assessment of the effect of electron heating on the phonon spectrum and on the results of the Allen-Downer method is an important task. To calculate the electron-ion relaxation, the modern approach of the electron force field (electron force field) will be used, which is applicable to describe such relaxation in different phases of the heated substance.

КОМПЛЕКСНОСТЬ

на русском языке

Перечислим конкретные проблемы, которые будут решены.

А) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазменных и лазерных ЭМ полей.

Будет промоделировано формирование купола первым выстрелом. Для этого будет использован ранее разработанный подход, см. ссылки [10] к пункту 1.4 заявки и кино в виде файлов «Au-220, 225, 226» на сайте <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/index.html> сопровождающем проект. Будет рассчитано средствами численной электродинамики ближнее ЭМ стоячей волны, связанной с лазером, поверхностью и куполом. Будет рассчитан нагрев пленки в стоячем поле за счет поглощения ЭМ поля стоячей волны в скин-слое пленки. Будет промоделировано методами молекулярной динамики и SPH как движение пленки, так и тепловые процессы в движущейся пленке. В результате будут получены данные относительно порогов формирования и о характеристиках пространственной структуры, состоящей из купола и отпечатка стоячей волны в пленке и подложке. Результаты будут сопоставлены с экспериментом из ссылки [11] к пункту 1.4 и новыми опытами Владивостокской группы.

Будет понято, что происходит вследствие освещения указанной выше структуры третьим выстрелом. Для этого будет выполнено дополнительное электродинамическое моделирование.

На сегодня в мировой литературе нет ни описания, ни решения такой проблемы. Это обусловлено трудностями создания физической модели и численной схемы, которая сопрягает электродинамический расчет с тепло-гидро-физическим моделированием. От разработки проблемы есть существенная польза, связанная с технологиями создания метаповерхностей и голограмм.

Отсутствие решений данной задачи в мировой литературе, при ее важности, свидетельствует о нетривиальности вопроса.

Будет объяснено формирование радиальной гофрировки на куполах, см. пример, показанный на рис. 1 в приложенном 4.13 файле 1. Хотя наблюдения зафиксировали данные структуры достаточно давно (с работы Wortmann et al., J. Laser Appl. V. 24, 042017 (2012) прошло 6 лет), никаких объяснений до сих пор не представлено.

Б) Действие вихревых пучков

В проекте будет создана теория, найдено объяснение феномену, показанному на рис. 2, решена эта задача и проведены численные расчеты. Результаты будут сопоставлены с опытами, которые ведутся в ФИАНе в отделении проф. А.А. Ионина. Никаких количественных расчетов, которые бы объясняли происхождение структур на рис. 2, на сегодня не имеется.

То, что, несмотря на публикации результатов группы проф. Т. Омацу в престижных изданиях, см. [5] в п. 1.4, никаких количественных результатов до сих пор нет, указывает на сложность, комплексность проблемы и ее масштаб.

В) Образование наночастиц при абляции в жидкость.

Будет решена весьма трудная проблема об абляции металла в жидкость. В настоящее время имеются только самые первые попытки решения данной проблемы. Эти попытки покрывают только или начальную (см. [6] в пункте 1.4), или конечную (см. [13] в п.1.4) стадии имеющих место процессов.

В работе по проекту будет получено исчерпывающее сквозное решение, которое охватывает начальную стадию, следует за развитием явлений на нескольких промежуточных стадиях и непрерывно переходит на стадию парообразования в горячем приконтактном слое жидкости с возникновением парового пузырька, его расширением, остановкой и началом возвратного движения, приводящего к сжатию пузырька.

Г) Лазерная фрагментация жидких капель и струй.

Очень сложными являются задачи о фрагментации жидких микрокапель путем лазерного воздействия. Трудности связаны с богатой физикой (от взаимодействия излучения и создания экстремальных условий по температуре и давлению до капиллярных явлений) и резко нестационарным трехмерным характером течений. Причем структура течения иерархическая, покрывает несколько порядков во времени и в пространстве: от быстрых до медленных процессов и по пространственной шкале от порядка размера капли до мельчайших фрагментов дробления. У нас есть положительный опыт решения проблемы, см. ссылку [7] в п. 1.4.

В проекте будет решена задача о воздействии тонким цилиндрическим пучком жесткого рентгена на микрокаплю воды или на жидкую струю. Диаметр пучка 1 мкм, размер капли и диаметр струи – несколько десятков мкм. Постановка задачи показана на рис. 3 в приложенном п.4.13 файле 1.

Типичные данные опытов, проведенных Стэнфордском ускорителе Linac Coherent Light Source, показаны на рис. 4. Использован прибор Coherent X-ray Imaging (CXI).

Для решения проблемы, представленной на рис. 3, 4 рисунках, будет модифицирован комплекс программ и добавлены новые подходы, как в физике, так и в используемых алгоритмах. По физике речь идет об описании взаимодействия рентгеновского пучка и в описании двухтемпературных явлений. Большой опыт исследования рентгеновских воздействий в коллективе имеется, см. список наших работ в ссылке [1] к п. 1.5. Тоже относится к нашим

исследованиям по двухтемпературным моделям, см. ссылку [2] в п. 1.5. В алгоритм SPH будут встроены подпрограммы с рентгеновской физикой и двухтемпературными эффектами, а также детальные сведения об уравнении состояния воды.

Кроме проблемы с жестким импульсным рентгеном и каплей воды, будут продолжены исследования по капле олова. Предстоит заменить уравнение состояния Ми-Грюнаизена, применявшееся в работе [7] (см. литературу к п. 1.4), на табличное уравнение состояния.

Д) Абляция тугоплавких металлов.

Будет создан потенциал межатомного взаимодействия рутения. Будет разработано уравнение состояния рутения с учетом двухтемпературных эффектов. Для разработки потенциала и для создания уравнения состояния будут проведены DFT(density functional theory) расчеты. Они будут выполнены с помощью пакетов квантово-механических вычислений (VASP, Elk и др.). В таких расчетах определяется холодная кривая рутения. Она необходима для построения потенциала межатомного взаимодействия методом согласования по стрессу (stress-matching). В DFT вычислениях будут определены двухтемпературные эффекты. Для этого будет выполнена серия расчетов по электронной температуре, в которых в ГПУ кристалле рутения возбуждается электронная подсистема до заданной температуры. В результате определяются электронные вклады в давление и внутреннюю энергию, и находится электронная теплоемкость. Эти величины являются нетривиальными функциями плотности и температуры. Их нельзя аппроксимировать функциями, которые соответствуют свободному Ферми-газу.

Далее будут выполнены двухтемпературные гидродинамические и молекулярно-динамические расчеты. Работа будет вестись совместно с экспериментом. Будут рассмотрены ультракороткие воздействия лазеров с разной длиной волны от оптического до жесткого ультрафиолета и до жесткого рентгена под разными углами падения. Нашим коллективом начаты предварительные работы по данному направлению [3] – ссылка в списке литературы к п. 1.5.

Е) Лазерное плавление порошков.

В проекте будет решена задача о плавлении порошка металлических микрочастиц лазерным импульсом.

Ж) Вычислительная физика, крупномасштабное высокопроизводительное численное моделирование.

Будут выполнены работы по совершенствованию нашего численного арсенала. Сюда входят работы по развитию кодов и по включению в них физики, требуемой для решения перечисленных выше задач.

З) Характеристики кремния, облученного лазером

В случае с кремнием основной задачей является аккуратное описание процесса наномодификации его поверхности при облучении одним или несколькими лазерными импульсами длительностью 10-100 фс и с вложением энергии 10-100 мДж/см², что определяет диапазон вблизи порога абляции. Для решения этой задачи планируется использовать метод двухтемпературной гидродинамики, где кроме данных по теплопроводности кремния в различных фазах, также потребуются данные об электрон-фононном теплообмене и термодинамических потенциалах электронной и ионной подсистем. Для решения двух последних задач планируется использовать сочетание ряда методов: модифицированный метод Каганова-Лифшица-Танатарова, метод Аллена-Даунера с самостоятельно определённой константой электрон-фононного взаимодействия, молекулярно-динамическое моделирование в подходе электронного силового поля, а также теорию функционала плотности с зависимостью от температуры. Основной по вычислительной емкости здесь будет являться задача о расчёте электронной теплопроводности согласно формуле Кубо-Гринвуда, поскольку такая задача, как было показано авторами (Migdal, J. Phys.: Conf. Ser. 774, 012103, 2016) потребует квантово-механического рассмотрения системы не менее сотни атомов в рамках метода функционала плотности.

И) Новые подходы к расчетам коэффициента электрон-ионного взаимодействия в металлах

При рассмотрении метода Аллена-Даунера в двухтемпературном случае основной акцент будет сделан на тех металлах, потенциал применения которых в таких направлениях, как наноплазмоника и нанофотоника (A. Kuchmizhak et al, Nanoscale, 8, 12352, 2016; D. G. Varanov et al, Optica, 4(7), 814, 2017) является несомненным, а, с другой стороны, существуют данные, свидетельствующие о влиянии электронного нагрева на их фононные свойства (золото и медь). Кроме того, как следует из предыдущего абзаца, аналогичное исследование будет сделано и для кремния, где ранее (V. Recoules et al, Phys. Rev. Lett, 96, 055503, 2006) было обнаружено появление "мягкой моды" в фононном спектре с ростом электронной температуры.

В рамках метода функционала плотности будет проведён расчёт энергий основного состояния для систем с инфинитезимальными смещениями атомов в решётки, соответствующими основным направлениям её деформациями. Это позволит построить матрицу силовых постоянных, с помощью которых удастся восстановить фононный спектр, вычислить зависимость функции Элиашберга от частоты возбуждаемого фонона. При этом будет учитываться и изменение электронного спектра с температурой, недавно обнаруженное с помощью первопринципных расчётов (V. Recoules et al, Phys. Rev. Lett, 96, 055503, 2006; Petrov, App. Phys. B. 2015). Согласно полученной функции Элиашберга, соответствующей состоянию вещества с горячими электронами, будет рассчитана по своему определению константа электрон-фононного взаимодействия. Данная задача по своей вычислительной сложности сопоставима с расчётами электронной теплопроводности методом Кубо-Гринвуда в рамках квантовой молекулярной динамики, поскольку

потребуется множества различных деформаций исходной ячейки, соответствующей рассматриваемому кристаллу, содержащей несколько десятков атомов и погруженной в периодические граничные условия.

на английском языке

We list the specific problems that will be solved.

A) Spatially distributed heating due to a combination of plasmon and laser EM fields.

The formation of the dome by the first shot will be simulated. For this, the previously developed approach will be used, see references [10] to section 1.4 of the application and the movie as a files «Au-220, 225, 226» on website <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/index.html> accompanying project. The near EM of a standing wave associated with a laser, a surface and a dome will be calculated by means of numerical methods of electrodynamics. The heating of the film in the standing wave due to the absorption of the EM field of the standing wave in the skin layer of the film will be calculated. Both film movement and thermal processes in a moving film will be modeled using molecular dynamics and SPH method. As a result, data will be obtained on the formation thresholds and on the characteristics of the spatial structure consisting of the dome and the standing wave imprint in the film and substrate. The results will be compared with the results of experiments from reference [11] to section 1.4 and the new experiments of the Vladivostok group.

It will be understood what happens as a result of lighting the above structure with the third shot. For this, additional electrodynamic modeling will be performed.

Today in the world literature there is neither a description nor a solution to such a problem. This is due to the difficulties of creating a physical model and a numerical scheme that matches the electrodynamic calculation with thermal-hydro-physical modeling. From the decision of the problem there are significant benefits associated with the creation of technologies for meta-surfaces and holograms.

The lack of solutions to this problem in the world literature, with its importance, indicates the non-triviality of the problem.

The formation of radial corrugation on the domes will be explained, see the example shown in fig. 1. Although the observations recorded these structures for a long time (6 years have passed since Wortmann et al., J. Laser Appl. V. 24, 042017 (2012)), no explanation has yet been provided.

B) Action of vortex beams

A theory will be created in the project, and an explanation will be found for the phenomenon shown in fig. 2 in file attached to the application, this problem will be solved and numerical calculations will be performed. The results will be compared with the results of experiments that are conducted in the FIAN in the department of prof. A.A. Ionin. No quantitative calculations that would explain the origin of the structures in this figure, today is not available.

That, despite the publication of the results of the group of prof. T. Omatsu in prestigious editions, see [5] in section 1.4, there are still no quantitative results, indicates the intricacy, complexity of the problem and its value.

C) The formation of nanoparticles during ablation into a liquid.

A very difficult problem about the ablation of a metal into a liquid will be solved. Currently, there are only the very first attempts to solve this problem. These attempts cover only either the initial (see [6] in section 1.4) or the final (see [13] in 1.4) stages of the processes taking place.

In the project, an exhaustive end-to-end solution will be obtained that covers the initial stage, follows the development of phenomena at several intermediate stages and continuously moves to the vaporization stage in the hot contact layer of the liquid with the appearance of the vapor bubble, its expansion, stop of expansion and the beginning of the return movement leading to compression of the bubble.

D) Laser fragmentation of liquid droplets and jets.

The problems of fragmentation of liquid microdroplets by laser action are very complex. Difficulties are associated with rich physics (from the interaction of radiation with a target matter and the creation of extreme conditions in temperature and pressure to capillary phenomena) and the sharply unsteady three-dimensional nature of flows. Moreover, the flow structure is hierarchical, covers several orders of magnitude in time and space: from fast to slow processes and on a spatial scale from the order of the size of a drop to the smallest fragments of fragmentation. We have a positive experience in solving the problem, see reference [7] in section 1.4.

The project will solve the problem of the action of a thin cylindrical beam of hard X-rays on a microdroplet of water or a liquid jet. The beam diameter is 1 μm , the size of the droplet and the diameter of the jet are several tens of μm . Task setting is shown in fig. 3.

Typical data of the experiments conducted by the Stanford accelerator Linac Coherent Light Source are shown in fig. 4. Coherent X-ray Imaging (CXI) instrument was used.

To solve the problem presented in Fig. 3 and 4, the program complex will be modified and new approaches will be added, both in physics and in the algorithms used. In physics, we are talking about the description of the interaction of the X-ray beam with a target matter and about the description of two-temperature phenomena. There is a great experience in the

study of X-ray influences in a team, see the list of our works in reference [1] to section 1.5. The same applies to our research on two-temperature models, see reference [2] in section 1.5. Subroutines with X-ray physics and two-temperature effects, as well as detailed information about the equation of state of water, will be inserted into the SPH algorithm.

In addition to problems with a hard impulse X-ray and a drop of water, research on a drop of tin will be continued. It is necessary to replace the equation of state of Mi-Grüneisen, used in [7] (see the literature for § 1.4), with a tabular equation of state.

E) Ablation of refractory metals.

A potential of interatomic interaction of ruthenium will be created. An equation of state for ruthenium will be developed taking into account two-temperature effects. DFT (density functional theory) calculations will be carried out to develop the potential and to create the equation of state. They will be performed using quantum-mechanical computation packages (VASP, Elk, etc.). In such calculations, the cold ruthenium curve is determined. It is necessary for building the interatomic interaction potential using the stress matching algorithm. In DFT calculations, two-temperature effects will be defined. For this, a series of calculations will be performed on the electron temperature, in which the electron subsystem is excited to a given temperature in the hcp ruthenium crystal. As a result, electronic contributions to pressure and internal energy are determined, and the electronic heat capacity is found. These values are non-trivial functions of density and temperature. They cannot be approximated by functions that correspond to the free Fermi gas.

Next, two-temperature hydrodynamic and molecular dynamics calculations will be performed. Work will be conducted in conjunction with the experiment. Ultrashort action of lasers with different wavelengths from optical to hard ultraviolet and hard x-rays at different angles of incidence will be considered. Our team has begun preliminary work in this area [3] - a reference in the list of references to section 1.5.

F) Laser melting of powders.

The project will solve the problem of melting metal microparticles with a laser pulse.

G) Computational physics, large-scale high-performance numerical simulation.

Work will be carried out to improve our numerical arsenal. This includes work on the development of codes and on the inclusion of the physics required for solving the problems listed above.

H) Characteristics of silicon irradiated by laser.

In the case of silicon, the main task is to accurately describe the process of nano-modification of its surface when irradiated with one or several laser pulses with a duration of 10-100 fs and with an energy input of 10-100 mJ / cm², which determines the range near the ablation threshold. To solve this problem, it is planned to use the method of two-temperature hydrodynamics, where in addition to the data on the thermal conductivity of silicon in different phases, data on electron-phonon heat transfer and the thermodynamic potentials of the electron and ion subsystems are also required. To solve the last two problems, it is planned to use a combination of a number of methods: the modified Kaganov-Lifshits-Tanatarov method, the Allen-Downer method with an independently determined electron-phonon interaction constant, molecular-dynamic modeling in the electron force field approach, and the density functional theory. The main computational capacity here will be the problem of calculating the electron thermal conductivity according to the Kubo-Greenwood formula, since such a task, as was shown by the authors (Migdal, J. Phys. : Conf. Ser. 774, 012103, 2016), will require a quantum-mechanical analysis of the system at least a hundred atoms in the framework of the density functional method.

I) New approaches to the calculation of the coefficient of electron-ion interaction in metals.

When considering the Allen-Downer method in the two-temperature case, the main focus will be on those metals whose potential application in such areas as nanoplasmonics and nanophotonics (A. Kuchmizhak et al, *Nanoscale*, 8, 12352, 2016; DG Baranov et al, *Optica*, 4 (7), 814, 2017) is undoubted, and, on the other hand, there is evidence of the effect of electronic heating on their phonon properties (gold and copper). In addition, as follows from the previous paragraph, a similar study will be made for silicon, where earlier (V. Recoules et al. *Phys. Rev. Lett*, 96, 055503, 2006) the appearance of a "soft mode" in the phonon spectrum with increasing electronic temperature was found.

In the framework of the density functional method, the ground state energies will be calculated for systems with infinitesimal displacements of atoms into lattices corresponding to the main directions of its deformations. This will allow us to construct a matrix of force constants, with the help of which it will be possible to reconstruct the phonon spectrum, to calculate the dependence of the Eliashberg function on the frequency of the excited phonon. This will take into account the change in the electronic spectrum with temperature, recently discovered using ab initio calculations (V. Recoules et al, *Phys. Rev. Lett*, 96, 055503, 2006; Petrov, *App. Phys. B*, 2015). According to the obtained Eliashberg function corresponding to the state of matter with hot electrons, the electron-phonon interaction constant will be calculated by its definition. By its computational complexity, this problem is comparable to the calculations of electronic thermal conductivity by the Kubo-Greenwood method within the framework of quantum molecular dynamics, since it will require many different deformations of the original cell corresponding to the crystal under consideration, containing several tens of atoms and immersed in periodic boundary conditions.

4.4. Научная новизна исследований, обоснование достижимости решения поставленной задачи (задач) и возможности получения запланированных результатов

на русском языке

А) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазменных и лазерных ЭМ полей

На сегодня в мировой литературе нет ни описания, ни решения задачи о сочетании плазменных полей и лазерного электромагнитного (ЭМ) поля в режимах интенсивного воздействия. В таких режимах вложенная в скин-слой энергия результирующей ЭМ волны достаточна для сильного нагрева, приводящего к плавлению металла. Это относится к новизне.

Решение предыдущей задачи со схемой Кретчмана обосновывает нашу уверенность в том, что у нас имеется набор средств для решения заявленной проблемы.

Сказанное относится также к задаче о формировании радиальной гофрировки на куполах, см. пример, показанный на рис. 1 в приложенном п.4.13 файле 1.

Б) Действие вихревых пучков.

Поскольку в литературе нет никаких количественных расчетов того, как формируются хиральные структуры при вихревом воздействии (см. рис. 2), мы не сомневаемся в новизне наших исследований. Уверенность в том, что данное исследование будет окончено в срок, опирается на наш опыт решения предыдущих задач со сложной геометрией.

В) Образование наночастиц при абляции в жидкость.

Как говорилось в пп. 1.5 и 4.1, 2 выше, имеются попытки решения задачи об абляции в жидкость. Но они не дают нам требуемую целостную картину от начальных стадий до завершения процесса с образованием пузырька, т.е. с испарением приповерхностного слоя жидкости, принимающей абляцию. В проекте будет получена полная картина. Это новый этап развития представлений об абляции в жидкость. Перед началом проекта мы вооружены необходимым инструментарием, имеем соответствующий опыт, нет сомнений, что задачи будут решены в срок.

Г) Лазерная фрагментация жидких капель и струй.

В проекте будет продолжено решение задачи о дроблении капли расплава олова. В отличие от предыдущего этапа, зафиксированного в публикации [7] в п. 1.4, вместо уравнения состояния Ми-Грюнайзена, применявшееся в работе [7], будет использовано табличное уравнение состояния. В этом заключается существенная новизна. В двухтемпературной гидродинамической программе нами применялись и уравнение Ми-Грюнайзена, и табличное, поэтому есть уверенность в выполнимости данного важного усовершенствования.

В проекте будет решена трудная новая задача о воздействии тонким цилиндрическим пучком жесткого рентгена на микрокаплю воды или на жидкую струю.

На наших предыдущих исследованиях по фрагментации капли базируется заключение о том, что задача будет решена.

Д) Абляция тугоплавких металлов.

Будет решена задача об абляции рутения лазерными импульсами с разной длиной волны от оптики и до жесткого рентгена. В литературе нет такого решения, стало быть задача новая. Решение задачи достижимо в установленные сроки, поскольку у нас есть и необходимый опыт, и инструменты.

Е) Лазерное плавление порошков.

Будет решена задача о плавлении насыпок порошков. Будут найдены оптимальные режимы воздействия. Задача новая, неизученная в литературе. У нас есть опыт работ с пористыми средами, со слоистыми мишенями (см., например, ссылку [2] в п. 1.4). Поэтому коллектив уверен в успехе на данном направлении.

Ж) Вычислительная физика, крупномасштабное высокопроизводительное численное моделирование. Наш коллектив постоянно ведет совершенствование численного инструментария, см., например, ссылку [15] в списке к п. 1.4. В данном проекте к этому подталкивает необходимость решения перечисленных выше физических задач.

З) Характеристики кремния, облученного лазером

Применительно к задаче расчёта электронной теплопроводности в рамках первопринципных методов и формулы Кубо-Гринвуда следует отметить, что полностью решенной она является только в случае такого простого металла, как алюминий (D. Knyazev, Phys. Plasmas, 21 (073302), 2014). В настоящее время существует ряд работ по распространению данного подхода на другие металлы, включая переходные и благородные, что имеют множество валентных электронов, требующих непосредственного описания в квантовомеханических расчётах. В нашем случае речь идёт о кремнии, электронная структура которого не столь сильно отличается по числу валентных электронов от алюминия. Единственная проблема, возникающая при описании полупроводников в этом случае, состоит в нарушении однородности электронного газа за счёт наличия направленных связей между ионами кремния. Однако рядом автором (Duffy, Shokeen) было показано, что хорошее описание электронной структуры кремния в твердом состоянии может

быть достигнуто с использованием гибридных функционалов в рамках теории функционала плотности.

Таким образом, авторы уверены в возможности применения заявленного подхода по отношению к кремнию. Расчёты теплопроводности различными подходами в рамках метода классической молекулярной динамики, такие как подход Грина-Куба, неравновесная молекулярная динамика, неоднократно проводились для кремния, но лишь для некоторых его состояний, в основном для аморфных фаз, лежащих между 1300 и 1700 К. В настоящей работе цель состоит в том, чтобы изучить состояние жидкой фазы кремния вплоть до температур, соответствующих образованию сверхкритического флюида, экспериментальное исследование которых до настоящего момента затруднено.

И) Новые подходы к расчетам коэффициента электрон-ионного взаимодействия в металлах

Расчёты электрон-фононного теплообмена в рамках подхода Аллена-Даунера, как уже было упомянуто выше, проводятся с использованием константы электрон-фононного взаимодействия, определенной в равновесном случае и при сверхнизких температурах. Таким образом, к новизне предлагаемых таких расчётов следует отнести проведение расчёта в тех условиях, которые непосредственно наблюдаются при ультракоротком лазерном воздействии: высокие электронные температуры, превосходящие температуру решётки/ионов. Возможность таких расчётов происходит из предложения использовать метод функционала плотности, допускающего задание электронной температуры независимо от состояния решётки. Для правильного определения фононного спектра потребуется несколько десятков атомов в расчётной ячейке, описываемой в периодических граничных условиях, что вполне согласуется с достигнутой в настоящее время производительностью множества действующих в России суперкомпьютеров.

на английском языке

A) Spatially distributed heating due to a combination of plasmon and laser EM fields

Today, there is neither a description in the world literature, nor a solution to the problem of a combination of plasmon fields and a laser electromagnetic (EM) field in intensive exposure modes. In such modes, the energy of the resulting EM wave, embedded in the skin layer, is sufficient for strong heating, which leads to the melting of the metal. This refers to the novelty.

The solution of the previous problem with the Kretschman scheme justifies our belief that we have a set of tools to solve the stated problem.

This also applies to the problem of the formation of radial goffering on the domes, see the example shown in Fig. one.

B) Action of vortex beams.

Since there are no quantitative calculations in the literature of how chiral structures are formed during vortex exposure (see Fig. 2), we do not doubt the novelty of our research. The confidence that this study will be completed on time is based on our experience in solving previous problems with complex geometry.

C) The formation of nanoparticles during ablation into a liquid.

As stated in sections 1.5 and 4.1, 4.2 above, there are attempts to solve the problem of ablation into a liquid. But they do not give us the required complete picture from the initial stages to the completion of the process with the formation of a bubble, i.e. with evaporation of the near-surface layer of ablation fluid. The project will receive a complete picture. This is a new stage in the development of ideas about liquid ablation. Before the start of the project, we are armed with the necessary tools, we have relevant experience, there is no doubt that the tasks will be solved on time.

D) Laser fragmentation of liquid droplets and jets.

The project will continue to solve the problem of crushing a drop of molten tin. In contrast to the previous stage, fixed in the publication [7] in section 1.4, instead of the equation of state of Mie-Grüneisen used in [7], a tabular equation of state will be used. This is a significant novelty. In the two-temperature hydrodynamic program, we used both the Mie-Grüneisen equation and the tabular one, so there is confidence in the feasibility of this important improvement.

The project will solve a new difficult problem of the action of a thin cylindrical beam of hard X-rays on a microdroplet of water or a liquid jet.

The conclusion that the problem will be solved is based on our previous research on the fragmentation of a drop.

E) Ablation of refractory metals.

The problem of ablation of ruthenium with laser pulses of different wavelengths from optics to hard X-rays will be solved. There is no such solution in the literature, so the task is new. The solution of the problem is achievable in a timely manner, since we have the necessary experience and tools.

F) Laser melting of powders.

The problem of melting of powders will be solved. Optimal exposure regimes will be found. The task is new, unexplored in the literature. We have experience in working with porous media, with layered targets (see, for example, reference [2] in section 1.4). Therefore, the team is confident of success in this area.

G) Computational physics, large-scale high-performance numerical simulation.

Our team permanently leads the improvement of numerical tools, see, for example, reference [15] in the list to section 1.4. In this project, this improvement is due to the need to solve the above physical problems.

H) Characteristics of silicon irradiated by laser.

With regard to the problem of calculating the electronic thermal conductivity in the framework of first-principle methods and the Kubo-Greenwood formula, it should be noted that it is completely solved only in the case of such a simple metal as aluminum (D. Knyazev, Phys. Plasmas, 21 (073302), 2014). Currently, there are a number of works on the distribution of this approach to other metals, including transition and noble ones, that have many valence electrons that require direct description in quantum mechanical calculations. In our case, we are talking about silicon, whose electronic structure is not so different in the number of valence electrons from aluminum. The only problem arising in the description of semiconductors in this case is the violation of the homogeneity of the electron gas due to the presence of directional bonds between the silicon ions. However, a number of authors (Duffy, Shokeen) showed that a good description of the electronic structure of silicon in the solid state can be achieved using hybrid functionals within the framework of the density functional theory. Thus, the authors are confident in the applicability of the claimed approach with respect to silicon. Calculations of thermal conductivity by various approaches within the framework of the classical molecular dynamics method, such as the Green – Cuba approach, nonequilibrium molecular dynamics, were repeatedly performed for silicon, but only for some of its states, mainly for amorphous phases lying between 1300 and 1700 K. In this work the goal is to study the state of the liquid phase of silicon up to temperatures corresponding to the formation of supercritical fluid, the experimental study of which is still difficult.

I) New approaches to the calculation of the coefficient of electron-ion interaction in metals

The calculations of the electron-phonon heat transfer in the framework of the Allen-Downer approach, as already mentioned above, are carried out using the electron-phonon interaction constant defined in the equilibrium case and at ultralow temperatures. Thus, the novelty of the proposed such calculations should include carrying out the calculation in those conditions that are directly observed with ultrashort laser exposure: high electron temperatures exceeding the lattice / ion temperature. The possibility of such calculations comes from the proposal to use the density functional method, which allows the electron temperature to be set independently of the lattice state. To correctly determine the phonon spectrum, several dozens of atoms are required in the calculation cell, which is described in periodic boundary conditions, which is quite consistent with the performance of a great number of supercomputers operating in Russia.

4.5. Современное состояние исследований по данной проблеме, основные направления исследований в мировой науке и научные конкуренты

на русском языке

A) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазмонных и лазерных ЭМ полей

Плазмоника – это важный раздел современной физики, имеющий существенные приложения сегодня и много перспективных приложений для будущего. Интерес большой, групп много (см. пример в п. 4.2 с конференцией METANANO).

Другое крупное направление связано с лазерными технологиями, в которых используются лазерный нагрев, плавление и термомеханические эффекты. Все перечисленные задачи А-Ж относятся к этому направлению. Вообще говоря, плазмоника и лазерная термомеханика развиваются независимо, поскольку теоретический аппарат отличается принципиально.

Наша работа по задаче А нацелена на создание моста между этими двумя научными направлениями.

Научные конкуренты. Последние годы появились первые работы такого рода. Но они относятся к плавлению наночастиц в коллоидах, что далеко от нашей задачи.

Ближе к нам работы группы проф. Jean-Philippe Colombier из University Jean Monnet Saint-Etienne, Laboratoire Hubert Curien и Dr. R. Stoian – заведующего группой Laser-matter interaction в том же университете. В них рассматриваются тепловые и гидродинамические эффекты вместе с плазмонными полями, но в диэлектриках. Эти исследования в основном ориентированы на анализ периодических структур типа LIPSS (laser induced periodic surface structures) в объеме и на поверхности диэлектрических материалов.

Б) Действие вихря пучков

Направление возникло сравнительно недавно с работ [5] в списке литературы к п. 1.4. В настоящее время разбилось на два поднаправления. На первом из них диаметр пучка на мишени порядка длины волны. Здесь интересуются центральной особенностью структуры в виде спирального возвышения, см. рис. 2. Этому поднаправлению принадлежит наша задача Б.

На втором поднаправлении диаметр вихревого пучка на мишени велик – на диаметре укладывается много длин волн. Интересуются многократными воздействиями и формированием спиралевидных структур типа LIPSS (laser induced periodic surface structures) на поверхности. Обычный (не вихревой) пучок большого диаметра производит

систему периодических гребней (наподобие замороженной морской волны). Направление вдоль гребней перпендикулярно вектору поляризации лазерной электромагнитной волны. В случае широкого вихревого пучка направление поляризации меняется внутри пятна от точки к точке. Соответственно причудливо поворачивают гребни. В таких исследованиях наиболее продвинутой на сегодня является группа проф. Salvatore Amoruso из неаполитанского университета University of Naples Federico II. Но это поднаправление далеко от нашей задачи Б.

В) Образование наночастиц при абляции в жидкость.

По данному направлению ведется активная научная работа. Направление считается перспективным с возможностями существенной коммерциализации. В основном, как можно видеть из недавних обзоров [12] к п. 1.4, работают лазерщики и химики. Они перебирают параметры лазерного воздействия, мишени (чистые вещества, сплавы, ламинаты) и принимающие абляцию жидкости (неорганические и органические, растворы солей). При этом фундаментальные вопросы до самого недавнего времени оставались нерешенными. Такое положение обусловлено сложностью процессов.

Финальная стадия процесса, когда хорошо виден пузырек, подробно исследована и в опытах и теоретически. Последней из такого рода работ является работа [13], процитированная в списке литературы к п. 1.4. Это работа группы Давида Аманса из Лиона: Dr. David Amans из Claude Bernard University Lyon 1. Теория опирается на интегрирование уравнения Релея-Плессета. Наблюдения за пузырьком в этой работе стартуют с нескольких микросекунд, тогда как длительности применяемых лазерных импульсов варьируют в разных опытах от субпикосекунд до наносекунд. Остается «невидимая эра» на временах короче микросекунды.

Около пяти лет назад [1] появились первые работы [1-5], проливающие свет на начальные стадии. Наиболее существенный вклад вносят группы М.Е. Поварницына из ОИВТ РАН [1] и Т.Е. Итиной [1] из Laboratoire Hubert Curien, Université de Lyon, Université Jean Monnet и проф. Л.В. Жигиля [2,4] из University of Virginia. На сегодня выполнены исследования только лазерным импульсам ультракороткой длительности (порядка пикосекунды и менее). Прослежена эволюция в течение нескольких первых наносекунд после воздействия. В нашей работе [3,5] процесс доведен до рекордных 0.2 микросекунд, которые, правда, все еще далеки от стадии с пузырьком.

Существенным достижением работ [2-5] является разработка вопроса о гидродинамической устойчивости приконтактной зоны между металлом и принимающей жидкостью. Показано, что в условиях ультракоротких импульсов из-за торможения жидкостью тяжелого металла развивается неустойчивость Релея-Тейлора. Это приводит к прониканию в жидкость довольно крупных наночастиц размерами порядка десятка нанометров.

Как говорилось в предыдущих пунктах, в работе проекту будет прослежена полная эволюция течения от начальной стадии и до формирования и динамики микропузырька. Будет изучено влияние длительности импульса во всем диапазоне применяемых воздействий. Такая работа требует детальных сведений о жидкости. Это будет сделано на примере воды. Будут использованы справочные данные о теплопроводности воды и уравнение состояния, которое покрывает весь диапазон сжатий и расширений воды от адиабаты Гюгонио и до двухфазной области. Отметим, что в предыдущих исследованиях использовались упрощенные описания воды.

Г) Лазерная фрагментация жидких капель и струй

К лазерному дроблению капель олова или смеси олова с иридием возник большой интерес в связи с программой создания фотолитографических машин, работающих на вакуумном ультрафиолете – мягком рентгене (по английски: EUV – extreme ultraviolet). Заказчиками являются компания ASML (Голландия, <https://www.asml.com/asml/>), университет Твенте (Голландия) и институт спектроскопии РАН в г. Троицк. На сайте ASML пишется, что компания начала продажи EUV систем. Машина называется NXE:3400B system. EUV системы используют коротковолновое излучение 13.5 нм. Соответственно уменьшается дифракционный предел и повышается плотность упаковки элементов на чипе. Правда, работать необходимо в вакууме, а не в жидкости, как в случае DUV (глубокого ультрафиолета), и использовать рентгеновские многослойные зеркала в качестве оптики; обзор работ по многослойным покрытиям дан в [6].

Другая задача о явлениях при воздействии рентгеновского лазера на каплю воды возникает в связи с работами [14] проф. Claudiu Stan, цитированными в п. 1.4. Их группа предоставит данные опытов, с которыми будет сопоставлено наше численное моделирование. Проф. Claudiu Stan проводит эксперименты на лазерах на свободных электронах (Linac Coherent Light Source, SACLA, FEL FLASH на DESY). Речь идет о фундаментальных исследованиях начальных стадий фазовых переходов, связанных с нуклеацией зародышей новой фазы. Причем для исследований привлекаются рентгеновские лазеры с ультракоротким импульсом. Такой импульс (pump) приводит в движение вещество в мишени, тогда как последующие диагностические (probe) импульсы зондируют эволюцию вещества на микроуровне. Это в том числе дифракционные измерения на частоте в единицы МГц повторений импульсов рентгеновского лазера. Экспериментальные возможности самые передовые.

Д) Абляция тугоплавких металлов

Явление лазерной абляции известно давно. Имеются две регулярные международные конференции, посвященные абляции: HPLA (high power laser ablation, <https://www.usasymposium.com/hpla>) и COLA (conference on laser ablation, <https://cola2017.sciencesconf.org/>, <https://cola2019.org/>). Впрочем, тема затрагивается также на других международных конференциях: например, ICPEPA или FLAMN. Лазерной абляции простых металлов посвящено много работ. На сегодня хорошо осознана специфика, связанная с ультракороткими импульсами, когда важную роль играют термомеханические эффекты.

Но есть и осложнения. Они относятся к так сказать «нестандартным» металлам, рентгеновским лазерам и облучению под скользящими углами. Такое облучение используется в рентгеновских зеркалах в случае жесткого рентгена. Это необходимо для повышения коэффициента отражения. Именно такая задача будет решена в проекте. Наш «нестандартный» материал – это рутений. Анализируются ситуации, когда лазеры генерируют фемтосекундный импульс. Рассматривается диапазон электромагнитных волн: оптика – мягкий рентген – жесткий рентген.

Есть группы, которые систематически применяют жесткий рентген для целей нагрева (например, [14], литература к п. 1.4) или диагностики ([14] в п. 1.4, [7]) или диагностируют жесткое излучение, идущее от быстро сильно нагретых мишеней [8]. В работе [9] (литература к п. 4.1) для зондирования используют мягкий рентген. В работе [9] дан обзор исследований, выполненный ныне покойным Анатолием Яковлевичем Фаеновым, по абляции металлов и диэлектриков мягким рентгеном.

Прикладной аспект изучаемой проблемы описан в [10]. Применение кода Монте-Карло/XCASCADE(3D), описывающего кинетику фото ионизации, совместно с двухтемпературной моделью (но без движения вещества) представлено в [11]. Двухтемпературная модель (без гидродинамики рутения) анализируется в [12]. В нашем проекте будет решена полная задача, т.е. с учетом как чисто тепловых, так и гидродинамических эффектов. Это позволит с научных позиций решать вопрос о порогах абляции и сравнении с опытами.

Е) Лазерное плавление порошков

В проекте будет изучено важнейшее звено самой современной технологии, называемой 3D принтингом. В настоящее время это популярное направление быстро расширяется, создано уже несколько поколений автоматизированных станков. Процесс состоит из нескольких звеньев. Во-первых, в системе автоматизированного проектирования (САПР) (CAD - Computer-Aided Design) создается проект будущего изделия. В этой же системе 3D изделие рассекается на тонкие сечения 50–200 мкм толщиной. Во-вторых, в горизонтальной ванне формируется плоская горизонтальная насыпка порошка. Наконец, в-третьих, лазерный луч, регулируемый зеркалами, плавит частицы микропорошка. Контур плавления, по которому движется лазерный луч, задается компьютером согласно сечениям, заданным в программе CAD.

Наиболее сложным и слабо изученным остается звено, связанное с физикой лазерного плавления насыпки и рекристаллизации. Имеется значительное число работ в этой области. В основном это эксперименты [13,14]. В численных подходах исследователи применяют разностные методы или метод конечных элементов [15]. Наш проект основан на физической модели и разработанных в коллективе программах с лагранжевой гидродинамикой, молекулярной динамикой с электронной теплопроводностью по Монте-Карло методу, и на SPH гидрокоде, который специально приспособлен для описания 3D ситуаций со сложной геометрией (порошки, пористые или слоистые среды).

Ж) Вычислительная физика, крупномасштабное высокопроизводительное численное моделирование

Наш коллектив постоянно ведет совершенствование численного инструментария, см., например, ссылку [15] в списке к п. 1.4. В данном проекте к этому подталкивает необходимость решения перечисленных выше физических задач.

(подпункт Ж-1: Двухтемпературная гидродинамика)

Гидродинамический код в лагранжевых переменных создан в нашем коллективе 15 лет назад. Он основан на известной схеме Самарского и Попова [48]. Схема была кардинально модифицирована для соответствия задачам лазерного воздействия с фемтосекундной длительностью импульса. При таком воздействии необходимо учитывать сильное возбуждение электронной подсистемы. При наших амплитудах воздействия (при поглощенной энергии больше, чем 1 мДж/см^2) электрон-электронная релаксация заканчивается за время меньшее, чем длительность импульса.

Поэтому электронную подсистему можно описывать как термодинамически квази-равновесную систему с эффективной электронной температурой T_e . Концепция внутреннего разделения на электронную и ионную подсистемы была создана в свое время в пионерской работе [49]. Эта работа помогла осознать принципиальное различие между воздействием импульсами наносекундной (нс) и фемто- пикосекундной (фс-пс) длительности. В нс импульсах происходит испарение вещества мишени или, при более высоких энергиях, формируется плазменная

корона. Тогда как при фс-пс воздействии превалируют термомеханические эффекты в конденсированной фазе. Т.е. физика действия на материалы качественно меняется.

После создания способа формирования ультракоротких импульсов компрессором и стретчером (Жерар Муру и Донна Стрикленд, 1985) началось эра активнейших применений этих импульсов в самых разных приложениях (нобелевская премия по физике за 2018-й г. – создание инструментов из света). Исследователи, которые использовали ультракороткие импульсы, пытались сначала объяснить результаты воздействия с помощью привычных тогда представлений, принятых для нс воздействий. Ничего не получалось. Только после использования идей и подхода работы [49] (опубликованной за 11 лет до работы Муру и Стрикленд, 1985) стало ясно, что происходит.

Итак, к схеме [48] была добавлена физика двухтемпературных состояний. Баланс энергии был расщеплен на два баланса – уравнения энергии для электронной и ионной подсистем, записанные по отдельности. Далее начались работы по поиску и построению уравнений состояния в двухтемпературных условиях, вычислению коэффициента теплопроводности в двухтемпературных условиях и определению коэффициента, регулирующего темп обмена энергией между электронной и ионной подсистемами в конденсированной среде. В настоящее время достаточно близкий по духу код имеется в ОИВТ РАН, в группе Поварницына М.Е. [1].

К сожалению, универсального рецепта для получения указанных сведений нет. Для каждого металла необходимо независимое исследование. Причем коэффициенты разнятся сильно от одной группы металлов (благородные) к другой (например, железо, никель, платина), см. [50] и ссылки в этой работе. В наш гидрокод добавлена возможность пользоваться табличными уравнениями однотемпературных состояний, которые готовят коллеги из ОИВТ РАН [51-55]. Создание уравнений состояния является очень важной работой.

Двухтемпературный гидрокод необходимо совершенствовать под каждое конкретное применение. Модификация кода для расчета субнаносекундных воздействий закончена в этом году, см. вторую статью в ссылке [6] к п. 1.4. В проекте будет выполнена работа по распространению расчетов на наносекундные импульсы и рекордно далекие времена (до мкс). В гидрокод предстоит добавить полное уравнение состояния воды, которое, как говорится в тексте проекта, будет охватывать широкий диапазон состояний воды от двукратного сжатия на адиабате Гюгонио и до разрежений до сотых долей атмосферы двухфазных смесей. В предыдущей нашей работе для воды использовалась адиабата Гюгонио, см. [6] к п. 1.4. В проекте будет добавлен блок для расчета рутения.

(Подпункт Ж-2: Молекулярная динамика)

В последнее десятилетие быстрый рост доступных вычислительных ресурсов сделал возможным атомистическое моделирование больших систем, имеющих размеры нескольких микрометров, что приближается к масштабу экспериментов с воздействием фемтосекундных лазеров на пленки микрометровой толщины. Таким образом, стало возможно прямое молекулярно-динамическое (МД, MD) моделирование разнообразных лазерно-индуцированных явлений, включая ударно-волновые явления, упруго-пластические трансформации и фазовые переходы в материалах под действием высокоскоростных деформаций [16-27]. В настоящее время МД исследования подобных явлений на доступном нам классе многопроцессорных компьютеров за приемлемое время могут быть проведены на образцах микрометрового размера в течении нескольких наносекунд физического времени протекания процесса в образце.

Мы используем нашу собственную многопроцессорную высокопроизводительную программу классического молекулярно-динамического моделирования с эффективным распараллеливанием. Впервые схема была представлена в работе [45]. Метод назван: material particle - dynamical domain decomposition (сокращено MPD3) method. Отметим, что по близким принципам удалось построить эффективную высокопроизводительную схему для SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics, см. следующий подпункт этой справки) моделирования, см. описание в статье [15] в списке литературы к п. 1.4. В настоящее время соответствующий код называется CSPH-VD3 (Voronoi dynamical domain decomposition), поскольку, также как и MPD3, основан на трехмерном разбиении среды на подвижные ячейки Вороного, см. детальное описание ниже.

Относительно недавно наша МД (MD) программа дополнена модулем расчета электронной теплопроводности по методу Монте-Карло (MC). Как известно, в металлах электронная теплопроводность намного превосходит теплопроводность, связанную с тепловым движением ионов. В нашем комбинированном MC-MD коде каждый ион несет квази-электрон, с которым он обменивается импульсом [46]. Случайные обмены электронами между соседними ионами с заданным темпом сохраняют электронейтральность среды и позволяют электронной энергии диффундировать по сетке ионов. Провалы плотности и пустоты среды естественным образом понижают коэффициент электронной теплопроводности. Таким образом, MC модуль позволяет корректно моделировать распространение тепла в металлах и мезоскопических структурах типа металлических пен, и в частности продвижение фронтов плавления и ре-кристаллизации в таких сложных средах, что очень затруднительно достичь популярной комбинацией МД с сеточным методом для задачи теплопроводности [2,4,16].

(Подпункт Ж-3: SPH)

Параллельное моделирование нестационарных задач механики сплошных сред в экстремальных состояниях, характеризующихся значительными градиентами давления и скорости, наличием свободных поверхностей и контактных разрывов плотности, встречается с проблемой эффективного использования вычислительных ресурсов в силу отсутствия высокопроизводительного параллельного алгоритма с адаптивной балансировкой загрузки процессоров при быстрых изменениях пространственного распределения вещества. В этих условиях подходы с использованием статической пространственной декомпозиции расчетной области (например, LAMMPS: Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) не могут обеспечить приемлемую параллельную эффективность расчета, так как распределение полезной нагрузки, определяемой вычислительными затратами на расчет движения вещества, не привязано к этому движению.

Нам удалось разработать эффективный алгоритм балансировки нагрузки и создать параллельную программу для больших вычислительных кластеров, способную равномерно и максимально загрузить доступные процессоры полезной работой, и тем самым обеспечить высокую параллельную эффективность расчетов гидродинамических задач, характеризуемых высокоскоростным движением вещества и его быстрым перераспределением [15] к п. 1.4.

К задачам такого рода относится моделирование задач данного проекта, в частности лазерное воздействие на гетерогенные среды и расчет прохождения фронта плавления по мезоструктуре гранулированной среды (порошка), см. текст проекта. Также востребованным является эффективное параллельное моделирование задачи фрагментации капель и струй после облучения импульсом света (см. текст проекта), ударного разрушения хрупких материалов [47] и высокоскоростного соударения тел.

Использование бессеточного метода SPH [40], улучшенного решением задачи Римана для взаимодействующих SPH частиц [41], для моделирования перечисленных выше процессов предпочтительнее применения сеточных методов, которые встречают большие трудности при точном разрешении контактных и свободных границ (для эйлера формализма), а также в построении подвижных адаптирующихся сеток при лагранжевом описании среды.

Решение проблемы равномерного распределения вычислительной работы между нитями, процессами или ядрами процессоров компьютерного кластера является ключом к построению эффективной параллельной программы. Для указанных задач гидродинамики эта проблема сводится к оптимальному разделению, т.е. к декомпозиции среды между процессами. При этом равномерная декомпозиция является необходимым, но не достаточным условием оптимальности, так как обмен информацией между процессами определяется количеством взаимодействующих частиц, оказавшихся в разных процессах. Эти частицы распределены в объеме приграничной полосы между процессами в случае пространственной декомпозиции среды и обеспечивают взаимодействие между соседними областями среды, принадлежащие разным процессам.

Часто используемым методом пространственной декомпозиции является метод деления на параллелепипедные подобласти [42,43]. В условиях пространственной неоднородности плотности частиц такое деление может выполняться рекурсивно, методом ортогональной рекурсивной бисекции [44]. Идея метода проста: прямоугольная область рекурсивно делится на две части по длинной стороне так, что в каждой оказывается равное количество частиц. Границами между прямоугольными подобластями являются плоскости, параллельные осям координат. Балансировка осуществляется через подвижность этих плоскостей, разделяющих подобласти. Но при перебалансировке может существенно меняться связность между процессами. Так как подобласти обладают разным числом соседей, то перестройка декомпозиции требует проведения множества обменов частицами. Такой метод декомпозиции не принимает также во внимание перемешивание частиц. Всё это, вместе взятое, увеличивает время расчета за счет значительных обменов частицами, находящимися в приграничных полосах между процессами.

Для более эффективной динамической балансировки нагрузки мы разработали и используем метод динамической декомпозиции среды (а не пространства расчетной области) на подвижные подобласти Вороного [15] к п. 1.4. Декомпозиция по Вороному однозначно задается набором точек-генераторов диаграммы Вороного, где каждая точка диаграммы соответствует одному вычислительному процессу. Частицы, ближайшие к точке-генератору подобласти Вороного, содержатся в памяти и обновляются соответствующим для этой подобласти процессом. Подвижность диаграммы Вороного осуществляется через подвижность точек-генераторов, так как их положение связано с перемещением относящихся к ним частиц. Нагрузка в отдельных ячейках может меняться во времени, причиной чему служат следующие факторы. Во-первых, в ячейке Вороного может меняться число частиц как по алгоритмическим причинам (дробление и слияние частиц, корректировка границы диаграммы из-за смещения центра диаграммы), так и по физическим причинам: согласно изменению распределения плотности и/или нарушению сплошности среды, окружающей точку-генератор. Во-вторых, и это очень важно, физические процессы в каждой из частиц являются локальными, а значит, могут быть рассчитаны по собственным алгоритмам различной времязатратности.

Перечисленные факторы приводят к тому, что наборы SPH-частиц в каждой подобласти Вороного обрабатываются за разное время, что означает неравномерную нагрузку процессов. Поэтому позиции точек-генераторов дополнительно

сдвигаются под действием балансирующего смещения [45], перераспределяя пограничные частицы из одной области в другую, что выравнивает нагрузку. Такой алгоритм автобалансирующей по нагрузке декомпозиции по Вороному впервые применяется в паре с SPH-методом моделирования задач динамики сплошной среды.

Алгоритм автобалансирующей декомпозиции по Вороному позволяет естественным образом учесть перераспределению масс в вычислительной области во время моделирования. Алгоритм способен подстраиваться под произвольные течения с минимальным обменом частицами между ячейками, не требуя сохранения связности между генераторами диаграммы. Обмен данными между ячейками диаграммы локален; при этом поверхности, через которые осуществляется обмен, обычно меньше, чем в методах с блочной (по параллелограммам) декомпозицией области. Балансировка декомпозиции полностью адаптивна и для максимизации эффективности расчета не требуется ее перестроения "с нуля".

Декомпозиция по Вороному с балансировкой нагрузки не обладает недостатками, характерными для методов статической декомпозиции или динамических с бисекциями, отмеченными выше. Опыт наших расчетов показывает, что геометрия ячеек стремится к сотовой структуре, имеющей минимальный объем приграничной полосы. Максимизация нагрузки уменьшает число частиц, подлежащих обмену. Подобласти Вороного также стремятся к равному числу подобластей-соседей, причем связность подобластей не фиксирована и может изменяться, следуя взаимному перемещению вещества. Изменение связности в этом случае есть локальный процесс, не требующий массивных коммуникаций между процессами. Все коммуникации между подобластями осуществляются только внутри круга их ближайшего соседства. Таким образом, несмотря на то, что декомпозицию по Вороному сложнее программировать, чем вышеописанные методы, она обладает неоспоримыми достоинствами в решении задач механики сплошных сред в экстремальных состояниях.

(Подпункты Ж-4, 5: Симплекс и DFT)

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

Достоверность межатомного потенциала используемого в таких экстремальных условиях является критическим условием необходимым для предсказательной силы МД моделирования. Один из самых успешных подходов для МД моделирования металлов является модель погруженного атома (EAM), который является многочастичным потенциалом, что необходимо для моделирования металлической связи [28-32]. Первое поколение EAM потенциалов основывалось на простых аналитических функциях зарядовой плотности и энергии, имеющих физические основания в теории функционала плотности [33]. Указанные выше работы дают потенциалы оптимизированные только на общие свойства металлов, такие как равновесная плотность, энергия когезии и упругие константы при нормальных условиях вблизи нулевого давления и комнатной температуры.

Большинство интенсивно используемых современных EAM потенциалов были разработаны без связи с теоретическими представлениями о межатомных силах в твердом теле ради того чтобы получить больше свободы при подгонке к экспериментальным данным и перво-принципным квантовомеханическим расчетам. Поэтому эти потенциалы второго поколения, имеющие форму таблиц или набора сплайнов, являются более точными в своей области определения, чем ранее предложенные потенциалы первого поколения. Однако вне области параметров, где проводилась подгонка, потенциалы второго поколения часто не способны корректно описать свойства вещества. Например, широко используемые потенциалы Мишина для алюминия и никеля [34] довольно хорошо оптимизированы для малых деформаций и растяжений вблизи комнатной температуры, но приводят к неверному поведению скорости звука со сжатием и возникновение ударных волн разгрузки в алюминии и никеле, что фундаментально противоречит экспериментальным данным. Аналогичные ограничения по области применения характерны для большинства EAM потенциалов второго поколения, включая потенциалы для тугоплавких металлов, например для рутения [35,36].

Поскольку интересующие нас физические процессы происходят в результате экстремальных условий, вызванных

сверхбыстрым локализованным выделением энергии, то для заслуживающего доверия МД моделирования этих процессов необходимы потенциалы, разработанные специально для применения в широком диапазоне давлений и температур.

Известны два общих метода подгонки межатомных EAM потенциалов по перво-принципным базам данных: подгонка энергии [37] и подгонка сил [38] (force-matching). При подгонке энергии рассчитывается набор ab initio энергий для различных атомных конфигураций и состояний кристалла. Этот набор обычно называют подгоночной базой данных. Затем ищутся/подгоняются параметры/коэффициенты EAM потенциала таким образом чтобы максимально точно воспроизвести энергии из базы данных. Аналогичная схема используется при подгонке по силам, только вместо энергий рассчитываются ab initio силы между атомами. Часто также используется комбинация этих двух методов.

Основной недостаток таких методов подгонки состоит в том, что атомные конфигурации, занесенные в базу данных, не связаны с друг другом каким-либо непрерывным физическим процессом, как например изотермическим сжатием или изохорическим нагревом. Таким образом, выбранные атомные конфигурации физически мало связаны и сильно разбросаны в многомерном конфигурационном пространстве атомных координат, и нет никакой гарантии, что даже идеально подогнанный межатомный потенциал будет давать аккуратные энергии/силы при атомных конфигурациях заметно отличающихся от подгоночных. При этом набор атомных конфигураций обычно ограничен несколькими тысячами сил/энергий, что явно не достаточно для достаточно плотного заполнения выбранной области конфигурационного пространства. В таком случае, может вполне оказаться, так что даже идеально подогнанный потенциал при МД моделировании вещества, скажем при непрерывном сжатии, будет довольно часто попадать в области состояния вещества, где имеется недостаток подгоночных атомных конфигураций. В этих случаях точность потенциала будет резко падать, и даже не исключено проявление нефизических/неверных свойств вещества, как например уменьшение жесткости алюминия и никеля со сжатием, как указано выше в случае с потенциалами Мишина (при этих сжатиях было использовано всего несколько подгоночных точек с малыми весами).

Мы разработали новый метод подгонки по механическим напряжениям в холодном кристалле [23] (stress-matching). Этот метод имеет целью конструирование EAM потенциалов специально настроенных на достоверное воспроизведение поведения материалов в широком диапазоне давлений и температур. В основе построения подгоночной базы данных лежит выбор атомных конфигураций соответствующих состояниям вещества, возникающих при непрерывном холодном сжатии. Таким образом, в основе базы данных лежит ab initio уравнение состояния вещества при абсолютном нуле температуры, а именно кривая холодного давления $P(V)$ при однородном сжатии/растяжении и компоненты тензора напряжений (тензора давлений) при одноосных деформациях кристалла вдоль основных кристаллографических осей. Такой выбор конфигураций для подгоночной базы данных гарантирует, что построенный потенциал будет правильно описывать механический отклик твердого тела на различные деформации при больших сжатиях/растяжениях. Более того, гладкость потенциальной функции и построенных на ней холодных кривых тензора давлений гарантирует хорошее согласие не только с точками из подгоночной базы данных, но и между ними вдоль всех гладкой базовой кривой $P(V)$. С учетом того что тепловая энергия и тепловое давление малы по сравнению с потенциальной энергией взаимодействия атомов и холодным давлением в плотной конденсированной фазе, то можно ожидать что потенциал даст также разумное термодинамическое поведение вещества вплоть до температур близких к критической. Здесь необходимо сказать, что игнорирование физического условия монотонности $P(V)$ при однородном или одноосном сжатии характерно для большинства работ по разработке межатомных потенциалов.

Таким образом, включение холодного тензора давлений $P(V)$, вычисленного DFT методом, в подгоночную базу данных является необходимым для разработки потенциалов межатомного взаимодействия, использование которого может обеспечить предсказательной силой МД моделирование сильно сжатых/растянутых состояний конденсированной среды.

Минимизация отклонения напряжений от базы данных осуществляется комбинированным методом, включающим в себя метод катящегося многогранника (downhill simplex algorithm) [39] и метод случайного блуждания.

Найденный локальный минимум возмущается вектором случайного смещения, с которого вновь начинается поиск нового локального минимума. Этот процесс повторяется до тех пор, пока поиск находит все более глубокие локальные минимумы за отведенное время. После того, как глубина вновь обнаруживаемых локальных минимумов не растет в течение примерно часа, поиск останавливается. Затем процедура повторяется с новыми начальными коэффициентами произвольного непаталогического EAM потенциала. После нескольких таких попыток лучший среди всех потенциал считается найденным и поиск прекращается. Описанный выше последовательный алгоритм в действительности реализован в нашей параллельной программе поиска, в которой каждый процессор независимо ищет свой лучший минимум, а мастер-процессор сравнивает их и сохраняет оптимальный. Используя сотни CPU, программа способна гораздо подробнее просканировать многомерное пространство и найти вариант лучше, чем последовательная программа за отведенное время. Но, даже использование параллельного поиска не гарантирует нахождения

глобального минимума, задача по поиску которого колоссально трудна. К счастью, решение задачи глобального поиска не является нашей целью.

Примеры EAM потенциалов, разработанных методом подгонки по холодным напряжениям, представлены на нашей страничке <https://www.researchgate.net/project/Development-of-interatomic-EAM-potentials>.

В данном проекте мы собираемся разработать новый потенциал межатомного взаимодействия рутения с помощью описанного подхода.

Для подгоночной базы напряжений рутения будут использованы пакеты квантово-механических DFT (density functional theory) вычислений VASP, Abinit, Elk и др.

З) Характеристики кремния, облученного лазером

В области изучения свойств кремния при ультракоротком лазерном облучении умеренной интенсивности одной из обсуждаемых в настоящее время задач является возможность построения двухтемпературного потенциала межатомного взаимодействия на основе подхода погруженного атома, что позволило бы проводить стандартное моделирование методом классической молекулярной динамики. Этому направлению исследований посвящен ряд работ (A. Tamm, Phys. Rev. B, 94, 024305, 2016; C. Lian, Phys. Rev. B, 94, 184310, 2016; R. Darkins et al, Phys. Rev. B, 98, 024304, 2018). Фундаментальной проблемой, встающей на пути разработчиков, в этом случае становится необходимость введения дополнительного условия сохранения полной энергии в течение моделирования, поскольку рассмотрение электронной температуры в расчёте как свободного параметра будет приводить к нарушению такого закона сохранения.

Среди успешных работ на этом пути стоит назвать недавно опубликованную работу R. Darkins, где было предложено на каждом шаге молекулярно-динамического расчёта для нового расположения ионов переопределять ионную теплопроводность, отказавшись от заранее заданного его значения, что позволит сохранить полную энергию, несмотря на то, что энергия электронной энергии будет меняться в соответствии с заданной зависимостью темпа электрон-фононного теплообмена. Последнее обстоятельство является слабым местом такого подхода, поскольку заранее выведенная функция соответствует тому подходу (Аллен-Даунер), который, по мнению авторов, и требует проверки.

В области применения метода электронного силового поля в задачах для кремния можно отметить недавнюю работу (P. L. Theofanis et al, Phys. Rev. Lett., 045501, 2012), где в рамках нового подхода была рассмотрена задача о пределе механической устойчивости кремния, а также была рассчитана его теплопроводность.

И) Новые подходы к расчетам коэффициента электрон-ионного взаимодействия в металлах

Современные расчёты электрон-фононного взаимодействия, такие как проведённые V. Recoules для золота, получили экспериментальное обоснование (R. Ernstorfer et al, Science, 323, 1033, 2009), поскольку анализ интенсивности отраженного рентгеновского излучения со временем не допускает такой интерпретации, при которой фононный спектр кристалла золота был бы не изменен и, напротив, хорошо описывается, если принять во внимание результаты расчётов (V. Recoules et al, Phys. Rev. Lett, 96, 055503, 2006). Впоследствии этот эффект в расчётах был обнаружен также для меди (D. V. Minakov, P. R. Levashov, Phys. Rev. B, 92, 224102, 2015). В плане использования полученной для фононного спектра информации стоит отметить работу Яна Форбергера (J. Vorberger et al, Phys. Rev. X, 6, 021003, 2016), где на примере алюминия впервые был проведен расчёт зависящей от двух температур функции Элиашберга. К сожалению, авторы использовали для интерпретации данных эксперимента недостаточно точную модель двухтемпературной гидродинамики, которая была необходима для восстановления электронной температуры, соответствующей каждой точке. Поэтому отличие полученных авторами (J. Vorberger et al, Phys. Rev. X, 6, 021003, 2016) результатов от иных известных источников (Z. Lin, L. Zhigilei, V. Celli, Phys. Rev. B., 77, 075133, 2008; Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, K. P. Migdal, JETP Letters, 97, 27, 2013) не может быть однозначно истолковано как преимущество нового подхода.

Изучение влияния электронной температуры на электронный спектр было проведено в работах группы A. Ng (Z. Chen et al, Phys. Rev. Lett. 110, 135001, 2013; B. Holst et al, Phys. Rev. B, 90, 035121, 2014). Известная модель Аллена-Даунера в предложенных авторами упомянутых здесь работ была дополнена зависимостью электронного спектра золота от температуры. Величина константы электрон-фононного теплообмена также определялась первопринципным путем - методом замороженных фононов. Однако в этом случае учета электронного нагрева не проводилось, что главным образом отличает указанные здесь работы от предлагаемых авторами. Полученная для золота зависимость электрон-фононного теплообмена в работе (B. Holst et al, Phys. Rev. B, 90, 035121, 2014) оказалась близкой к полученной ранее (Z. Lin et al, Phys. Rev. B, 77, 075133, 2008), что говорит о том, что прямое влияние лишь изменения электронного спектра на электрон-фононный теплообмен невелико, но при этом никак не изучен вопрос о опосредованном влиянии электронной подсистемы через изменение уже фононного спектра с нагревом электронов.

- [1] M.E. Povarnitsyn, T.E. Itina, P.R. Levashov, and K.V. Khishchenko, Mechanisms of nanoparticle formation by ultra-short laser ablation of metals in liquid environment, *Phys. Chem. Chem. Phys.* V. 15, 3108-3114 (2013)
- [2] Cheng-Yu Shih, M.V. Shugaev, Chengping Wu, and L.V. Zhigilei, Generation of Subsurface Voids, Incubation Effect, and Formation of Nanoparticles in Short Pulse Laser Interactions with Bulk Metal Targets in Liquid: Molecular Dynamics Study, *J. Phys. Chem. C*, vol. 121, 16549–16567, (2017)
- [3] N. Inogamov, V. Zhakhovsky, and V. Khokhlov, Laser ablation of metal into liquid: Near critical point phenomena and hydrodynamic instability, *AIP Conference Proceedings* V. 1979, 190001 (2018); <https://doi.org/10.1063/1.5045043> presented at: Shock Compression of Condensed Matter – 2017
- [4] Cheng-Yu Shih, R. Streubel, J. Heberle, A. Letzel, M.V. Shugaev, Chengping Wu, M. Schmidt, B. Gökce, S. Barcikowski, and L.V. Zhigilei, Two mechanisms of nanoparticle generation in picosecond laser ablation in liquids: the origin of the bimodal size distribution, *Nanoscale*, v. 10, issue 15, pp. 6900-6910 (2018)
- [5] Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, В.А. Хохлов, Динамика абляции золота в воду, *ЖЭТФ*, т. 154, вып. 1(7), стр. 92-123 (2018)
- [6] Барышева М М, Пестов А Е, Салашенко Н Н, Торопов М Н, Чхало Н И "Прецизионная изображающая многослойная оптика для мягкого рентгеновского и экстремального ультрафиолетового диапазонов" УФН 182 727–747 (2012) DOI: 10.3367/UFNr.0182.201207c.0727
- [7] B. Albertazzi, N. Ozaki, V. Zhakhovsky, et al, Dynamic fracture of tantalum under extreme tensile stress. *Science Advances* V. 3, e1602705 (2017) <http://dx.doi.org/10.1126/sciadv.1602705>
- [8] T.A. Pikuz, A.Ya. Faenov, N. Ozaki, et al, Indirect monitoring shot-to-shot shock waves strength reproducibility during pump–probe experiments, *Journal of Applied Physics* V. 120, 035901 (2016). <http://dx.doi.org/10.1063/1.4958796>
- [9] A. Faenov, T. Pikuz, M. Ishino, N. Inogamov, V. Zhakhovsky, I. Skobelev, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Kando, R. Kodama, T. Kawachi, "Soft x-ray laser ablation of metals and dielectrics", *Proc. SPIE* V. 10243, 102430S (2017) X-ray Lasers and Coherent X-ray Sources: Development and Applications, 102430S (May 17, 2017); doi:10.1117/12.2264966; <http://dx.doi.org/10.1117/12.2264966>
- [10] I. A. Makhotkin, R. Sobierajski, J. Chalupský, et al, Experimental study of EUV mirror radiation damage resistance under long-term free-electron laser exposures below the single-shot damage threshold, *J. Synchrotron Rad.* V. 25, 77-84 (2018). <https://doi.org/10.1107/S1600577517017362>;
- Igor A. Makhotkin, Igor Milov, Jaromir Chalupský, et al, Damage accumulation in thin ruthenium films induced by repetitive exposure to femtosecond XUV pulses below the single-shot ablation threshold, *Journal of the Optical Society of America B* Vol. 35, Issue 11, pp. 2799-2805 (2018) <https://doi.org/10.1364/JOSAB.35.002799>
- [11] Igor Milov, Igor A. Makhotkin, Ryszard Sobierajski, et al, Mechanism of single-shot damage of Ru thin films irradiated by femtosecond extreme UV free-electron laser, *Optics Express* Vol. 26, Issue 15, pp. 19665-19685 (2018) <https://doi.org/10.1364/OE.26.019665>
- [12] Igor Milov, Vladimir Lipp, Nikita Medvedev, Igor A. Makhotkin, Eric Louis, and Fred Bijkerk, Modeling of XUV-induced damage in Ru films: the role of model parameters, *Journal of the Optical Society of America B* Vol. 35, Issue 10, pp. B43-B53 (2018) <https://doi.org/10.1364/JOSAB.35.000B43>
- [13] Nesma T. Aboulkhair, Nicola M. Everitt, Ian Ashcroft, Chris Tuck, Reducing porosity in AlSi10Mg parts processed by selective laser melting, *Additive Manufacturing Volumes 1–4*, 77-86 (2014) <https://doi.org/10.1016/j.addma.2014.08.001>
- [14] Chu Lun Alex Leung, Sebastian Marussi, Robert C. Atwood, Michael Towrie, Philip J. Withers & Peter D. Lee, In situ X-ray imaging of defect and molten pool dynamics in laser additive manufacturing, *Nature Communications* V. 9 (1), 1355 (2018) <https://doi.org/10.1038/s41467-018-03734-7>
- [15] Richard Martukanitz, Pan Michaleris, Todd Palmer, Tarasankar DebRoy, Zi-Kui Liu, Richard Otis, Tae Wook Heo, Long-Qing Chen, Toward an integrated computational system for describing the additive manufacturing process for metallic materials, *Additive Manufacturing*, V. 1, 52-63 (2014) <http://dx.doi.org/10.1016/j.addma.2014.09.002>
- [16] D. S. Ivanov L. V. Zhigilei. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films, *Phys. Rev. B* 68, 064114 (2003). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.68.064114>
- [17] E. Leveugle, D. S. Ivanov, L. V. Zhigilei. Photomechanical spallation of molecular and metal targets: molecular dynamics study, *Appl. Phys. A* 79, 1643 (2004). <http://dx.doi.org/10.1007/s00339-004-2682-2>
- [18] E. M. Bringa, J. U. Cazamias, P. Erhart, J. Stolken, N. Tanushev, B. D. Wirth, R. E. Rudd, M. J. Caturla. Atomistic shock Hugoniot simulation of single-crystal copper, *J. Appl. Phys.* 96, 3793 (2004).
- [19] E. M. Bringa, K. Rosolankova, R. E. Rudd, B. A. Remington, J. S. Wark, M. Duchaineau, D. H. Kalantar, J. Hawreliak, J. Belak. Shock deformation of face-centred-cubic metals on subnanosecond timescales, *Nature Materials* 5, 805 (2006).
- [20] T. C. Germann, J. E. Hammerberg, B. L. Holian. Large-Scale Molecular Dynamics Simulations of Ejecta Formation in Copper, *AIP Conference Proceedings* 706, 285(2004).

- [21] K. Kadau, T. C. Germann, P. S. Lomdahl, B. L. Holian. Atomistic simulations of shock-induced transformations and their orientation dependence in bcc Fe single crystals, *Phys. Rev. B* 72, 064120 (2005).
- [22] K. Kadau, J. L. Barber, T. C. Germann, B. J. Alder. Scaling of atomistic fluid dynamics simulations, *Phys. Rev. E* 78, 045301 (2008). See also LANL report LA-UR-08-2605.
- [23] V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, S. I. Ashitkov, K. Nishihara. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials, *Appl. Surf. Sci.* 255, 9592 (2009). <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2009.04.082>
- [24] B. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, I. I. Oleynik. Ultrashort shock waves in nickel induced by femtosecond laser pulses, *Phys. Rev. B* 82, 064113 (2010). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.82.064113>
- [25] V. V. Zhakhovsky, M. M. Budzevich, I. I. Oleynik, C. T. White. Two-Zone Elastic-Plastic Single Shock Waves in Solids, *Phys. Rev. Lett.* 107, 135502 (2011). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.135502>
- [26] M. M. Budzevich, V. V. Zhakhovsky, C. T. White, I. I. Oleynik. Evolution of Shock-Induced Orientation-Dependent Metastable States in Crystalline Aluminum, *Phys. Rev. Lett.* 109, 125505 (2012). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.125505>
- [27] B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, I. I. Oleynik. Ultrashort shock waves in nickel induced by femtosecond laser pulses, *Phys. Rev. B* 87, 054109 1 (2013). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.87.054109>
- [28] M. S. Daw M. I. Baskes. Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals, *Phys. Rev. Lett.* 50, 1285 (1983). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.1285>
- [29] M. S. Daw, M. I. Baskes. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals, *Phys. Rev. B* 29, 6443 (1984). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>
- [30] M. W. Finnis J. E. Sinclair. A simple empirical N-body potential for transition metals, *Philos. Mag. A* 50, 45 (1985). <https://doi.org/10.1080/01418618408244210>
- [31] S. M. Foiles. Application of the embedded-atom method to liquid transition metals, *Phys. Rev. B* 32, 3409 (1985). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.32.3409>
- [32] A. F. Voter S. P. Chen. В сб.: High temperature ordered intermetallic alloys. MRS Symposia Proceedings No. 82 /Под ред. R. W. Siegel, J. R. Weertman, R. Sundan. Materials Research Society, Pittsburgh, (1987).
- [33] P. Hohenberg W. Kohn. Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.* 136, 864 (1964). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.864>
- [34] Y. Mishin, D. Farkas, M. J. Mehl, D. A. Papaconstantopoulos. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations, *Phys. Rev. B* 59, 3393 (1999).
- [35] M. Igarashi, M. Khantha, V. Vitek, "N-body interatomic potential for hexagonal close packed metals", *Phil. Mag. B*, 63, 603-627 (1991)
- [36] S. Chen, J. Xu, H. Zhang, A new scheme of many-body potentials for hcp metals, *Computational Materials Science*, 29, 428–436 (2004)
- [37] Y. Mishin. Interatomic potentials for metals. В сб.: Handbook of Materials Modeling /Под ред. S. Yip, volume 1. Springer, (2005).
- [38] F. Ercolessi, J. B. Adams. Interatomic potentials from first-principles calculations: the force-matching method, *Europhys. Lett.* 26, 583 (1994).
- [39] J. A. Nelder, R. Mead. A Simplex Method for Function Minimization, *Comp. J.* 7, 308 (1965). <https://doi.org/10.1093/comjnl/7.4.308>
- [40] R. A. Gingold, J. J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 181 (3) (1977) 375–389. <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/181.3.375>
- [41] A. N. Parshikov, S. A. Medin, Smoothed particle hydrodynamics using interparticle contact algorithms, *Journal of Computational Physics* 180 (1) (2002) 358 – 382. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2002.7099>
- [42] D. Zhang, C. Jiang, S. Li, A fast adaptive load balancing method for parallel particle-based simulations, *Simulation Modelling Practice and Theory* 17 (6) (2009) 1032 – 1042. <https://doi.org/10.1016/j.simpat.2009.03.003>
- [43] J. Cherfils, G. Pinon, E. Rivoalen, JOSEPHINE: A parallel SPH code for free-surface flows, *Computer Physics Communications* 183 (7) (2012) 1468– 1480. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.02.007>
- [44] F. Fleissner, P. Eberhard, Parallel load-balanced simulation for shortrange interaction particle methods with hierarchical particle grouping based on orthogonal recursive bisection, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 74 (4) (2008) 531–553. <https://doi.org/10.1002/nme.2184>
- [45] V. Zhakhovskii, K. Nishihara, Y. Fukuda, S. Shimojo, T. Akiyama, S. Miyanaga, H. Sone, H. Kobayashi, E. Ito, Y. Seo, M. Tamura, Y. Ueshima, A new dynamical domain decomposition method for parallel molecular dynamics simulation, in: CCGRID 2005. IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid, 2005., Vol. 2, 2005, pp. 848–854 Vol. 2. <https://doi.org/10.1109/CCGRID.2005.1558650>

- [46] N.A. Inogamov and V.V. Zhakhovsky, Surface 3D nanostructuring by tightly focused laser pulse: simulations by Lagrangian code and molecular dynamics, Journal of Physics Conference Series 681(1):012001 (2016) <https://doi.org/10.1088/1742-6596/681/1/012001>
- [47] S.A. Dyachkov, A.N. Parshikov, M.S. Egorova, S.Yu. Grigoryev, V.V. Zhakhovsky, and S.A. Medin, Explicit failure model for boron carbide ceramics under shock loading, Journal of Applied Physics V. 124, 085902 (2018); <https://doi.org/10.1063/1.5043418>
- [48] Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики: 2-е изд., доп. — М.: Наука. (1992)
- [49] С.И. Анисимов, Б.Л. Капелиович, Т.Л. Перельман, Электронная эмиссия с поверхности металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов, ЖЭТФ, Т. 66 (2), 776-779 (1974) [S.I. Anisimov, B.L. Kapeliovich, T.L. Perelman, Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses, Sov. Phys. JETP V. 39(2), 375-377 (1974)]
- [50] Ю.В. Петров, Н.А. Иногамов, К.П. Мигдал, Теплопроводность и коэффициент электрон-ионного теплообмена в конденсированных средах с сильновозбужденной электронной подсистемой, Письма ЖЭТФ Т. 97, 24-31 (2013).
- [51] A.V. Bushman, V.E. Fortov, G.I. Kanel, and A.L. Ni, Intense Dynamic Loading of Condensed Matter, Taylor & Francis Translation, London (1993), 295 p.
- [52] I. Lomonosov, Multi-phase equation of state for aluminum, Laser and Particle Beams V. 25(4), 567-584. <https://doi.org/10.1017/S0263034607000687>
- [53] K.V. Khishchenko, S.I. Tkachenko, P.R. Levashov, I.V. Lomonosov, and V.S. Vorobev, Metastable States of Liquid Tungsten Under Subsecond Wire Explosion, Int. J. Thermophys. V. 23, No. 5, 1359-1367 (2002)
- [54] <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/>
- [55] <http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>

на английском языке

A) Spatially distributed heating due to a combination of plasmon and laser EM fields

Plasmonics is an important branch of modern physics, which has significant applications today and many promising applications for the future. It generates great interest among many groups (see the example in section 4.2 with the METANANO conference).

Another major direction is connected with laser technologies that use the laser heating, melting and thermomechanical effects. All listed tasks from A to G refer to this scientific direction. Generally speaking, plasmonics and laser thermomechanics develop independently, since the used theoretical methods differ fundamentally.

Our work on task A is aimed at creating a bridge between these two scientific fields.

Scientific competitors. The first works approaching this direction were performed in recent years. But they refer to the melting of nanoparticles in colloids, which is far from our task.

The closer to us work is performed by the group headed by Prof. Jean-Philippe Colombier from University Jean Monnet Saint-Etienne, Laboratoire Hubert Curien and Dr. R. Stoian - head of the Laser-matter interaction group at the same university. They consider thermal and hydrodynamic effects along with plasmon fields, but in dielectrics. These studies are mainly focused on the analysis of periodic structures like laser induced periodic surface structures (LIPSS) in the bulk and on the surface of dielectric materials.

B) Effect of vortex beams

This direction appeared relatively recently from the works [5] in the list of references to p. 1.4. It is currently divided into two sub-directions. In the first one, the beam diameter on the target is of the order of the wavelength. Here they are interested in the central feature of the structure in the form of a spiral elevation, see fig. 2 in the attached p. 4.13 file 1. This sub-direction belongs to our task B.

On the second sub-direction, the diameter of the vortex beam on the target is large — many wavelengths fit on the diameter. They are interested in the usage of multiple pulses and the formation of spiral structures like LIPSS (laser induced periodic surface structures) on the surface. A conventional (non-vortex) large-diameter beam produces a system of periodic crests (like frozen sea wave). The direction along the ridges is perpendicular to the polarization vector of the laser electromagnetic wave. For a wide vortex beam, the direction of polarization changes inside the spot from point to point.

Accordingly, the ridges are fancifully turned. In such studies, the most advanced group is one headed by Prof. Salvatore Amoroso from Neapolitan University of Naples Federico II University. But this field is far from our task B.

C) The formation of nanoparticles during ablation into a liquid.

The active scientific work is observed in this direction. It is considered promising with the possibilities of substantial commercialization. Basically, as it can be seen from recent reviews [12] to Section 1.4, the lasers physicists and chemists are involved to such work. They enumerate the parameters of laser exposure, targets (pure substances, alloys, laminates) and

ablation-receiving fluids (inorganic and organic, salt solutions). At the same time, fundamental issues remained unresolved yet due to the complexity of the processes.

The final stage of the process, when the bubble is clearly visible, has been studied in detail both in experiments and theoretically. The last work of this kind is [13] cited in the list of references to Section 1.4. This is the work of David Amans from Claude Bernard University Lyon 1. The theory relies on integrating the Rayleigh-Plesset equation. Bubble observations in [13] start from several microseconds, while the duration of the applied laser pulses varies in different experiments from subpicoseconds to nanoseconds. The "invisible era" in the experiments remains at times shorter than a microsecond.

About five years ago [1], the first works [1-5] appeared that shed light on the initial stages. The most significant contributions are made by the Povarnitsyn's group from JIHT RAS [1], and T.E. Itina [1] from Laboratoire Hubert Curien, Université de Lyon, Université Jean Monnet, and Prof. L.V. Zhigilei [2,4] from the University of Virginia. At present, studies have only been performed with ultrashort laser pulses (on the order of picoseconds or less). Evolution is tracked over the first few nanoseconds after exposure. In our work [3,5], the process is brought to a record of 0.2 microseconds, which, however, is still far from the bubble stage.

A significant achievement of the works [2-5] is the study of hydrodynamic stability at the contact zone between the metal and the receiving liquid. It is shown that under conditions of ultrashort pulses, the Rayleigh-Taylor instability develops due to the braking of a heavy metal by a liquid. This leads to the penetration into the liquid of rather large nanoparticles with dimensions of the order of a dozen nanometers.

As mentioned in the preceding paragraphs, the project will follow the complete evolution of the flow from the initial stage to the formation and dynamics of the micro-bubble. The effect of the pulse duration over the entire range of applied fluences will be studied. Such work requires detailed information about the fluid. This will be done with the example of water. Reference data on the thermal conductivity of water and the equation of state that covers the entire range of compressions and expansions of water from the Hugoniot adiabat to the two-phase region will be used. Note that in previous studies, the simplified descriptions of water were utilized.

D) Laser fragmentation of liquid droplets and jets

The great interest arose to laser-induced fragmentation of tin drops or a mixture of tin with iridium in connection with the program for creating photolithographic machines operating with extreme ultraviolet light (EUV) or a soft X-ray. The customers are ASML (Holland, <https://www.asml.com/asml/>), the University of Twente (Holland) and the Institute of Spectroscopy of the Russian Academy of Sciences in Troitsk. The site ASML says that the company began selling EUV systems recently. The machine is called NXE: 3400B system. EUV systems use 13.5 nm shortwave light. Accordingly, the diffraction limit decreases and the packing density of elements on the chip increases. However, it is necessary to work in vacuum, and not in a liquid, as in the case of DUV (deep ultraviolet), and to use X-ray multilayer mirrors as optics; review of works on multilayer coatings is given in [6].

Another problem of phenomena, induced by the X-ray laser pulses to expose a droplet of water, arises in connection with the work [14] of Prof. Claudiu Stan, cited in Section 1.4. Their group will provide experimental data with which our numerical simulation will be compared. Prof. Claudiu Stan's group conducts experiments on free electron lasers (Linac Coherent Light Source, SACLA, FEL FLASH to DESY). This is a fundamental study of the initial stages of phase transitions associated with the generation of nuclei of a new phase. Moreover, X-ray lasers with an ultrashort pulse are involved into research. Such a pump pulse drives the substance motion in the target, while a subsequent diagnostic (probe) pulses probe the evolution of a substance at the micrometer-sized scale. The research includes diffraction measurements at a frequency in units of MHz of the X-ray laser pulse repetitions. Experimental capabilities are the most advanced in his group.

E) Ablation of refractory metals

The phenomenon of laser ablation has long been known. There are two regular international ablation conferences: HPLA (high power laser ablation, <https://www.usasymposium.com/hpla>) and COLA (conference on laser ablation, <https://cola2017.sciencesconf.org/>, <https://cola2019.org/>). However, this topic is also presented at other international conferences: for example, ICPEPA or FLAMN. Laser ablation of simple metals has been the subject of many papers. Today, the specificity associated with ultrashort pulses, when thermomechanical effects play an important role, is well recognized.

But there are complications. They belong to the so-called "non-standard" metals, X-ray lasers and irradiation at small sliding angles. Such irradiation is used in X-ray mirrors in the case of a hard X-ray. This is necessary to increase the reflection coefficient. Such a task will be solved in the project. Our "non-standard" material is ruthenium. The situations formed by a femtosecond pulse generated by lasers will be analyzed. The range of electromagnetic wavelengths is considered: optics - soft X-rays - hard X-rays.

There are groups that systematically apply hard X-rays for heating purposes (for example, [14], in Section 1.4) or diagnostics (same [14], and [7] here) or check the hard radiation coming from rapidly hot targets [8]. The soft x-rays are used for sensing

in work [9] (in references to Sec. 4.1). Ref. [9] gives a review of the research done by late Anatoly Yakovlevich Faenov on the ablation of metals and dielectrics with soft X-rays.

The applied aspect of the problem under study is described in [10]. The application of the Monte-Carlo/XCASCADE (3D) code describing the kinetics of photo-ionization, in conjunction with the two-temperature model (but without the movement of material), is presented in [11]. The two-temperature model of ruthenium (without hydrodynamics) is analyzed in [12]. In our project the complete task will be solved, i.e. taking into account both purely thermal and hydrodynamic effects. This will allow us to solve the issue of ablation thresholds and with comparison with experiments.

F) Laser melting of powders

The project will explore the most important part of the modern cutting-edge technology called as 3D printing. At present, this popular technology is expanding rapidly; several generations of automated machine tools have been created. The printing consists of several linked steps. First, a project of the future product is created in the computer-aided design (CAD) system. Then the product is dissected into thin sections 50–200 μm thick in the same 3D system. Secondly, a flat horizontal layer of micro-powder is formed in a horizontal bath. Finally, thirdly, the laser beam, adjustable by mirrors, melts the powder particles. The melting contour, along which the laser beam moves, is specified by a computer according to the sections specified in the CAD program.

The most complex and poorly studied link is associated with the physics of laser melting and recrystallization of micro-powder. A significant study is required in this field. This is mainly an experiment [13,14]. In numerical approaches, researchers use finite-difference methods or the finite element method [15]. Our project is based on a physical model and collectively developed programs with Lagrangian hydrodynamics, molecular dynamics with Monte Carlo method for electron thermal conductivity, and SPH code, which is specially adapted to describe 3D situations with complex geometry (powders, porous or layered media).

G) Computational physics, large-scale high-performance numerical simulation

Our team constantly leads the improvement of numerical tools, see, for example Ref. [15] in Sec. 1.4. In this project, because it is necessary to improve those tools for solving the above physical problems.

(Subsection G-1: Two-temperature hydrodynamics)

The hydrodynamic code in Lagrangian variables was created in our team 15 years ago. It is based on the well-known scheme suggested by Samarskii and Popov [48]. The scheme was drastically modified to match the laser effects with femtosecond pulse durations. With such an impact, it is necessary to take into account the strong excitation of the electronic subsystem. With our laser intensities (with an absorbed energy greater than 1 mJ/cm^2), the electron-electron relaxation ends in a time shorter than the pulse duration.

Therefore, the electron subsystem can be described as a thermodynamically quasi-equilibrium system with an effective electron temperature T_e . The concept of internal separation into the electronic and ion subsystems was created at one time in the pioneering work [49]. This work helped to realize the fundamental difference between the effects of nanosecond (ns) and femto-picosecond (fs-ps) pulses. In ns pulses, the target substance evaporates or, at higher energies, a plasma corona is formed. Whereas at the fs-ps range, the thermomechanical effects in the condensed phase prevail. Thus, the physics of laser effects on materials changes qualitatively.

After creating a way to form ultrashort pulses with a compressor and stretcher (Gerard Moore and Donna Strickland, 1985), the era of the most active applications of these pulses in various applications (the Nobel Prize in Physics for 2018, the creation of tools from light) began. The researchers, who used ultrashort pulses, tried to first explain the effects of exposure using the then usual ideas applicable for ns pulses. Nothing worked. Only after using the ideas and approach of [49] (published 11 years before the work of Moore and Strickland, 1985) it became clear what was happened.

So, the physics of two-temperature states was added to the scheme [48]. The energy balance was split into two balances – the energy equations for the electron and ion subsystems, written separately. Then, the work began on establishing and building state equations in two-temperature conditions, calculating the thermal conductivity coefficient in two-temperature conditions, and determining the coefficient controlling the rate of energy exchange between the electron and ion subsystems in a condensed-phase material. Currently, our hydrocode is quite close in spirit to that developed in the IHT RAS, in the Povarnitsyn's group [1].

Unfortunately, there is no universal recipe for this information. Each metal requires independent research. Moreover, the coefficients differ strongly from one group of metals (noble) to another (for example, iron, nickel, platinum), see [50] and references in this work. The ability to use the tabular equations of single-temperature states prepared by colleagues from IHT RAS [51-55] has been added to our hydrocode. Creating equations of state is a very important work.

The two-temperature hydrocode needs to be improved for each specific application. The code modification for the

calculation of subnanosecond actions was completed this year; see the second article in reference [6] to Sec. 1.4. The project will carry out the works on expanding calculations for nanosecond pulses and record-breaking times (up to μs). A complete equation of the state of water will be added to the hydrocode, which, as stated in this proposal, will cover a wide range of water states from double compression on the Hugoniot curve to rarefaction up to hundredths of the atmosphere of two-phase mixtures. In our previous work with water, the Grüneisen adiabat was used, see [6] to Sec. 1.4. A block for calculation of ruthenium will be also added in this project.

(Subsection G-2: Molecular dynamics)

In the last decade, the rapid growth of available computing resources made it possible the atomistic modeling of large systems having dimensions of several micrometers, which is approaching the scale of experiments with the influence of femtosecond lasers on films of micrometer thickness. Thus, straightforward molecular dynamic (MD) simulation of a variety of laser-induced phenomena, including shock-wave phenomena, elastic-plastic transformations and phase transitions in materials under the action of high-speed deformations, has become possible [16-27]. At present, MD studies of such phenomena on a class of multiprocessor computers (available to us) can be performed on micrometer-sized samples within a few nanoseconds of the physical time of the process in a sample for a reasonable wall-clock time.

We use our own multiprocessor high-performance classical molecular dynamic simulation program with efficient parallelization. The scheme was first introduced in [45]. The method is named: material particle - dynamical domain decomposition (abbreviated MPD3) method. Note that, following similar principles, we developed an effective high-performance algorithm for SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics, see the next subsection for reference) simulation, see the description in [15] in the list of references to Sec. 1.4. At present, the corresponding code is called CSPH-VD3 (Voronoi dynamical domain decomposition), since, like MPD3, it is based on three-dimensional decomposition of material samples into moving Voronoi subdomains, see detailed description below in the next subsection G-3.

Relatively recently, the MD program has been combined with a Monte-Carlo (MC) module for the calculation of electronic thermal conductivity. As it is known, in metals the electron thermal conductivity is much higher than the thermal conductivity associated with the thermal motion of ions. In our combined MC-MD code, each ion carries a quasi-electron with which it exchanges their momenta [46]. Random exchanges of electrons between neighboring ions at a given rate preserve the electro-neutrality of the material and allow the electron energy to diffuse through the grid of ions. Dips of density and discontinuities in material naturally reduce the coefficient of electronic thermal conductivity. Thus, the MC module allows you to correctly simulate the distribution of heat in metals and mesoscopic structures such as metal foams, and in particular the propagation of the melting and recrystallization fronts in such complex environments, that it is very difficult to achieve by the popular combination of MD with a mesh method for the problem of heat conduction [2, 4, 16].

(Subsection G-3: SPH)

Parallel modeling of non-stationary problems of continuum mechanics in extreme states characterized by significant pressure and velocity gradients, free surfaces and contact density discontinuities is faced with the problem of efficient use of computational resources due to the lack of a high-performance parallel processor with rapid changes in the spatial distribution of matter. Under these conditions, approaches using a static spatial decomposition of the computational domain (for example, LAMMPS: Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) cannot provide an acceptable parallel calculation efficiency, since the distribution of the payload determined by the computational cost of calculating the motion of a substance is not tied to this movement.

We successfully develop an efficient load balancing algorithm and create a parallel program for large computational clusters that can evenly and maximally load available processors with useful work, and thereby ensure a high parallel efficiency of computation of hydrodynamic problems characterized by high-speed motion of matter and its fast redistribution [15] to Section 1.4.

Such tasks include modeling the proposed tasks of this project, in particular the laser effect on heterogeneous media and the calculation of the passage of the melting front along the mesostructure of the granular medium (powder), see the project text. Also in demand is effective parallel modeling of the problem of fragmentation of droplets and jets after irradiation with a light pulse (see project text), impact destruction of fragile materials [47], and high-speed collision of bodies.

Using the meshless SPH method [40], improved by solving the Riemann problem for interacting SPH particles [41], is preferable to use the mesh methods for modeling the processes listed above, which are very difficult to accurately resolve contact and free boundaries (for the Eulerian formalism) building mobile adaptable grids with Lagrangian medium description.

Solving the problem of uniform distribution of computational work between threads, processes or processor cores of a computer cluster is the key to building an effective parallel program. For the above problems of hydrodynamics, this task reduces to an optimal distribution of computational work between processors, i.e. to the decomposition of the simulated

material samples between processes. In this case, even decomposition is a necessary, but not sufficient condition for optimality, since the exchange of information between processes is determined by the number of interacting particles that are in different processes. These particles are distributed in the volume of the border strip between the processes in the case of spatial decomposition of the medium and provide interaction between adjacent areas of the medium belonging to different processes.

A frequently used method of spatial decomposition is the method of division into parallelepiped subregions [42,43]. Under conditions of spatial inhomogeneity of the particle density, such a division can be performed recursively, by the method of orthogonal recursive bisection [44]. The idea of the method is simple: a rectangular area is recursively divided into two parts along the long side, so that each has an equal number of particles. Borders between rectangular subregions are planes parallel to the axes of coordinates. Balancing is carried out through the mobility of these planes separating the subregions. But with rebalancing, connectivity between processes can change significantly. Since the subdomains have a different number of neighbors, the reorganization of the decomposition requires multiple particle exchanges. This method of decomposition does not take into account the mixing of particles. All this, taken together, increases the calculation time due to significant exchanges of particles located in the frontier bands between the processes.

For a more efficient dynamic load balancing, we developed and use the method of dynamic decomposition of the material samples (not the space of the computational domain) into moving Voronoi subdomains [15] to Sec. 1.4. Voronoi decomposition is uniquely defined by a set of generator points of the Voronoi diagram, where each point of the diagram corresponds to one computational process. The particles closest to the point-generator of the Voronoi subdomain are contained in the memory and updated with the corresponding process responsible for this subdomain. The mobility of the Voronoi diagram is carried out through the mobility of generator points, since their position is associated with the movement of the particles belonging to them. Loads of individual subdomains may vary in time, and the reason for which are the following factors. First, in the Voronoi subdomain, the number of particles can vary both for algorithmic reasons (fragmentation and merging of particles, adjusting the chart boundary due to a shift in the center of the diagram), and for physical reasons: according to changes in the density distribution and/or discontinuity of the environment surrounding point generator. Secondly, and this is very important, the physical processes inside each of the particles are local, which means that they can be calculated by their specific algorithms of different time consuming.

These factors lead to the fact that the sets of SPH particles in each Voronoi subdomain are processed at different times, which means that the processes are unevenly loaded. Therefore, the positions of the generator points are additionally shifted by the balancing displacement [45], redistributing the boundary particles from one region to another, which equalizes the computational load. Such an algorithm for load-balancing Voronoi decomposition is used together with the SPH-method for modeling problems of continuum dynamics for the first time.

The Voronoi auto-balancing decomposition algorithm allows one to naturally take into account the mass redistribution in the computational domain during the simulation. The algorithm is able to adapt to arbitrary flows with a minimal exchange of particles between cells, without requiring the preservation of connectivity between the Voronoi diagram generators. Data exchange between the subdomains of the diagram is localized pair-wise communication; at the same time, the surfaces through which the exchange takes place are usually smaller than in the methods with block (by parallelogram) decomposition of the region. Balancing decomposition is fully adaptive and to maximize the efficiency of the calculation does not require its rebuilding from scratch.

Decomposition according to Voronoi method with load balancing does not have the drawbacks characteristic of static decomposition or dynamic with bisection methods noted above. The experience of our calculations shows that the geometry of the subdomains tends to a cellular structure that has a minimum volume of border zones. Maximizing the load reduces the number of particles to be exchanged. The Voronoi subdomains also tend to an equal number of subdomains-neighbors, and the connectivity of the subdomains is not fixed and may change, following the mutual movement of the substance. Changing connectivity in this case is a local process that does not require massive communication between all processes. All communications between subdomains are carried out only within the circle of their nearest neighborhoods. Thus, despite the fact that the Voronoi decomposition is more difficult to program than the methods described above, it has indisputable advantages in solving problems of continuum mechanics in extreme states.

(Subsections G-4, 5: Development of potentials using cold stresses from DFT calculations)

The potentialities inherent in atomistic modeling are so great that they can lead to a deeper understanding of various physical phenomena caused by high-speed deformation, which can be caused by ultrafast release or energy transfer in metals under the action of a laser pulse, electrical discharge or shock wave front. All such effects on materials create extreme pressure gradients (~ 1 GPa/nm) and temperatures (~ 100 K/nm), which lead to complex highly non-equilibrium flows of matter with possible phase transitions and discontinuities in the form of bubbles and cracks. It is worth noting that, in contrast to MD, approaches based on continuum mechanics and the equation of state, which are widely used in modeling, are internally

unable to describe the physics of all various high-speed nonequilibrium processes, such as cavitation, cracking and spalling, dislocations, and elastic-plastic transformations, as well as the kinetics of nonequilibrium phase transitions. Nowadays, the MD method is becoming a serious competitor to hydrodynamic methods in modeling phenomena, where large gradients of physical quantities arise, leading to rapid deformations and transformations of matter.

The reliability of the interatomic potential used in such extreme conditions is a critical requirement necessary for the predictive power of MD simulation. One of the most successful approaches for MD modeling of metals is the embedded atom model (EAM), which is a multi-body potential that is necessary for modeling a metallic bond [28-32]. The first generation of EAM potentials was based on simple analytical functions of charge density and energy, which have physical bases in the density functional theory [33].

The above works gave potentials that are optimized only for the general properties of metals, such as equilibrium density, cohesive energy, and elastic constants under normal conditions near zero pressure and room temperature.

Most of the intensively used modern EAM potentials were developed without regard to theoretical ideas about interatomic forces in a solid body in order to gain more freedom for fitting to experimental data and first-principle quantum mechanical calculations. Therefore, these second-generation potentials, having the form of tables or a set of splines, are more accurate in their ranges of definition than the previously proposed first-generation potentials. However, outside the range of parameters where fitting was carried out, the potentials of the second generation are often not able to correctly describe the properties of a substance. For example, the widely used Mishin potentials for aluminum and nickel [34] are fairly well optimized for small strains and strains near room temperature, but lead to incorrect behavior of the metal with strong compressions of tens of GPa and higher. In particular, there is a decrease in the sound speed with compression and the appearance of rarefaction shock waves in aluminum and nickel, which fundamentally contradicts the experimental data. Similar restrictions on the field of application are typical for most EAM potentials of the second generation, including potentials for refractory metals, for example, for ruthenium [35,36].

Since the physical processes of interest to us occur as a result of extreme conditions caused by ultrafast localized energy release, then for credible MD simulation of these processes, potentials are needed that have been developed specifically for use in a wide range of pressures and temperatures.

There are two common methods for fitting interatomic EAM potentials based on first-principle databases: energy matching [37] and force matching [38]. When the energy is adjusted, the set of ab initio energies is calculated for various atomic configurations and crystal states. This set is commonly referred to as a fitting database. Then, parameters/coefficients of the EAM potential are searched/adjusted to reproduce the energy from the database as accurately as possible. A similar scheme is used for fitting by forces, for which ab initio forces between atoms are calculated. A combination of these two methods is often used also.

The main disadvantage of such fitting methods is that the atomic configurations entered into the database are not related to each other by any continuous physical process, such as isothermal compression or isochoric heating. Thus, the selected atomic configurations are physically poorly connected and strongly scattered in the multidimensional configuration space of atomic coordinates, and there is no guarantee that even a perfectly fitted interatomic potential will give accurate energies/forces in atomic configurations that are noticeably different from the fitted ones.

At the same time, the set of atomic configurations is usually limited to several thousand forces/energies, which is clearly not enough for sufficiently dense filling of the selected region of the configuration space. In such a case, it may well turn out, so even ideally fitted potential in MD simulation of a substance, say, with continuous compression, will quite often fall into the state regions of a substance where there is a shortage of adjustable atomic configurations. In these cases, the accuracy of the potential will fall sharply, and even non-physical/incorrect properties of the substance, such as a decrease in the rigidity of aluminum and nickel with compression, are not excluded, as indicated above in the case of Mishin potentials (with these compressions only a few adjustable points with small weights).

We have developed a new stress matching method [23]. This method aims to design EAM potentials specifically tuned for reliable reproduction of the behavior of materials in a wide range of pressures and temperatures. The basis for constructing a fitting database is the choice of atomic configurations of substances corresponding to the states that arise during continuous cold compression. Thus, the database is based on the ab initio equation of state of matter at absolute zero temperature, namely the cold pressure curve $P(V)$ under uniform compression/tension and components of the stress tensor (pressure tensor) under uniaxial crystal deformations along the main crystallographic axes. Such a choice of configurations for a fitting database ensures that the potential will correctly describe the mechanical response of a solid to various strains with large compressions/strains. Moreover, the smoothness of the potential function and the cold pressure tensor curves constructed on it ensures good agreement not only with points from the fitting database, but also between them along the entire smooth cold curve $P(V)$. Taking into account the fact that thermal energy and thermal pressure are small compared with the potential energy of the interaction of atoms and cold pressure in the dense condensed phase, it can be expected that the potential will also give a reasonable thermodynamic behavior of the substance up to temperatures close to critical. It must be said here that

ignoring the physical monotonicity condition for $P(V)$ under uniform or uniaxial compression is characteristic of most of the works on the development of interatomic potentials.

Thus, the inclusion of the cold pressure tensor $P(V)$ calculated by the DFT method in the fitting database is necessary for the development of interatomic interaction potentials, the use of which can provide the predictive power of MD modeling of highly compressed/stretched states of a condensed material.

The minimization of the stress deviation from the database is carried out by the combined search method, which includes the rolling polyhedron method (downhill simplex algorithm) [39] and the random walk method.

The found local minimum is disturbed by the vector of random displacement, from which the search for a new local minimum begins again. This process is repeated until the search finds deeper local minima in the allotted time. If the depth of the newly detected local minima does not increase for about an hour, the search stops. Then the procedure is repeated with new initial coefficients of an arbitrary non-pathological EAM potential. After several such attempts, the best potential among all is considered to be found and the search is completed. The sequential algorithm described above is actually implemented in our parallel search program, in which each processor independently searches for its best minimum, and the master processor compares them and keeps the best one. Using hundreds of CPUs, the program can scan multidimensional atom coordinate space in much more detail and find a better option than a sequential program in the allotted time. But even the use of parallel search does not guarantee finding a global minimum, the task of finding which is tremendously difficult. Fortunately, solving the global search problem is not our goal.

Examples of EAM potentials developed by the cold stress fitting method are presented on our page <https://www.researchgate.net/project/Development-of-interatomic-EAM-potentials>.

In this project we are going to develop a new potential for interatomic interaction of ruthenium using the described approach.

For the fitting base of cold stresses in ruthenium, the packages of quantum mechanical DFT (density functional theory) calculations of VASP, Abinit, Elk, etc. will be used.

H) Characteristics of laser irradiated silicon

Considering the calculation of electron heat conductivity in the framework of the first-principles methods with the Kubo-Greenwood formula, it should be noted that it is completely solved only in the case of such a simple metal as aluminum (D. V. Knyazev, Phys. Plasmas, 21 (073302), 2014). To this date, there are some works on the extension of this approach to other metals, including transition and noble, which have a lot of valence electrons that require a direct description in quantum mechanical calculations. In our case, we are talking about silicon, the electronic structure of which is not so much complicated in the sense of a number of valence electrons. The only problem that arises when describing semiconductors, in this case, is the strong deviation from the homogeneity of the electron gas due to the presence of directional bonds between silicon ions. However, a number of authors (R. Darkins et al, Phys. Rev. B. 98, 024304, 2018) have shown that a good description of the electron structure of silicon in the solid state can be achieved using hybrid functionals within the density functional theory.

Thus, the authors rely on the applicability of the discussed approach with respect to silicon. Calculations of heat conductivity by various approaches within the framework of the classical molecular dynamics method, such as the Green-Kubo approach, nonequilibrium molecular dynamics, were repeatedly performed for silicon, but only for some of its states, mainly for amorphous phases lying between 1300 and 1700 K. In this work the goal is to study the state of the liquid phase of silicon up to temperatures corresponding to the formation of a fluid, which experimental study is still difficult.

I) New approaches to calculations of the constant of electron-ion interaction in metals

Calculations of electron-phonon heat transfer in the Allen-Downer approach, as mentioned above, are carried out using the electron-phonon interaction constant defined in the equilibrium case and at ultra-low temperatures. Thus, the originality of the proposed calculations should be attributed to the conditions that are directly observed in the ultrashort laser irradiation: high electronic temperatures exceeding the temperature of the lattice / ions. The possibility of such calculations comes from the suggestion to use the density functional theory, which allows setting the electron temperature regardless of the lattice state. The correct determination of the phonon spectrum will require several tens of atoms in the computational cell described in periodic boundary conditions, which is quite consistent with the current performance of the existing supercomputers which has been constructed in Russia.

References for Section 4.5

- [1] M.E. Povarnitsyn, T.E. Itina, P.R. Levashov, and K.V. Khishchenko, Mechanisms of nanoparticle formation by ultra-short laser ablation of metals in liquid environment, Phys. Chem. Chem. Phys. V. 15, 3108-3114 (2013)
- [2] Cheng-Yu Shih, M.V. Shugaev, Chengping Wu, and L.V. Zhigilei, Generation of Subsurface Voids, Incubation Effect, and Formation of Nanoparticles in Short Pulse Laser Interactions with Bulk Metal Targets in Liquid: Molecular Dynamics Study, J.

Phys. Chem. C, vol. 121, 16549–16567, (2017)

[3] N. Inogamov, V. Zhakhovskiy, and V. Khokhlov, Laser ablation of metal into liquid: Near critical point phenomena and hydrodynamic instability, *AIP Conference Proceedings* V. 1979, 190001 (2018); <https://doi.org/10.1063/1.5045043> presented at: Shock Compression of Condensed Matter – 2017

[4] Cheng-Yu Shih, R. Streubel, J. Heberle, A. Letzel, M.V. Shugaev, Chengping Wu, M. Schmidt, B. Gökce, S. Barcikowski, and L.V. Zhigilei, Two mechanisms of nanoparticle generation in picosecond laser ablation in liquids: the origin of the bimodal size distribution, *Nanoscale*, v. 10, issue 15, pp. 6900-6910 (2018)

[5] N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, V.A. Khokhlov, Dynamics of gold ablation into water, *JETP* 127(1), 79-106 (2018)

[6] M. M. Barysheva, A. E. Pestov, N. N. Salashchenko, M. N. Toropov, N. I. Chkhalo, Precision imaging multilayer optics for soft X-rays and extreme ultraviolet bands, *Physics-Uspekhi*, 55, No 7, 681-699 (2012) DOI: 10.3367/UFNr.0182.201207c.0727

[7] B. Albertazzi, N. Ozaki, V. Zhakhovskiy, A. Faenov, H. Habara, M. Harmand, N. Hartley, D. Il'nitskiy, N. Inogamov, Y. Inubushi, T. Ishikawa, T. Katayama, T. Koyama, M. Koenig, A. Krygier, T. Matsuoka, S. Matsuyama, E. McBride, K. P. Migdal, G. Morard, H. Ohashi, T. Okuchi, T. Pikuz, N. Purevjav, O. Sakata, Y. Sano, T. Sato, T. Sekine, Y. Seto, K. Takahashi, K. Tanaka, Y. Tange, T. Togashi, K. Tono, Y. Umeda, T. Vinci, M. Yabashi, T. Yabuuchi, K. Yamauchi, H. Yumoto, R. Kodama, Dynamic fracture of tantalum under extreme tensile stress. *Science Advances* V. 3, e1602705 (2017)

[8] T.A. Pikuz, A.Ya. Faenov, N. Ozaki, N.J. Hartley, B. Albertazzi, T. Matsuoka, K. Takahashi, H. Habara, Y. Tange, S. Matsuyama, K. Yamauchi, R. Ochante, K. Sueda, O. Sakata, T. Sekine, T. Sato, Y. Umeda, Y. Inubushi, T. Yabuuchi, T. Togashi, T. Katayama, M. Yabashi, M. Harmand, G. Morard, M. Koenig, V.V. Zhakhovskiy, N.A. Inogamov, A. S. Safronova, A. Stafford, I. Yu. Skobelev, S. A. Pikuz, T. Okuchi, Y. Seto, K. A. Tanaka, T. Ishikawa, and R. Kodama, Indirect monitoring shot-to-shot shock waves strength reproducibility during pump–probe experiments, *Journal of Applied Physics* V. 120, 035901 (2016). doi: 10.1063/1.4958796

[9] A. Faenov, T. Pikuz, M. Ishino, N. Inogamov, V. Zhakhovskiy, I. Skobelev, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Kando, R. Kodama, T. Kawachi, "Soft x-ray laser ablation of metals and dielectrics", *Proc. SPIE* V. 10243, 102430S (2017) X-ray Lasers and Coherent X-ray Sources: Development and Applications, 102430S (May 17, 2017); doi:10.1117/12.2264966; <http://dx.doi.org/10.1117/12.2264966>

[10] I. A. Makhotkin, R. Sobierajski, J. Chalupský, K. Tiedtke, G. de Vries, M. Störmer, F. Scholze, F. Siewert, R. W. E. van de Kruijs, I. Milov, E. Louis, I. Jacyna, M. Jurek, D. Klinger, L. Nittler, Y. Syryanny, L. Juha, V. Hájková, V. Vozda, T. Burian, K. Saksl, B. Faatz, B. Keitel, E. Plönjes, S. Schreiber, S. Toleikis, R. Loch, M. Hermann, S. Strobel, H.-K. Nienhuys, G. Gwalt, T. Mey and H. Enkisch, Experimental study of EUV mirror radiation damage resistance under long-term free-electron laser exposures below the single-shot damage threshold, *J. Synchrotron Rad.* V. 25, 77-84 (2018). <https://doi.org/10.1107/S1600577517017362>; Igor A. Makhotkin, Igor Milov, Jaromir Chalupský, Kai Tiedtke, Hartmut Enkisch, Gosse de Vries, Frank Scholze, Frank Siewert, Jacobus M. Sturm, Konstantin V. Nikolaev, Robbert W. E. van de Kruijs, Mark A. Smithers, Henk A. G. M. van Wolferen, Enrico G. Keim, Eric Louis, Iwanna Jacyna, Marek Jurek, Dorota Klinger, Jerzy B. Pelka, Libor Juha, Věra Hájková, Vojtěch Vozda, Tomáš Burian, Karel Saksl, Bart Faatz, Barbara Keitel, Elke Plönjes, Siegfried Schreiber, Sven Toleikis, Rolf Loch, Martin Hermann, Sebastian Strobel, Riphon Donker, Tobias Mey, and Ryszard Sobierajski, Damage accumulation in thin ruthenium films induced by repetitive exposure to femtosecond XUV pulses below the single-shot ablation threshold, *Journal of the Optical Society of America B* Vol. 35, Issue 11, pp. 2799-2805 (2018) <https://doi.org/10.1364/JOSAB.35.002799>

[11] Igor Milov, Igor A. Makhotkin, Ryszard Sobierajski, Nikita Medvedev, Vladimir Lipp, Jaromir Chalupsky, Jacobus M. Sturm, Kai Tiedtke, Gosse de Vries, Michael Stormer, Frank Siewert, Robbert van de Kruijs, Eric Louis, Iwanna Jacyna, Marek Jurek, Libor Juha, Vera Hajkova, Vojtech Vozda, Tomas Burian, Karel Saksl, Bart Faatz, Barbara Keitel, Elke Plonjes, Siegfried Schreiber, Sven Toleikis, Rolf Loch, Martin Hermann, Sebastian Strobel, Han-Kwang Nienhuys, Grzegorz Gwalt, Tobias Mey, Hartmut Enkisch, and Fred Bijkerk, Mechanism of single-shot damage of Ru thin films irradiated by femtosecond extreme UV free-electron laser, *Optics Express* Vol. 26, Issue 15, pp. 19665-19685 (2018) <https://doi.org/10.1364/OE.26.019665>

[12] Igor Milov, Vladimir Lipp, Nikita Medvedev, Igor A. Makhotkin, Eric Louis, and Fred Bijkerk, Modeling of XUV-induced damage in Ru films: the role of model parameters, *Journal of the Optical Society of America B* Vol. 35, Issue 10, pp. B43-B53 (2018) <https://doi.org/10.1364/JOSAB.35.000B43>

[13] Nesma T. Aboulkhair, Nicola M. Everitt, Ian Ashcroft, Chris Tuck, Reducing porosity in ALSi10Mg parts processed by selective laser melting, *Additive Manufacturing Volumes 1–4*, 77-86 (2014) <https://doi.org/10.1016/j.addma.2014.08.001>

[14] Chu Lun Alex Leung, Sebastian Marussi, Robert C. Atwood, Michael Towrie, Philip J. Withers & Peter D. Lee, In situ X-ray imaging of defect and molten pool dynamics in laser additive manufacturing, *Nature Communications* V. 9 (1), 1355 (2018) <https://doi.org/10.1038/s41467-018-03734-7>

[15] Richard Martukanitz, Pan Michaleris, Todd Palmer, Tarasankar DebRoy, Zi-Kui Liu, Richard Otis, Tae Wook Heo, Long-Qing Chen, Toward an integrated computational system for describing the additive manufacturing process for metallic materials, *Additive Manufacturing*, V. 1, 52-63 (2014) <http://dx.doi.org/10.1016/j.addma.2014.09.002>

[16] D. S. Ivanov L. V. Zhigilei. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films, *Phys. Rev. B* 68, 064114 (2003). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.68.064114>

- [17] E. Leveugle, D. S. Ivanov, L. V. Zhigilei. Photomechanical spallation of molecular and metal targets: molecular dynamics study, *Appl. Phys. A* 79, 1643 (2004). <http://dx.doi.org/10.1007/s00339-004-2682-2>
- [18] E. M. Bringa, J. U. Cazamias, P. Erhart, J. Stolken, N. Tanushev, B. D. Wirth, R. E. Rudd, M. J. Caturla. Atomistic shock Hugoniot simulation of single-crystal copper, *J. Appl. Phys.* 96, 3793 (2004).
- [19] E. M. Bringa, K. Rosolankova, R. E. Rudd, B. A. Remington, J. S. Wark, M. Duchaineau, D. H. Kalantar, J. Hawreliak, J. Belak. Shock deformation of face-centred-cubic metals on subnanosecond timescales, *Nature Materials* 5, 805 (2006).
- [20] T. C. Germann, J. E. Hammerberg, B. L. Holian. Large-Scale Molecular Dynamics Simulations of Ejecta Formation in Copper, *AIP Conference Proceedings* 706, 285(2004).
- [21] K. Kadau, T. C. Germann, P. S. Lomdahl, B. L. Holian. Atomistic simulations of shock-induced transformations and their orientation dependence in bcc Fe single crystals, *Phys. Rev. B* 72, 064120 (2005).
- [22] K. Kadau, J. L. Barber, T. C. Germann, B. J. Alder. Scaling of atomistic fluid dynamics simulations, *Phys. Rev. E* 78, 045301 (2008). See also LANL report LA-UR-08-2605.
- [23] V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, S. I. Ashitkov, K. Nishihara. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials, *Appl. Surf. Sci.* 255, 9592 (2009). <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2009.04.082>
- [24] B. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, I. I. Oleynik. Ultrashort shock waves in nickel induced by femtosecond laser pulses, *Phys. Rev. B* 82, 064113 (2010). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.82.064113>
- [25] V. V. Zhakhovsky, M. M. Budzevich, I. I. Oleynik, C. T. White. Two-Zone Elastic-Plastic Single Shock Waves in Solids, *Phys. Rev. Lett.* 107, 135502 (2011). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.135502>
- [26] M. M. Budzevich, V. V. Zhakhovsky, C. T. White, I. I. Oleynik. Evolution of Shock-Induced Orientation-Dependent Metastable States in Crystalline Aluminum, *Phys. Rev. Lett.* 109, 125505 (2012). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.125505>
- [27] B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, I. I. Oleynik. Ultrashort shock waves in nickel induced by femtosecond laser pulses, *Phys. Rev. B* 87, 054109 1 (2013). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.87.054109>
- [28] M. S. Daw M. I. Baskes. Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals, *Phys. Rev. Lett.* 50, 1285 (1983). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.1285>
- [29] M. S. Daw, M. I. Baskes. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals, *Phys. Rev. B* 29, 6443 (1984). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>
- [30] M. W. Finnis J. E. Sinclair. A simple empirical N-body potential for transition metals, *Philos. Mag. A* 50, 45 (1985). <https://doi.org/10.1080/01418618408244210>
- [31] S. M. Foiles. Application of the embedded-atom method to liquid transition metals, *Phys. Rev. B* 32, 3409 (1985). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.32.3409>
- [32] A. F. Voter S. P. Chen. В сб.: High temperature ordered intermetallic alloys. MRS Symposia Proceedings No. 82 /Под ред. R. W. Siegel, J. R. Weertman, R. Sundan. Materials Research Society, Pittsburgh, (1987).
- [33] P. Hohenberg W. Kohn. Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.* 136, 864 (1964). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.864>
- [34] Y. Mishin, D. Farkas, M. J. Mehl, D. A. Papaconstantopoulos. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations, *Phys. Rev. B* 59, 3393 (1999).
- [35] M. Igarashi, M. Khantha, V. Vitek, "N-body interatomic potential for hexagonal close packed metals", *Phil. Mag. B*, 63, 603-627 (1991)
- [36] S. Chen, J. Xu, H. Zhang, A new scheme of many-body potentials for hcp metals, *Computational Materials Science*, 29, 428–436 (2004)
- [37] Y. Mishin. Interatomic potentials for metals. В сб.: Handbook of Materials Modeling /Под ред. S. Yip, volume 1. Springer, (2005).
- [38] F. Ercolessi, J. B. Adams. Interatomic potentials from first-principles calculations: the force-matching method, *Europhys. Lett.* 26, 583 (1994).
- [39] J. A. Nelder, R. Mead. A Simplex Method for Function Minimization, *Comp. J.* 7, 308 (1965). <https://doi.org/10.1093/comjnl/7.4.308>
- [40] R. A. Gingold, J. J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 181 (3) (1977) 375–389. <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/181.3.375>
- [41] A. N. Parshikov, S. A. Medin, Smoothed particle hydrodynamics using interparticle contact algorithms, *Journal of Computational Physics* 180 (1) (2002) 358 – 382. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2002.7099>
- [42] D. Zhang, C. Jiang, S. Li, A fast adaptive load balancing method for parallel particle-based simulations, *Simulation Modelling Practice and Theory* 17 (6) (2009) 1032 – 1042. <https://doi.org/10.1016/j.simpat.2009.03.003>
- [43] J. Cherfils, G. Pinon, E. Rivoalen, JOSEPHINE: A parallel SPH code for free-surface flows, *Computer Physics*

- Communications 183 (7) (2012) 1468– 1480. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.02.007>
- [44] F. Fleissner, P. Eberhard, Parallel load-balanced simulation for shortrange interaction particle methods with hierarchical particle grouping based on orthogonal recursive bisection, International Journal for Numerical Methods in Engineering 74 (4) (2008) 531– 553. <https://doi.org/10.1002/nme.2184>
- [45] V. Zhakhovskii, K. Nishihara, Y. Fukuda, S. Shimojo, T. Akiyama, S. Miyayama, H. Sone, H. Kobayashi, E. Ito, Y. Seo, M. Tamura, Y. Ueshima, A new dynamical domain decomposition method for parallel molecular dynamics simulation, in: CCGRID 2005. IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid, 2005., Vol. 2, 2005, pp. 848–854 Vol. 2. <https://doi.org/10.1109/CCGRID.2005.1558650>
- [46] N.A. Inogamov and V.V. Zhakhovsky, Surface 3D nanostructuring by tightly focused laser pulse: simulations by Lagrangian code and molecular dynamics, Journal of Physics Conference Series 681(1):012001 (2016) <https://doi.org/10.1088/1742-6596/681/1/012001>
- [47] S.A. Dyachkov, A.N. Parshikov, M.S. Egorova, S.Yu. Grigoryev, V.V. Zhakhovsky, and S.A. Medin, Explicit failure model for boron carbide ceramics under shock loading, Journal of Applied Physics V. 124, 085902 (2018); <https://doi.org/10.1063/1.5043418>
- [48] Samarskii A.A., Popov Yu.P., Difference methods for solving problems of gas dynamics /2nd revised and enlarged edition/(in Russian), Moscow, Nauka (1992)
- [49] S.I. Anisimov, B.L. Kapeliovich, T.L. Perelman, Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses, Sov. Phys. JETP V. 39(2), 375-377 (1974)
- [50] Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, K.P. Migdal, Thermal conductivity and the electron-ion heat transfer coefficient in condensed media with a strongly excited electron subsystem, JETP Lett., 97(1), 20-27 (2013)
- [51] A.V. Bushman, V.E. Fortov, G.I. Kanel, and A.L. Ni, Intense Dynamic Loading of Condensed Matter, Taylor & Francis Translation, London (1993), 295 p.
- [52] I. Lomonosov, Multi-phase equation of state for aluminum, Laser and Particle Beams V. 25(4), 567-584. [doi:10.1017/S0263034607000687](https://doi.org/10.1017/S0263034607000687)
- [53] K.V. Khishchenko, S.I. Tkachenko, P.R. Levashov, I.V. Lomonosov, and V.S. Vorobev, Metastable States of Liquid Tungsten Under Subsecond Wire Explosion, Int. J. Thermophys. V. 23, No. 5, 1359-1367 (2002)
- [54] <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/>
- [55] <http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>

4.6. Предлагаемые методы и подходы, общий план работы на весь срок выполнения проекта и ожидаемые результаты (объемом не менее 2 стр.; в том числе указываются ожидаемые конкретные результаты по годам; общий план дается с разбивкой по годам)

на русском языке

А) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазменных и лазерных ЭМ полей
Будет создана физическая модель, проведены аналитические и численные расчеты электромагнитных полей создаваемых лазером и поверхностными плазмон-поляритонными (ППП) модами. Будет подсчитана соответствующая неоднородная вдоль поверхности диссипация в скин-слое. ППП моды возбуждаются тем же лазерным импульсом на заранее созданной неоднородности поверхности металлической пленки. Будут промоделированы тепловые явления (расползание тепла за счет теплопроводности), плавление, гидродинамическое движение с учетом капиллярных сил (весьма существенных, как показывают оценки) и рекристаллизация в поверхностные структуры. Финальные застывшие поверхностные структуры будут сопоставлены с теми, которые наблюдались в опытах в работе [11], см. список литературы к п. 1.4 аннотация проекта.

Работа будет выполнена за 2019 и 2020 годы.

В 2019 г. будет объяснено формирование радиальной гофрировки на куполах, см. рис. 1 в приложенном п. 4.13 файле 1.

Б) Действие вихря пучков

Для решения проблемы будет использован весь арсенал приемов, кроме SPH моделирования. Потребуется и лагранжева гидродинамика, и молекулярная динамика с Монте-Карло аппаратом электронной теплопроводности, и модифицированная полуаналитическая модель динамики тонкой пленки с учетом поверхностного натяжения и давления испаренного вещества (про эту модель см. [10] в п. 1.4, ЖЭТФ, 2015).

Работа сложная, будет выполняться поэтапно за 2019-2021 годы.

В) Образование наночастиц при абляции в жидкость

На этом направлении будет проделана огромная работа.

Во-первых, предстоит инкорпорировать в расчетные программы детальные современные данные, относящиеся к

воде; на следующих этапах будут рассмотрены особенности, связанные с другими жидкостями. Данные по поводе будут охватывать широкий диапазон состояний жидкой (многочисленные твердые фазы воды исключены) воды от сжатий вдоль ударной адиабаты до давлений 20 ГПа (более высоких создать не удастся из-за низкого акустического импеданса воды) до разрежений до критического давления воды 220 бар и ниже до больших расширений и падения давления до сотых долей бара (из-за перерасширения пузырька). Будет создано подробное описание происходящего внутри двухфазной области воды.

Во-вторых, будут выполнены взаимодополняющие друг друга расчеты программами: (а) двухтемпературная гидродинамическая программа, (b) молекулярно-динамическая программа с учетом электронной теплопроводности металла и молекулярной теплопроводности воды и (с) SPH программа. Предстоит составить ясную общую картину происходящего на базе полученных расчетных данных. Будут получены представления о тепловом и динамическом взаимодействии испаренного слоя металла, в котором идет конденсация, с окружающей жидкостью, которая в свою очередь переходит из сверхкритического состояния с низкой сжимаемостью в докритическое состояние с большой сжимаемостью и начинает формировать пузырек. Будут учтены тонкие детали, которые следуют из молекулярной динамики – это кинетика испарения и конденсации, вариация поверхностного натяжения в условиях задачи, и диффузионные процессы. С помощью молекулярно-динамического и SPH моделирования будет понята роль неустойчивости Релея-Тейлора в разных условиях (вариация вложенной в мишень энергии и длительность импульса).

В-третьих, предстоит прояснить вопрос о переходе от одномерного плоского расширения к трехмерному сферическому расширению – формирование, развитие и торможение пузырька.

Пункты «во-первых» и «во-вторых» будут выполнены за первые два года исполнения проекта. Для исполнения последнего пункта, видимо, понадобится 2021-й год.

Г) Лазерная фрагментация жидких капель и струй

Будут продолжены исследования по капле олова. Предстоит заменить уравнение состояния Ми-Грюнайзена, применявшееся в работе [7] (см. литературу к п. 1.4), на табличное уравнение состояния – 2019 и 2020 гг.

Во взаимодействии с группой проф. С.А. Stan (Rutgers univ.), работающего на XFEL (x-ray free electron laser) LCLS (LINAC coherent laser source) и на других XFEL (FLASH DESY, SACLA RIKEN/HARIMA, префектура Hyogo), будет создана физическая модель и выполнено численное моделирование задачи о взаимодействии тонкого цилиндрического пучка жесткого рентгена с микрокаплей или микроструей воды. Потребуется модификация наших программ. Будут использованы все программы.

Двухтемпературная лагранжева гидродинамика потребуется для описания начальных стадий развития процесса вокруг цилиндрической струи. Молекулярно-динамическое моделирование и SPH код будут применены для описания средней и поздних стадий. На средней стадии ударная волна идет от тонкого цилиндра нагрева по средней части капли или струи. На заключительных стадиях картина становится очень сложной – косые ударные волны выходят на свободную поверхность и отражаются от нее. Это приводит к появлению сложных трехмерных волн разрежения, простейшим аналогом которых является волна Прандтля-Майера.

На работу потребуются 2019-2021 гг. В результате исследований будет получена полная картина сложнейшего процесса, схема которого и первые экспериментальные наблюдения приведены на рисунках 3 и 4 в приложенном п. 4.13 файле 1 соответственно.

Д) Абляция тугоплавких металлов

Катящийся многогранник в многомерном пространстве (это симплекс метод) в комбинации с Монте-Карло, производящим достаточно грубый шум, позволяет обойти многомерное пространство параметров, которые задают потенциал многочастичного взаимодействия, и найти сотни-тысячи локальных минимумов. Из этих минимумов отбирается наиболее глубокий. Так строится потенциал. Комбинация с Монте-Карло необходима, иначе симплекс закатится в ближайший, но, как правило, неглубокий минимум. Данная методика будет применена в 2019 г. для построения потенциала межатомного взаимодействия рутения. Методика работает вместе с квантово-механическими средствами (пакеты программ VASP, Abinit, Elk и др.) построения холодных кривых с учетом анизотропии кристалла (обычно по главным осям кристаллической ячейки) и с учетом с/а параметра ГПУ (гексагональной плотноупакованной) решетки, к которой относится кристалл рутения.

Далее межатомный потенциал будет применен для расчета прочности кристалла и расплава рутения в нашем диапазоне температур и темпов деформации методами молекулярной динамики. Данные о прочности, вместе с данными по теплопроводности и коэффициенту электрон-ионного взаимодействия и уравнением состояния, будут использованы при двухтемпературном гидродинамическом моделировании абляции рутения под действием лазерных импульсов (все ультракороткие) с разной энергией фотона ~1 эВ, 90 эВ, 7-12 кэВ.

Кроме того, межатомный потенциал рутения будет использован при молекулярно-динамическом моделировании абляции с полным учетом неоднородной геометрии - вспенивание расплава рутения после нуклеации зародышей паровой фазы в расплаве.

Результаты гидродинамических и молекулярно-динамических расчетов будут получены в 2019 г. Это позволит понять, что происходит при лазерном воздействии на рутений.

Е) Лазерное плавление порошков

Будут применены гидрокод в лагранжевых переменных, молекулярная динамика со скалированием и SPH код.

Одномерный гидрокод необходим для описания начальных и средних стадий поглощения лазерного излучения и распространения поглощённого тепла в толщу микрочастицы порошка. Длительность нагрева определяется диаметром лазерного пятна на поверхности (обычно порядка долей мм - мм) и скоростью сканирования луча вдоль поверхности (обычно 10-100 см/с). Коэффициент поглощения вычисляется по формулам Френеля с учетом угла падения. Также с помощью гидродинамического моделирования будет получена оценка динамической роли давления насыщенного пара нагреваемой металлической микрочастицы.

Важную роль сыграет молекулярно-динамическое моделирование с учетом (задействован аппарат Монте-Карло) высокой электронной теплопроводности в объеме металла и с применением аппарата масштабирования. Важность этой роли в том, что будут изучены свойства межчастичных контактов, «точек» соприкосновения. На самом деле это не точки, а небольшие площадки контакта. Их площадь меняется при частичной компактификации при сдавливании, при нагреве и при плавлении. Размер площадок исключительно важен для расчета перетока тепла из одной микрочастицы в другую.

С помощью молекулярно-динамического моделирования будет изучен процесс плавления микрочастицы, который стартует от освещенного участка поверхности. Важно правильно описать развитие процесса плавления по частице с учетом мезоскопического окружения из соседних частиц.

Будет применен SPH код для расчета тепловых и динамических эффектов в мезоскопическом ансамбле микрочастиц.

Работа велика по объему и сложная. За три года будет создана картина лазерного воздействия на порошки. Причем важнейшие общие представления будут получены в 2019 г.

Ж) Вычислительная физика, крупномасштабное высокопроизводительное численное моделирование

(1) По ходу всех предстоящих исследований будет модернизироваться гидродинамический код, модернизироваться под соответствующую конкретную задачу. Поэтому работы по коду будут выполняться в течение всего срока проекта.

(2) Молекулярная динамика – важный инструмент при решении задач А-Е, перечисленных выше. Каждый раз она будет подстроена под проблему. С помощью физической модели будут настроены параметры масштабирования в случаях, когда это требуется. Будет применяться в течение всего срока исполнения проекта.

(3) В 2019-2020 гг. в SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) код будет добавлена и протестирована часть, относящаяся к табличному уравнению состояния. Ясно, что это намного повысит охват физических задач SPH кодом. В настоящее время этот код используется с уравнением состояния в форме Ми-Грюнаизена. SPH – это весьма эффективный код при решении геометрически сложных задач с использованием многомиллионного числа частиц.

Код позволяет разобраться со сложнейшими проблемами, например, дробление частиц (см. [7] к п. 1.4 и кино, приложенное к данной публикации) или воздействие на порошки. Недостатком SPH кода является отсутствие описания плавления. Обычно плавление в SPH коде мимикрируется подсчетом температурного поля, при этом расплавом считается та часть материала, в котором температура превысила температуру плавления. С табличным уравнением состояния этот недостаток будет устранен – температура плавления будет зависеть от давления, появится переходная зона со смесью твердой и жидкой фаз и будет автоматически учтена скрытая теплота плавления. Такой является ситуация при моделировании лагранжевым гидрокодом.

К 2021 году будет окончена работа над программой, которая позволит включить в SPH поверхностное натяжение. Это безусловно подымет на новый уровень возможности программы.

(4, 5) Код симплекс плюс Монте-Карло использовался нами ранее. В 2019 г. этот код вместе DFT программами вычислений будет использован для создания, во-первых, межатомного потенциала взаимодействия в рутении и, во-вторых, для построения двухтемпературного состояния рутения.

(6) Коды из готовых пакетов COMSOL Multiphysics© и LS-DYNA будут приспособлены для решения задач А, Б.

Результаты будут получены в 2019 г.

(7) Во всех задачах, перечисленных выше, будет использоваться комбинированный подход. Как говорилось, этот подход заключается в применении двух или более кодов для решения одной проблемы. Это делается либо для проверки и уточнений. Либо задача сложная, она разбивается на участки во времени (начальная и последующие стадии) и/или пространстве (приповерхностная зона и объем), на которых на одном участке применяется один код, а на другом – другой. При этом результаты работы одного кода инкорпорируются в другой код (гибриды).

З) Характеристики кремния, облученного лазером

Для исследования кремния будет задействован весь набор современных методов расчёта теплопроводности в рамках квантовой и классической молекулярной динамики: формула Кубо-Гринвуда (Грина-Кубо в классическом случае) как элемент теории, связывающей кинетические коэффициенты рассматриваемой системы с корреляторами скоростей и

потоков. В случае квантовой молекулярной динамики базис электронных волновых функций будет рассматриваться с помощью метода спроецированных присоединенных волн (PAW), для описания лежащих ниже по энергии электронных состояний, чем валентные будут использованы хорошо апробированные в литературе библиотеки псевдопотенциалов, входящие в состав вычислительного пакета VASP.

И) Новые подходы к расчетам коэффициента электрон-ионного взаимодействия в металлах

Рассмотрение электрон-фононного теплообмена будет проводиться с помощью квантовых расчетов методом функционала плотности с применением упомянутых выше подходов с помощью вычислительных пакета VASP, а также ABINIT и Elk. В последнем случае будет проведен расчёт электронного спектра и тензора силовых постоянных в полноэлектронном базисе для тех случаев, когда переход от валентных электронов к более низко лежащим по энергии является размытым в силу наличия полувалентных состояний, как это происходит в ряде переходных металлов. Также будет использован подход эффективного силового поля, позволяющий в рамках классической молекулярной динамики описать взаимодействие полуклассических электронов и ионов, не прибегая к моделям электронного желе, таким, как, в частности, метод погруженного атома.

Подведем итоги сказанного.

А) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазменных и лазерных ЭМ полей

Работа по сочетанию плазмоники и термо-гидродинамики будет выполнена за 2019 и 2020 годы. В 2019 г. будет объяснено формирование радиальной гофрировки на куполах, см. рис. 1 в приложенном п. 4.13 файле 1.

Б) Действие вихревых пучков

Работа сложная, будет выполняться поэтапно за 2019-2021 годы. Важные результаты будут получены уже в 2019 г.

В) Образование наночастиц при абляции в жидкость

Основные результаты будут получены за первые два года исполнения проекта. Чтобы получить описание сферизации течения расширения понадобятся все три года работы над проектом.

Г) Лазерная фрагментация жидких капель и струй

Перевод SPH на табличное уравнение состояния – 2019 и 2020 гг. Полное описание задачи с воздействием жесткого рентгеновского пучка LCLS на микрокаплю/струю займет все три года работы над проектом.

Д) Абляция тугоплавких металлов

Планируется окончить и представить практические рекомендации по рентгеновским зеркалам за 2019 г. За этот же период подготовить статьи.

Е) Лазерное плавление порошков

Работа велика по объему и сложная. За три года будет создана картина лазерного воздействия на порошки. Причем важнейшие общие представления будут получены в 2019 г.

Ж) Вычислительная физика, крупномасштабное высокопроизводительное численное моделирование

Все годы работы над проектом будут сопровождаться модернизацией вычислительных алгоритмов.

З, И) Эти проблемы будут решены за 2019 и 2020 гг.

на английском языке

A) Spatially distributed heating due to a combination of plasmon and laser EM fields.

A physical model will be created, analytical and numerical calculations of the electromagnetic fields produced by the laser and surface plasmon-polariton (SPP) modes will be carried out. The corresponding inhomogeneous dissipation along the surface in the skin layer will be calculated. The SPP modes are excited by the same laser pulse on a previously created inhomogeneity of the surface of the metal film. Thermal phenomena (heat spreading due to thermal conductivity), melting, hydrodynamic motion taking into account capillary forces (which are quite significant, as estimates show) and recrystallization into surface structures will be simulated. The final frozen surface structures will be compared with those that were observed in the experiments in [11], see the references to section 1.4 of the abstract of the project.

Work will be performed for 2019 and 2020.

In 2019, the formation of radial corrugation on the domes will be explained, see fig. 1 in the attached file 4.13 file 1.

B) Action of vortex beams

To solve the problem, the whole arsenal of techniques will be used, except for SPH modeling. Lagrangian hydrodynamics, molecular dynamics with a Monte-Carlo electronic thermal conductivity technics, and a modified semi-analytical model of thin film dynamics taking into account the surface tension and pressure of the evaporated substance will be required (for this model, see [10] in section 1.4, JETP, 2015).

The work is complex, it will be carried out in stages for 2019-2021.

C) The formation of nanoparticles during ablation into a liquid.

A lot of work will be done in this direction.

Firstly, it is necessary to incorporate detailed up-to-date data related to water into the computational programs; in the following steps, features related to other liquids will be considered. Water data will cover a wide range of liquid states (numerous solid water phases are excluded) of water from compressions along the shock adiabat to pressures of 20 GPa (higher levels cannot be created due to low acoustic impedance of water) to negative pressures upto a critical water pressure of 220 bar and below to large expansions and pressure drops to hundredths of a bar (due to over-expansion of the bubble). A detailed description will be created of what is happening inside the two-phase water region.

Secondly, mutually complementary calculations by the next programs will be performed: (a) a two-temperature hydrodynamic program, (b) a molecular dynamics program taking into account the electronic thermal conductivity of the metal and the molecular thermal conductivity of water and (c) an SPH program. It is necessary to draw up a clear general picture of what is happening on the basis of the obtained calculated data. The picture of the thermal and dynamic interaction of the evaporated metal layer, in which condensation takes place, with the surrounding liquid, which in turn changes from a supercritical state with low compressibility to a subcritical state with high compressibility and begins to form a bubble. Subtle details that follow from molecular dynamics will be taken into account - this is the kinetics of evaporation and condensation, variation of surface tension under the conditions of the problem, and diffusion processes. With the help of molecular dynamics and SPH modeling, the role of the Rayleigh – Taylor instability under different conditions (variation of the energy deposited on the target and the pulse duration) will be understood.

Thirdly, it is necessary to clarify the question of the transition from one-dimensional flat expansion to three-dimensional spherical expansion - the formation, development and inhibition of a bubble.

Sections “firstly” and “secondly” will be completed in the first two years of the project. For the execution of the last section (“thirdly”) apparently, it will take the 2021st year.

D) Laser fragmentation of liquid droplets and jets

Research will be continued on a drop of tin. It is necessary to replace the equation of state of Mie-Grüneisen used in [7] (see the literature for section 1.4) with the tabular equation of state - 2019 and 2020.

In collaboration with the group of prof. C.A. Stan (Rutgers univ.), working on XFEL (x-ray free electron laser) LCLS (LINAC coherent laser source) and other XFEL (FLASH DESY, SACLA RIKEN / HARIMA, Hyogo prefecture, Japan), a physical model will be created and numerical simulation of a problem of the interaction of a thin cylindrical hard X-ray beam with a microdrop or microjet of water will be carried out. Modification of our programs is required. All programs will be used.

Two-temperature Lagrangian hydrodynamics will be required to describe the initial stages of the development of a process around a cylindrical jet. Molecular dynamics modeling and SPH code will be applied to describe the middle and late stages. At the middle stage, the shock wave comes from a thin heating cylinder in the middle part of a drop or jet. At the final stages, the picture becomes very complex - oblique shock waves reach the free surface and are reflected from it. This leads to the appearance of complex three-dimensional rarefaction waves, the simplest analogue of which is the Prandtl-Meyer wave.

The work will require 2019-2021 years. As a result of the research, a complete picture of the most complex process will be obtained, the scheme of which and the first experimental observations are shown in Figures 3 and 4 in the attached file 4.13 file 1, respectively.

E) Ablation of refractory metals.

A rolling polyhedron in multidimensional space (this is a simplex method) in combination with Monte Carlo, which produces fairly coarse noise, allows us to bypass the multidimensional parameter space that defines the potential of multiparticle interaction and find hundreds or thousands of local minima. From these minima is selected the most profound. So potential is built. The combination with Monte-Carlo is necessary, otherwise the simplex will roll into the nearest, but, as a rule, shallow minimum. This technique will be applied in 2019 to build the potential of interatomic interaction of ruthenium. The technique works together with quantum-mechanical means (VASP, Abinit, Elk, etc. software packages) for constructing cold curves taking into account the anisotropy of the crystal (usually along the main axes of the crystal cell) and taking into account the c/a parameter of the hcp (hexagonal close-packed) lattice, which includes ruthenium crystal.

Further, the interatomic potential will be applied to calculate the strength of the crystal and the ruthenium melt in our temperature and strain rate range using molecular dynamics methods. The strength data, together with the data on thermal conductivity and the coefficient of electron-ion interaction and the equation of state, will be used in two-temperature hydrodynamic modeling of ruthenium ablation under the action of laser pulses (all ultrashort) with different photon energies of ~ 1 eV, 90 eV, 7-12 keV.

In addition, the interatomic potential of ruthenium will be used in molecular-dynamic modeling of ablation with full consideration of non-one-dimensional geometry – foaming of the ruthenium melt after nucleation of the nuclei of the vapor phase in the melt.

The results of hydrodynamic and molecular dynamics calculations will be obtained in 2019. This will make it possible to understand what happens during laser irradiation of ruthenium.

F) Laser melting of powders

A hydrodynamical code in Lagrangian variables, molecular dynamics with scaling, and an SPH code will be applied.

A one-dimensional hydrodynamical code is needed to describe the initial and middle stages of absorption of laser radiation and the propagation of absorbed heat in the thickness of the powder microparticle. The duration of heating is determined by the diameter of the laser spot on the surface (usually of the order of fractions of mm - mm) and the speed of scanning the beam along the surface (usually 10-100 cm / s). The absorption coefficient is calculated using the Fresnel formulas, taking into account the angle of incidence. Also, using hydrodynamic modeling, an estimate of the dynamic role of the saturated vapor pressure of the heated metal microparticle will be obtained.

An important role will be played by molecular dynamics simulation taking into account (the Monte-Carlo technics is involved) high electronic thermal conductivity in the bulk of the metal and using a scaling technics. The importance of this role is that the properties of interparticle contacts, "points" of contact, will be studied. In fact, these are not points, but small contact areas. Their area changes at partial compactification upon compression, upon heating, and upon melting. The size of the plots is extremely important for calculating the transfer of heat from one microparticle to another.

With the help of molecular dynamics simulation, the process of melting the microparticle, which starts from the illuminated surface area, will be studied. It is important to correctly describe the development of the melting process on the particle, taking into account the mesoscopic environment of neighboring particles.

The SPH code will be applied to calculate the thermal and dynamic effects in the mesoscopic ensemble of microparticles.

The work is great in scope and complex. For three years, a pattern of laser action on powders will be created. And the most important general pattern will be received in 2019.

G) Computational physics, large-scale high-performance numerical simulation.

(1) In the course of all forthcoming studies, the hydrodynamic code will be modernized for the corresponding specific task. Therefore, work on the code will be carried out throughout the whole time of the project.

(2) Molecular dynamics is an important tool in solving problems A – F listed above. Each time it will be adjusted to the problem. Using the physical model, the scaling parameters will be configured when required. Molecular dynamics will apply for the duration of the project.

(3) In the years 2019-2020 the part relating to the tabular equation of state will be added in SPH code (Smoothed Particle Hydrodynamics) and will be tested. It is clear that this will greatly increase the coverage of physical tasks with SPH code. This code is currently used with the equation of state in the form of Mie-Grüneisen. SPH is a very effective code when solving geometrically complex problems using a multimillion number of particles.

The code allows one to deal with the most complicated problems, for example, particle crushing (see [7] to section 1.4 and the move attached to this publication) or the effect on powders. The disadvantage of an SPH code is the lack of a melting description. Usually, melting in the SPH code is mimicked by calculating the temperature field, while the melt is the part of the material in which the temperature has exceeded the melting point. With a tabular equation of state, this disadvantage will be eliminated - the melting point will depend on pressure, a transition zone with a mixture of solid and liquid phases will appear and the latent heat of melting will be automatically taken into account. Such is the situation when simulation is made by a Lagrangian hydrocode.

By 2021, work will be completed on a program that will allow surface tension to be included in SPH. This will certainly raise the capabilities of the program to a new level.

(4, 5) The simplex plus Monte Carlo code was used by us earlier. In 2019, this code together with the DFT computation programs will be used to create, firstly, the interatomic interaction potential in ruthenium and, secondly, to construct a two-temperature state of ruthenium.

(6) Codes from ready-made COMSOL Multiphysics © and LS-DYNA packages will be adapted for solving problems A, B. Results will be obtained in 2019.

(7) In all the tasks listed above, a combined approach will be used. As mentioned, this approach is to use two or more codes to solve one problem. This is done either for verification and clarification. Either the task is complicated, it is divided into sections in time (initial and subsequent stages) and/or space (near-surface zone and volume), in which one code is used in one area and in another area - another code. At the same time, the results of the work of one code are incorporated into another code (hybrids).

H) Characteristics of silicon irradiated by laser.

For the study of silicon, the whole set of modern methods for calculating thermal conductivity in the framework of quantum and classical molecular dynamics will be used: the Kubo-Greenwood formula (Green-Kubo in the classical case) as an element of the theory that relates the kinetic coefficients of the system under consideration with the correlators of speeds and fluxes. In the case of quantum molecular dynamics, the basis of the electronic wave functions will be considered using the projected augmented wave method (PAW); to describe the lower electron states, than the valence, the pseudopotentials libraries that are included in the VASP computation package will be used.

I) New approaches to the calculation of the coefficient of electron-ion interaction in metals

Consideration of electron-phonon heat transfer will be carried out using quantum calculations using the density functional method using the approaches mentioned above using the computational package VASP, as well as ABINIT and Elk. In the latter case, the electron spectrum and the force constant tensor will be calculated in the full electron basis for cases where the transition from valence electrons to lower ones in energy is blurred due to the presence of semi-valent states, as happens in some transition metals. An effective force field approach will also be used, which allows, within the framework of classical molecular dynamics, to describe the interaction of semiclassical electrons and ions, without resorting to e-jelly models, such as, in particular, the embedded atom method.

Let's sum up what was said.

A) Spatially distributed heating due to a combination of plasmon and laser EM fields.

Work on the combination of plasmonics and thermo-hydrodynamics will be performed for 2019 and 2020. In 2019, the formation of radial corrugation on the domes will be explained, see fig. one.

B) Action of vortex beams.

The work is complex, it will be carried out in stages for 2019-2021. Important results will be obtained as early as 2019.

C) The formation of nanoparticles during ablation into a liquid.

The main results will be obtained in the first two years of the project. To obtain a description of the spherization of the expansion flow, all three years of work on the project will be needed.

D) Laser fragmentation of liquid droplets and jets.

Translation of SPH to the tabular equation of state - 2019 and 2020 A full description of the problem with the action of the hard LCLS X-ray beam on the micro-droplet / jet will take all three years of work on the project.

E) Ablation of refractory metals.

It is planned to complete and present practical recommendations on X-ray mirrors for 2019. For the same period, to prepare articles.

F) Laser melting of powders.

The work is great in scope and complex. For three years, a pattern of laser effects on powders will be created. And the most important general pattern will be received in 2019.

G) Computational physics, large-scale high-performance numerical simulation.

All the years of work on the project will be accompanied by the modernization of computational algorithms.

H, I) These problems will be solved in 2019 and 2020.

4.7. Имеющийся у научного коллектива научный задел по проекту (указываются полученные ранее результаты, разработанные программы и методы)

Научный коллектив, созданный для работ по проекту, имеет большой опыт исследований взаимодействия лазерного излучения с веществом. Уже в широко цитируемой работе [1] была заложена основа физики взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с веществом в конденсированном состоянии. Важнейшие черты такого взаимодействия широко освещены в масштабных обзорах [2,3]. Диапазон исследований научного коллектива охватывает лазерное излучение широкого спектра частот - от инфракрасного и оптического [4-8] до ультрафиолета и жесткого рентгена [9-11], а также различные мишени конденсированного вещества - металлы [12], диэлектрики [13], твердые тела, жидкости [14] и различные длительности импульса, см., например, недавнюю работу [6], 2-я ссылка в списке литературы к п. 1.4.

С помощью наших работ [7] (литература к п. 4.1) объяснены первоначально казавшиеся загадочными наблюдения колец Ньютона с переменным во времени числом колец [6] (литература к п. 4.1).

В нашем научном коллективе разработаны теоретические модели взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с металлами, абляции как объемных мишеней [15], так и тонких пленок металлов [16] под действием таких импульсов: см. ссылки в п. 1.4 под номером [1]. К этим статьям приложены дополнительные иллюстрации в виде фильмов Au-220, Au-225, Au-226 на сайте <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/index.html>. В этих фильмах показано, как нетривиально протекает эволюция пленок после остросфокусированного ультракороткого воздействия (плавление - отскок от подложки - торможение за счет поверхностного натяжения - начало рекристаллизации - формирование струи - продолжение затвердевания).

Ведется работа по анализу действия более длительных субнаносекундных [17] и наносекундных лазерных импульсов на сложные мишени (пленки, ламинаты, порошки). Изучается воздействие на жидкие микрокапли, см. фильм SV.mp4 на сайте <http://laser.itp.ac.ru/RNF2019/index.html>. Это фильм про фрагментацию микрокапли олова в источнике коротковолнового излучения для фотолитографических машин будущего. Фильм относится (иллюстрирует) к статье [7], см. список ссылок к п. 1.4.

В работах по изучению абляции объемных мишеней под действием ультракоротких лазерных импульсов выполнено молекулярно-динамическое моделирование процесса разлета нагретого лазерным импульсом алюминия с межатомным потенциалом взаимодействия, учитывающим многочастичные эффекты. Получена картина абляции с образованием откольной жидкой части мишени, заполненной двухфазной пеной из жидкости и пара [18-20].

В работах, проведенных научным коллективом, рассмотрено взаимодействие фемтосекундных лазерных импульсов с тонкими (толщиной от 60-100 нм до нескольких микрон) плоскими металлическими пленками (использовалось золото) на диэлектрической подложке (плавленый кварц), см. [1,10] – литература к п. 1.4. Изучена абляция таких мишеней в результате действия лазерных импульсов с длительностью 30-300 фс. Тепловые и механические свойства этих мишеней качественно отличаются от поведения объемных мишеней и от свободно висящих пленок, здесь подложка работает как теплоизолирующая стенка, замедляя охлаждение металла за счет теплопроводности в сравнении с ситуацией объемной мишени. В то же время гидромеханическое взаимодействие пленки с кварцем меняет ситуацию по сравнению со случаем свободно висящей пленки.

Применен комбинированный подход, объединяющий двухтемпературную гидродинамику и молекулярно-динамическое моделирование. Впервые представлены описания возможных режимов динамики системы металлическая пленка/кварц. Осуществление тех или иных режимов зависит от величины поверхностной плотности поглощенной энергии (поглощенного флюенса), см. [1,10] – литература к п. 1.4. Найдено два порога по поглощенному флюенсу и три режима движения по сравнению с одним у свободно висящей пленки. Существует колебательный режим, при котором пленка осциллирует, оставаясь на подложке при значениях поглощенного флюенса, не превышающих меньшего порога. При флюенсе в интервале между двумя пороговыми значениями металлическая пленка отрывается от подложки, потому что отрицательное давление преодолевает силу сцепления контакта пленка-подложка. Для значений флюенса, превышающих больший из порогов, происходит разрыв внутри пленки и абляция мишени в виде откола конденсированного фрагмента мишени до отрыва металла от диэлектрической подложки [21,22].

Исследовано образование поверхностных наноструктур как результат абляции [23-25] при действии ультракороткого лазерного излучения на металлические пленки. Изучена динамика тонкой пленки золота на стеклянной подложке, вызванная быстрым нагревом с использованием субпикосекундным лазерным импульсом. Волны давления, генерируемые таким нагревом, могут привести к отслаиванию пленки и ее отлету от подложки. Из-за неоднородности нагрева поверхности пленки в радиальном направлении лазерного пятна распределение скоростей в веществе пленки, улетающий от подложки, имеет максимум в центре пятна, и отделяющаяся пленка имеет куполообразную форму, раздувающуюся со временем (инфляционная стадия). Объем полости между пленкой и подложкой увеличивается во время инфляции, продолжающейся от нескольких до нескольких десятков наносекунд. Типичные скорости полета находятся в диапазоне 30-200 м / с. Капиллярные силы, действующие вдоль летящей пленки, замедляют инфляцию купола и приводят к сосредоточению вещества купола вдоль его оси. Это приводит к образованию осевой струи и капли на ее конце, рекристаллизация которых приводит к появлению характерных наноструктур на поверхности.

Проведен большой комплекс работ по изучению возникновения и распространения сверхкоротких упругих и пластических ударных волн в лазерных мишенях под действием ультракоротких импульсов излучения. Обнаружено существование сверхкоротких упругих волн при давлениях, значительно превышающих предел упругости [26,27], относящийся к волнам, бегущим по образцам толщиной 100 мкм – 1 мм.

Открыт новый режим распространения ударных волн, характеризующийся двухзонной упруго-пластической структурой, состоящей из упругого фронта и следующего за ним пластического фронта, движущихся с одинаковой средней скоростью, и имеющей фиксированную эффективную толщину, достигающую до микронных масштабов [28]. При этом вещество в упругой зоне находится в метастабильном состоянии при давлении, которое может существенно превышать обычно принимаемые значения для динамического предела текучести [28,29].

Работа [26] и работа наших коллег экспериментаторов из ОИВТ РАН (Ашитков и др.) опередили американские статьи, посвященные тому же эффекту: Whitley et al. на 4 месяца и на год статью в PRL Джонатана и Майка с соавторами: V.H. Whitley et al., The elastic-plastic response of aluminum films to ultrafast laser-generated shocks, JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 109, 013505 (2011)

Jonathan Crowhurst, Michael R. Armstrong et al., Invariance of the Dissipative Action at Ultrahigh Strain Rates Above the Strong Shock Threshold, PRL 107, 144302 (2011)

S. I. Ashitkov, M. B. Agranat, G. I. Kanel', P. S. Komarov, and V. E. Fortov, Behavior of Aluminum near an Ultimate Theoretical Strength in Experiments with Femtosecond Laser Pulses, JETP Letters, 2010, Vol. 92, No. 8, pp. 516-520.

Выполнены исследования полиморфных превращений в металлах под действием ударных волн [30,31]. Рассмотрены полиморфные превращения альфа-фазы (объемно-центрированная кубическая структура) в эпсилон-фазу (гексагональная плотноупакованная структура) в железе в условиях ультракоротких нагрузок. Молекулярно-динамическое моделирование показывает, что в ориентированных в направлениях [110] и [111] пленках кристаллического железа альфа-эпсилон полиморфное превращение в рассматриваемых экспериментальных условиях

может произойти только на первых 100-200 нм толщины пленки, где давление в ударной волне превышает 30 ГПа. А в монокристаллическом железе с ориентацией [100] полиморфный переход легко осуществляется под действием упругих ударных волн с давлением, превышающим 23 ГПа. Переход не связан с динамикой дислокаций и является обратимым в разгрузочной части ударной волны, где он начинается с давлений 23 ГПа. Для других ориентаций кристалла обратный эпсилон-альфа переход начинается при давлениях порядка 13 ГПа в хвосте разгрузки. Молекулярно-динамические расчеты выполнены с применением межатомного потенциала железа в методе погруженного атома, учитывающего многочастичные эффекты межатомного взаимодействия в металлах, в котором параметры подбирались в квантово-механических расчетах теории функционала плотности с учетом специфики одноосной деформации.

Помимо теоретических моделей в коллективе разработаны эффективные вычислительные методы и созданы высокопроизводительные программы для численных расчетов и компьютерного моделирования задач взаимодействия лазерного излучения с веществом. Разработан лагранжевый одномерный (а также для радиального движения при сферической и цилиндрической симметрии) гидродинамический код для вещества, подвергнутого воздействию лазерного импульса, с учетом неравновесного двухтемпературного состояния, обмена энергией между электронами и ионами, широкодиапазонного двухтемпературного уравнения состояния, изменения фазового состояния вещества, электронной теплопроводности. Этот гидродинамический код используется в том числе и для расчета начальных условий для последующего молекулярно-динамического моделирования [4,8,10,11,13-15,17,21,22,24,25,27].

В коллективе созданы высокоэффективные программы для молекулярно-динамических расчетов, основанные на параллельных вычислениях и позволяющие доводить число частиц, участвующих в моделировании, до нескольких сотен миллионов. Применение разработанной в коллективе методики скейлинга по капиллярному и тепловому безразмерным параметрам позволяет существенно расширить пространственные и временные пределы для молекулярно-динамического моделирования [4,5,7,8,10-31].

В коллективе имеется большой опыт получения на основе расчетов по теории функционала плотности межатомных потенциалов взаимодействия как для металлов, так и неметаллических веществ. В модели «погруженного атома» получены многочастичные потенциалы взаимодействия в таких металлах, как алюминий, золото, олово, адекватно описывающие межатомное взаимодействие в этих металлах в широком диапазоне плотности [5,14-16,28,32]. Теория функционала плотности и основанные на ней программы расчета электронного спектра, электронных термодинамических функций, квантовая молекулярная динамика для движения атомов со их взаимодействием по теории функционала плотности широко использовались в коллективе участников проекта.

В пакетах программ VASP, Abinit, Elk получены электронные энергетические зоны как простых металлов (алюминия, олова), так и переходных (золота, меди, тантала, никеля), рассчитаны их электронные термодинамические функции [33,34]. Применением квантовой молекулярной динамики рассчитан коэффициент электронной теплопроводности меди в жидком состоянии в широких пределах по плотности и электронной температуре [35]

Разработанные в коллективе методы расчета кинетических коэффициентов вещества в двухтемпературном состоянии, таких, как коэффициент электронной теплопроводности и коэффициент электрон-ионного теплообмена, и созданные для их нахождения вычислительные программы имеют важное значение при численном гидродинамическом и молекулярно-динамическом моделировании абляции под действием лазерного излучения. Коэффициент электронной теплопроводности металлов, как простых, так и переходных, получен в приближении кинетического уравнения [36-40]

Рассчитан коэффициент электрон-ионного теплообмена как металлов [38-40], так и ионных диэлектрических кристаллов, таких, как LiF [11].

К числу важных вычислительных программ относятся гидродинамический SPH-код (Smoothed Particles Hydrodynamics), позволяющий производить двух- и трехмерные гидродинамические расчеты [41], а также комплекс программ для проведения численных электродинамических расчетов [42].

У группы имеется значительный опыт в области расчётов электронной теплопроводности металлов в двухтемпературном состоянии (Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, K. P. Migdal, JETP Letters, 97, 27, 2013; Migdal K. P. et al, App. Phys. A, 122(4), 408, 2016; Yu. V. Petrov et al, JETP Letters, 104, 431, 2016), где применялись как аналитический подход на основе решения кинетического уравнения Больцмана в приближении релаксации для горячих электронов с предложенным авторами двухпараболическим законом дисперсии, так и формула Кубо-Гринвуда в сочетании с квантовым молекулярно-динамическим описанием расплава меди. Результаты двух подходов оказались в качественном согласии. Сравнение разных первопринципных расчётов с аналитическими данными позволило высказать идею о ограниченной точности описания электрон-электронного взаимодействия горячих электронов при использовании метода функционала плотности (Migdal K. P. et al, App. Phys. A, 122(4), 408, 2016, Migdal K. P. et al, J. Phys.: Conf. Ser. 774, 012103, 2016). Сравнение данных менее емкого в вычислительном отношении аналитического подхода, проведенное как для алюминия со сторонними работами (D. V. Knyazev, P. R. Levashov, Phys. Plasmas, 21, 073302, 2014, G. Norman et al,

Contrib. Plasma Phys. 53(4-5), 300, 2013), так и для меди показывает удовлетворительное согласие результатов в области температур выше 10 000 - 20 000 К.

Исследование электрон-фононного теплообмена в металлах являлось одной из наиболее актуальных задач группы в течение последних шести лет (Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, K. P. Migdal, JETP Letters, 97, 27, 2013; K. P. Migdal, Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, Proc. SPIE, 9065, 90653, 2013; N. A. Inogamov et al, Contrib. Plasma Phys. 53(10), 796, 2013, K. P. Migdal et al, J. Phys.: Conf. Ser. 653, 012086, 2015; Migdal K. P. et al, App. Phys. A, 122(4), 408, 2016). Накоплены данные, позволяющие описать ряд металлов, включая простые, переходные и благородные в интервале электронных температур до 50 000 К. Также рассмотрен эффект гидростатического сжатия/растяжения, достигающийся за счёт действия сил электронного давления в финале двухтемпературной стадии. Сравнение с иными моделями, среди которых упомянутая модель Аллена-Даунера, показывает в целом хорошее согласие полученных авторами данных для тех металлов, где имеется совместно результаты исследований, полученных несколькими методами.

Теоретические исследования и численное моделирование проводятся в тесном сотрудничестве с известными экспериментальными группами.

Такое сотрудничество ведется с ОИВТ РАН (отдел лазерной плазмы под рук. д. ф.-м.н. М.Б. Аграната):

проведено исследование динамики расплава алюминия, образующегося под воздействием фемтосекундных лазерных импульсов

(Inogamov, N. A., Zhakhovsky, V. V., Ashitkov, S. I., Agranat, M. B., Komarov, P. S., Khokhlov, V. A. & Shepelev, V. V. Pump-Probe Method for Measurement of Thickness of Molten Layer Produced by Ultrashort Laser Pulse AIP Conf. Proc. 1278, 590 (2010)) ;

М.Б. Агранат, С.И. Анисимов, С.И. Ашитков, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, П.С. Комаров, А.В. Овчинников, В.Е. Фортов, В.А. Хохлов, В.В. Шепелев, Прочностные свойства расплава алюминия в условиях экстремально высоких темпов растяжения при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов, Письма в ЖЭТФ, 91 (9), 517-523 (2010) [M. B. Agranat, S.I. Anisimov, S.I. Ashitkov, V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, P.S. Komarov, A.V. Ovchinnikov, V.E. Fortov, V.A. Khokhlov, V.V. Shepelev, Strength properties of an aluminum melt at extremely high tension rates under the action of femtosecond laser pulses, JETP Lett. 91 (9), 471-477 (2010)],

изучено образование нанополостей внутри алюминиевой мишени при интенсивности лазерного излучения, меньшей порога абляции

(С.И. Ашитков, Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, Ю.Н. Эмиров, М.Б. Агранат, И.И. Олейник, С.И. Анисимов, В.Е. Фортов, Образование нанополостей в поверхностном слое алюминиевой мишени при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов, Письма в ЖЭТФ, 95 (4), 192-197 (2012) [S.I. Ashitkov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, Yu.N. Emirov, M.B. Agranat, I.I. Oleinik, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Formation of nanocavities in the surface layer of an aluminum target irradiated by a femtosecond laser pulse, JETP Lett., 95(4), 176-181 (2012)],

исследованы свойства двухтемпературных состояний металлов

(N.A. Inogamov, S.I. Ashitkov, V.V. Zhakhovsky, V.V. Shepelev, V.A. Khokhlov, P.S. Komarov, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Acoustic probing of two-temperature relaxation initiated by action of ultrashort laser pulse, Appl. Phys. A 101(1), 1-5 (2010);

N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, V.V. Zhakhovsky, V.A. Khokhlov, B.J. Demaske, S.I. Ashitkov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, M.B. Agranat, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, I.I. Oleynik, Two-temperature thermodynamic and kinetic properties of transition metals irradiated by femtosecond lasers, AIP Conf. Proc. 1464, 593-608 (2012)),

изучено распространение упругих и пластических волн в металлах под действием фемтосекундных лазерных импульсов

(V.V. Zhakhovsky, B.J. Demaske, N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, M.B. Agranat, I.I. Oleynik, Super-elastic response of metals to laser-induced shock waves, AIP Conf. Proc. 1464, 102-112 (2012);

N. Inogamov, V. Khokhlov, Yu. Petrov, S. Anisimov, V.V. Zhakhovsky, B.J. Demaske, I.I. Oleynik, S.I. Ashitkov, K.V. Khishchenko, M. Agranat, V. Fortov, C.T. White, Ultrashort elastic and plastic shock waves in aluminum, AIP Conf. Proc. 1426, 909-912 (2012)),

исследовано образование поверхностных наноструктур в металлах под действием фемтосекундных импульсов лазерного излучения

(Inogamov, N. A., Zhakhovsky, V. V., Petrov, Y. V., Khokhlov, V. A., Ashitkov, S. I., Migdal, K. P., Il'nitsky, D. K., Emirov, Y. N., Khishchenko, K. V., Komarov, P. S., Shepelev, V. V., Agranat, M. B., Anisimov, S. I., Oleynik, I. I., & Fortov, V. E. Ultrashort laser - matter interaction at moderate intensities: two-temperature relaxation, foaming of stretched melt, and freezing of evolving nanostructures. SPIE Proceedings 9065, 906502, 1-14, (2013);

N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, D.K. Il'nitsky, Yu.N. Emirov, P.S. Komarov, V.V. Shepelev, C.W. Miller, I.I. Oleynik, M.B. Agranat, A.V. Andriyash, S.I. Anisimov, and V.E. Fortov

Electron-Ion Relaxation, Phase Transitions, and Surface Nano-Structuring Produced by Ultrashort Laser Pulses in Metals Contributions to Plasma Physics, v. 53, p. 796-810 (2013);

Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V.; Khokhlov, V. A.; Ashitkov, S. I.; Emirov, Y. N.; Khichshenko, K. V.; Faenov, A. Y.; Pikuz, T. A.; Ishino, M.; Kando, M.; Hasegawa, N.; Nishikino, M.; Komarov, P. S.; Demaske, B. J.; Agranat, M. B.; Anisimov, S. I.; Kawachi, T. & Oleynik, I. I. Ultrafast lasers and solids in highly excited states: results of hydrodynamics and molecular dynamics simulations Journal of Physics: Conference Series, 2014, 510(1), 012041;

Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V.; Ashitkov, S. I.; Emirov, Y. N.; Faenov, A. Y.; Pikuz, T. A.; Ishino, M.; Kando, M.; Hasegawa, N.; Nishikino, M.; Kawachi, T.; Agranat, M. B.; Andriash, A. V.; Kuratov, S. E. & Oleynik, I. I. Surface nano-structuring produced by spallation of metal irradiated by an ultrashort laser pulse Journal of Physics: Conference Series, 2014, 500, 112070;

Ashitkov, S. I., Komarov, P. S., Ovchinnikov, A. V., Struleva, E. V., Zhakhovskii, V. V., Inogamov, N. A. & Agranat, M. B. Ablation and nanostructuring of metals by femtosecond laser pulses Quantum Electronics, 2014, 44(6), 535;

С.И.Ашитков, С.А.Ромашевский, П.С.Комаров, А.А.Бурмистров, В.В.Жаховский, Н.А.Иногамов, М.Б.Агранат. Образование наноструктур при фемтосекундной лазерной абляции металлов. Квантовая электроника, 2015, т. 45, с. 547-550; [S.I.

Ashitkov, S.A. Romashevskii, P.S. Komarov, A.A. Burmistrov, V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, M.B. Agranat Formation of nanostructures under femtosecond laser ablation of metals. Quantum Electronics, 2015, v. 45, pp. 547-550];

Inogamov, N. A., Zhakhovsky, V. V., Ashitkov, S. I., Emirov, Yu. N., Faenov, A. Ya., Petrov, Yu. V., Khokhlov, V. A., Ishino, M., Demaske, B. J., Tanaka, M., Hasegawa, N., Nishikino, M., Tamotsu, S., Pikuz, T. A., Skobelev, I. Ya., Ohba, T., Kaihori, T., Ochi, Y., Imazono, T., Fukuda, Y., Kando, M., Kato, Y., Kawachi, T., Anisimov, S. I., Agranat, M. B., Oleynik, I. I. & Fortov, V. E. Surface Nanodeformations Caused by Ultrashort Laser Pulse, Engineering Failure Analysis, 2015, 47, 328-337),

рассмотрена абляция золота фемтосекундными лазерными импульсами

(Ashitkov, S. I.; Komarov, P. S.; Zhakhovsky, V. V.; Petrov, Y. V.; Khokhlov, V. A.; Yurkevich, A. A.; Ilnitsky, D. K.; Inogamov, N. A., Agranat, M. B. Ablation of gold irradiated by femtosecond laser pulse: experiment and modeling J. Phys.: Conf. Ser., 2016, V. 774, No. 1, 012097[1-60]),

изучены полиморфные превращения в железе под воздействием лазерных импульсов фемтосекундной длительности (S.I. Ashitkov, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, P.S. Komarov, M.B.Agranat and G.I.Kanel. The behavior of iron under ultrafast shock loading driven by a femtosecond laser. AIP Conf. proc., 2017, 1793, 100035).

В сотрудничестве с экспериментаторами из ИАПУ ДВО РАН и ДВФУ, г. Владивосток, а также из ФИАН (отделение под рук. проф. А.А. Ионина) рассмотрены проблемы лазерной печати плазмонных нанополостей в серебре и золоте (Kuchmizhak, A.; Vitrik, O.; Kulchin, Y.; Storozhenko, D.; Mayor, A.; Mirochnik, A.; Makarov, S.; Milichko, V.; Kudryashov, S.; Zhakhovsky, V. Inogamov, N. Laser printing of resonant plasmonic nanovoids Nanoscale, 2016, 8, 12352-12361),

изучено наноструктурирование поверхностей благородных металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов

(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, 8, 044016 - 1-17)

Совместная работа ведется с экспериментаторами из Института спектроскопии РАН, г. Троицк;

В сотрудничестве с экспериментаторами из University of Twente, Institute of nanotechnology, Netherlands рассмотрена абляционная динамика тугоплавкого металла рутения под действием ультракоротких лазерных импульсов оптического или рентгеновского диапазона

(V. A. Khokhlov, I. Milov, I. A. Makhotkin, V. V. Zhakhovsky, D. K. Ilnitsky, K. P. Migdal, V. V. Shepelev, Y. V. Petrov and N. A. Inogamov. Dynamics of ruthenium mirror under action of soft x-ray or optical ultrashort laser pulse, J. Phys. Conf. Ser., accepted (2018)).

Большая работа по исследованию взаимодействия коротких лазерных импульсов оптического диапазона и мягкого рентгеновского излучения с металлами и диэлектриками, абляции этих веществ, образованию поверхностных наноструктур проводится совместно с экспериментаторами из Kansai Photon Science Institute (KPSI), Quantum Beam Science Research Directorate, QST, X-ray Laser Group, group leader prof. M. Nishikino, Japan. Эта большая работа отражена в значительном количестве совместных статей [1], ссылки на которые приведены в литературе к пункту 1.5.

Литература к п. 4.7

1. С.И. Анисимов, Б.Л. Капелиович, Т.Л. Перельман, Электронная эмиссия с поверхности металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов, ЖЭТФ, 66 (2), 776-779 (1974) [S.I. Anisimov, B.L. Kapeliovich, T.L. Perelman, Electron

- emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses, *Sov. Phys. JETP* 39(2), 375-377 (1974)].
2. С.И. Анисимов, А.М. Прохоров, В. Е. Фортов, Применение мощных лазеров для исследования вещества при сверхвысоких давлениях, *УФН*, 142, 395-434 (1984)
 3. С.И. Анисимов, Б.С. Лукьянчук, Избранные задачи теории лазерной абляции, *УФН*, 172, 301–333 (2002)
 4. S.I. Anisimov, N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovskii, K.Nishihara, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, P.S. Komarov. Interaction of short laser pulses with metals at moderate intensities, *Appl. Phys. A* 92(4), 939-943 (2008).
 5. V. Zhakhovskii, N. Inogamov, K. Nishihara, Laser ablation and spallation of crystalline aluminum simulated by Molecular Dynamics, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 112, 042080 (2008).
 6. A.K. Upadhyay, N.A. Inogamov, B.Rethfeld, H.M. Urbassek, Ablation by ultrashort laser pulses: Atomistic and thermodynamic analysis of the processes at the ablation threshold, *Phys. Rev. B* 78(4), 045437 [10 pages] (2008)
 7. Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Ашитков С.И., Петров Ю.В., Агранат М.Б., Анисимов С.И., Нишихара К., Фортов В.Е. О нанотокле после воздействия ультракороткого лазерного импульса, *ЖЭТФ*, 134(1), 5-28 (2008). [N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovskii, S.I. Ashitkov, et al., Nanospallation induced by an ultrashort laser pulse, *JETP*, 107(1), 1-19 (2008)].
 8. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, Ю. В. Петров, В. А. Хохлов, С. И. Ашитков, К. П. Мигдал, Д. К. Ильницкий, Ю. Н. Эмиров, П. С. Комаров, М. Б. Агранат, С. И. Анисимов, В. Е. Фортов. Действие ультракороткого лазерного импульса на металлы: двухтемпературная релаксация, вспенивание расплава и замораживание разрушающейся нанопены. *Оптический журнал*, 81, 5-26, (2014)
 9. M. Ishino, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Pikuz, I. Skobelev, A. Faenov, N. Inogamov, T. Kawachi, and M. Yamagiwa, Very low electron temperature in warm dense matter formed by focused picosecond soft x-ray laser pulses, *J. Appl. Phys.* V. 116, 183302 (2014).
 10. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, N. Hasegawa, M. Nishikino, M. Yamagiwa, M. Ishino, M.B. Agranat, S.I. Ashitkov, A.Ya. Faenov, V.A. Khokhlov, D.K. Il'nitsky, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Eyama, N. Kakimoto, T. Tomita, M. Baba, Y. Minami, T. Suemoto, and T. Kawachi, Hydrodynamics driven by ultrashort laser pulse: simulations and the optical pump-X-ray probe experiment, *Appl. Phys. B* V. 119, 413-419 (2015).
 11. Н.А. Иногамов, С.И. Анисимов, В.В. Жаховский, А.Ю. Фаенов, Ю.В. Петров, В.А. Хохлов, В.Е. Фортов, И.Ю. Скобелев, Ю. Като, Т.А. Пикуз, В.В. Шепелев, Ю. Фукуда, М. Танака, М. Кишимото, М. Ишино, М. Нишикино, М. Кандо, Т. Кавачи, М. Нагасоно, Н. Охаши, М. Ябаши, К. Тано, Ю. Сенда, Т. Тогаши, Т. Ишикава, Абляция диэлектриков под действием коротких импульсов рентгеновских плазменных лазеров и лазеров на свободных электронах. *Оптический журнал*, 78(8), 5-15 (2011)
 12. Ashitkov, S. I., Komarov, P. S., Ovchinnikov, A. V., Struleva, E. V., Zhakhovskii, V. V., Inogamov, N. A. & Agranat, M. B. Ablation and nanostructuring of metals by femtosecond laser pulses *Quantum Electronics*, 2014, 44(6), 535
 13. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, A.Y. Faenov, V.A. Khokhlov, V.V. Shepelev, I.Y. Skobelev, Y. Kato, M. Tanaka, T.A. Pikuz, M. Kishimoto, M. Ishino, M. Nishikino, Y. Fukuda, S.V. Bulanov, T. Kawachi, Y.V. Petrov, S.I. Anisimov, V.E. Fortov, Spallative ablation of dielectrics by X-ray laser, *Appl. Phys. A* 101(1), 87-96 (2010)
 14. Иногамов, Н. А.; Жаховский, В. В. & Хохлов, В. А. Динамика абляции золота в воду *ЖЭТФ*, 2018, 154, № 1(7), 92-123
 15. М.Б. Агранат, С.И. Анисимов, С.И. Ашитков, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, П.С. Комаров, А.В. Овчинников, В.Е. Фортов, В.А. Хохлов, В.В. Шепелев, Прочностные свойства расплава алюминия в условиях экстремально высоких темпов растяжения при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов, *Письма в ЖЭТФ*, 91 (9), 517-523 (2010)
 16. Inogamov, N. A.; Zhakhovsky, V. V. & Migdal, K. P. Laser-induced spalling of thin metal film from silica substrate followed by inflation of microbump. *Appl. Phys. A*, 2016, 122, 432
 17. Н.А. Иногамов, В.А. Хохлов, В.В. Жаховский, Формирование уединенной микроструктуры и абляция в прозрачный диэлектрик при субнаносекундном лазерном воздействии, *Письма в ЖЭТФ*, Т. 108 (7), 470-477 (2018)
 18. В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, К. Nishihara, Новый механизм формирования нанорельефа поверхности, облучённой фемтосекундным лазерным импульсом *Письма в ЖЭТФ*, 87, 491-496, 2008
 19. V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, K. Nishihara, Laser ablation and spallation of crystalline aluminum simulated by Molecular Dynamics, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 112, 042080, 2008
 20. Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, С.И. Ашитков, Ю.В. Петров, М.Б. Агранат, С.И. Анисимов, К. Нишихара, В.Е. Фортов, О нанотокле после воздействия ультракороткого лазерного импульса, *ЖЭТФ*, 134, 5-28, 2008
 21. N.A. Inogamov, V.A. Khokhlov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, K.V. Khishchenko, S.I. Anisimov. Femtosecond Laser Ablation of Thin Films on Substrate. *PIERS Proceedings*, pp. 2422-2426, 2015. (<http://piers.org/piersproceedings/piers2015PragueProc.php?start=500>)
 22. V.A. Khokhlov, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V.V. Shepelev and D.K. Il'nitsky Thin 10-100 nm film in contact with substrate: Dynamics after femtosecond laser irradiation. *J. Phys.: Conf. Ser.*, v. 653, 012003, 2015.
 23. Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, Формирование наноразмерных струек и капель ультракоротким лазерным

импульсом при фокусировке на дифракционном пределе, Письма ЖЭТФ, 100, 6-12, 2014

24. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, D.K. Il' nitsky, Yu.N. Emirov, P.S. Komarov, V.V. Shepelev, C.W. Miller, I.I. Oleynik, M.B. Agranat, A.V. Andriyash, S.I. Anisimov, and V.E. Fortov, Electron-Ion Relaxation, Phase Transitions, and Surface Nano-Structuring Produced by Ultrashort Laser Pulses in Metals Contributions to Plasma Physics, v. 53, p. 796-810 (2013)
25. Иногамов, Н. А., Жаховский, В. В., Хохлов, В. А. Струеобразование при отрыве металлической пленки от подложки в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса ЖЭТФ, 2015, Т. 147, В. 1, С. 20-26
26. В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, Упруго-пластические явления в ультракоротких ударных волнах, Письма в ЖЭТФ, 92 (8), 574-579 (2010)
27. Н.А. Иногамов, В.В. Жаховский, В.А. Хохлов, В.В. Шепелев, Сверхупругость и распространение ударных волн в кристаллах, Письма в ЖЭТФ, 93, 245-251, 2011
28. V.V. Zhakhovsky, M.M. Budzevich, N.A. Inogamov, I.I. Oleynik, C.T. White, Two-Zone Elastic-Plastic Single Shock Waves in Solids, Phys. Rev. Lett. 107, 135502 (2011)
29. B.J. Demaske, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, I.I. Oleynik, Ultrashort shock waves in nickel induced by femtosecond laser pulses, Phys. Rev. B, 87(5), 054109 (2013)
30. V.V. Zhakhovsky, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov MD simulation of steady shock-wave fronts with phase transition in single-crystal iron. AIP Conf. proc., 2017, 1793, 070003
31. S.I. Ashitkov, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, P.S. Komarov, M.B. Agranat and G.I. Kanel. The behavior of iron under ultrafast shock loading driven by a femtosecond laser. AIP Conf. proc., 2017, 1793, 100035
32. V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, S.I. Ashitkov, K. Nishihara, Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials, Appl. Surf. Sci., 255(24), 9592-9596 (2009)
33. Yu. V. Petrov, K. P. Migdal, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky. Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse Applied Physics B, 2015, V. 119, P. 401-411,
34. Migdal K.P., Il' nitsky D.K., Petrov Yu.V., Inogamov N.A., Equations of state, energy transport and two-temperature hydrodynamic simulations for femtosecond laser irradiated copper and gold. Journal of Physics: Conference Series, 2015, v. 653, 012086
35. Migdal, K. P.; Petrov, Y. V.; Il' nitsky, D. K.; Zhakhovsky, V. V.; Inogamov, N. A.; Khishchenko, K. V.; Knyazev, D. V. & Levashov, P. R. Heat conductivity of copper in two-temperature state. Appl. Phys. A, 2016, 122, 408[1-5]
36. Н.А. Иногамов, Ю.В. Петров, Теплопроводность металлов с горячими электронами, ЖЭТФ, 137(3), 505-529 (2010) [N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, Thermal conductivity of metals with hot electrons, JETP, 110(3), 446-468 (2010)],
37. Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, K. P. Migdal, V. A. Khokhlov, K. V. Khishchenko. Thermal conductivity of condensed gold in states with the strongly excited electron subsystem Journal of Physics: Conference Series, 2015, v. 653, 012087
38. Migdal, K.P., Petrov, Y.V., Inogamov, N.A. Kinetic coefficients for d-band metals in two-temperature states created by femtosecond laser irradiation. SPIE Proceedings, 9065, 906503, 1-20 (2013)
39. Ю.В. Петров, Н.А. Иногамов, К.П. Мигдал. Теплопроводность и коэффициент электрон-ионного теплообмена в конденсированных средах с сильно возбужденной электронной подсистемой, Письма в ЖЭТФ, 97(1), 24-31 (2013) [Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, K.P. Migdal Thermal Conductivity and the Electron-Ion Heat Transfer Coefficient in Condensed Media with a Strongly Excited Electron Subsystem JETP Letters, 97(1), 20-27 (2013)].
40. Петров, Ю. В.; Мигдал, К. П.; Иногамов, Н. А. & Анисимов, С. И. Процессы переноса в металле с горячими электронами, возбужденными лазерным импульсом Письма в ЖЭТФ, 2016, 104, 446-454
41. 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, 124
42. Ignatov, A. I.; Zhakhovsky, V. V.; Merzlikin, A. M. & Inogamov, N. A. Thermomechanical ablation under plasmonic field excited by ultrashort laser pulse. Part I: Plasmonics, J. Phys.: Conf. Ser., 2018, 1092, 012051 Part II, J. Phys.: Conf. Ser., 2018, 1092, 012052

4.8. Перечень оборудования, материалов, информационных и других ресурсов, имеющихся у научного коллектива для выполнения проекта (в том числе – описывается необходимость их использования для реализации проекта)

Участники проекта обеспечены персональными компьютерами, используется комплекс параллельных вычислений PARMA Ногинского научного центра РАН (Черноголовка), МД моделирование осуществляется на нескольких многопроцессорных машинах, в том числе на кластере К-100 в ИПМ им. М.В. Келдыша (960 выч.ядер), суперкомпьютере "Ломоносов" (МГУ). В.В.Жаховский имеет доступ на голландский национальный суперкомпьютер Cartesius (48 000 выч.ядер) <https://userinfo.surfsara.nl/systems/cartesius>.

Используются оригинальные, разработанные участниками проекта программа двухтемпературной гидродинамики, схема МД расчетов с оригинальной методикой распараллеливания, схема SPH и другие.

Применяются вычислительные пакеты COMSOL, LS-DYNA, LAMMPS, Abinit и VASP (метод классической и квантовой молекулярной динамики), пакеты символических вычислений и др.

Весь этот аппарат будет использоваться при выполнении проекта. Моделирование методами МД-МК и SPH основано на применении перечисленных выше суперкомпьютеров.

При вычислениях электрон-фононной константы взаимодействия на основе подсчета функции Элиашберга будут применены коды на основе метода функционала плотности ABINIT и Elk.

Оборудованием группа обеспечена достаточно.

4.9. План работы на первый год выполнения проекта (в том числе указываются запланированные командировки (экспедиции) по проекту)

на русском языке

А) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазмонных и лазерных ЭМ полей

Работа по сочетанию расчетов электромагнитного поля поверхностных плазмон-поляритонов и термо-гидродинамики.

Работа по расчету радиальной гофрировки на куполах, см. рис. 1 в приложенном п. 4.13 файле 1.

Б) Действие вихревых пучков

Расчет воздействия вихревого пучка.

В) Образование наночастиц при абляции в жидкость

Работа по включению полного уравнения состояния воды в гидродинамический расчет абляции золота в воду.

Молекулярно-динамическое моделирование процессов взаимопроникновения металла и воды за счет диффузии.

Конденсация в кластеры золота при расширении и охлаждении пара золота в диффузионном слое с водой и внутри чистого пара золота. Первые расчеты абляции металла в жидкость с применением SPH кода.

Г) Лазерная фрагментация жидких капель и струй

Перевод кода SPH на табличное уравнение состояния. Начало работ по проблеме взаимодействия жесткого рентгеновского пучка LCLS с микрокаплями или микроструей воды.

Д) Абляция тугоплавких металлов

Завершить расчетную часть работ по рентгеновским зеркалам с применением рутения. Подготовить и сдать в печать соответствующие статьи.

Е) Лазерное плавление порошков

Будут выполнены гидродинамические расчеты лазерного нагрева микрочастиц. Будет определен порог плавления первого слоя микрочастиц. Будет создана картина плавления двух слоев микрочастиц. Будут начаты молекулярно-динамические расчеты. Будет подготовлен SPH код к расчетам нагрева порошков микрочастиц.

Ж) Вычислительная физика, крупномасштабное высокопроизводительное численное моделирование

Будут встроены необходимые усовершенствования в коды для выполнения расчетов в 2019 г.

З) Характеристики кремния, облученного лазером

Будет выполнена основная часть запланированных на два года работ

И) Новые подходы к расчетам коэффициента электрон-ионного взаимодействия в металлах

Будут выполнены расчеты взаимодействия электронной и ионной подсистем металла с помощью нового подхода.

на английском языке

A) Spatially distributed heating due to a combination of plasmon and laser EM fields

Work on a combination of calculations of the electromagnetic field of surface plasmon-polaritons and thermo-hydrodynamics. Work on the calculation of radial corrugation on the domes, see fig. 1 in the attached to the section 4.13 file 1.

B) Action of the vortex beams

Calculation of the action of the vortex beam of light.

C) The formation of nanoparticles during ablation into a liquid

Work on the inclusion of the full equation of state of water in the hydrodynamic calculation of the ablation of gold into water. Molecular dynamics simulation of metal and water interpenetration due to diffusion. Condensation into gold clusters during expansion and cooling of gold vapor in a diffusion layer with water and inside pure gold vapor. The first calculations of metal ablation into liquid using the SPH code.

D) Laser fragmentation of liquid droplets and jets

Transfer of SPH code to tabular equation of state. Beginning of work on the problem of the interaction of a hard X-ray LCLS

beam with a microdroplet or microjet of water.

E) Ablation of refractory metals

Complete a computational part of the work on the X-ray mirrors with ruthenium. Prepare and submit relevant articles.

F) Laser melting powders

The hydrodynamic calculations of the laser heating of the microparticles will be performed. The melting threshold of the first layer of microparticles will be determined. A picture of melting of two layers of the microparticles will be created. Molecular dynamics calculations will be initiated. An SPH code will be prepared for calculating the heating of microparticle powders.

G) Computational physics, large-scale high-performance numerical simulation

The necessary improvements will be embedded in the codes for performing calculations in 2019.

H) Characteristics of silicon irradiated by laser. Most of the work planned for two years will be completed.

I) New approaches to the calculation of the coefficient of electron-ion interaction in metals. Calculations of the interaction between the electron and ion subsystems of the metal will be performed using a new approach.

4.10. Планируемое на первый год содержание работы каждого основного исполнителя проекта (включая руководителя проекта)

1. Анисимов Сергей Иванович, руководитель проекта. Общее руководство проектом. Помесячная/поквартальная внутренняя отчетность каждого участника коллектива. Принятие решений. Физические модели процессов. Анализ результатов. Корректировка работ при необходимости.

2. Иногамов Наиль Алимович.

Разработка модели для задачи А (гибрид плазмоники и термо-гидродинамики). Контакт с исполнителями.

Расчеты по задаче Б (вortexные структуры). Теория процесса. Подбор параметров для масштабирования задачи Б в рамках молекулярно-динамического моделирования. Написание статьи.

Задача В (абляция в жидкость): анализ термодинамических данных воды, сопоставление с термодинамикой золота.

Начальные стадии, теплопроводность и диффузия, далекие стадии процесса при расширении паров золота на два порядка. Подготовка материалов к публикации.

Задача Г (фрагментация капель/струй). Совместная с членами коллектива настройка параметров для расчетов начальной динамики (поглощение жестких рентгеновских фотонов, релаксации электронной подсистемы, расширения цилиндрической ударной волны), передача данных начальной динамики на вход молекулярной динамики и SPH кода.

Задача Д (абляция рутения). Физическая модель. Анализ результатов гидродинамического и молекулярно-динамического расчетов.

Задача Е (порошки). Физическая картина. Перечень основных точек, тем, которые требует расчетов для понимания происходящего.

3. Петров Юрий Васильевич.

Полное уравнение состояния жидкой и парообразной воды. Расчет ударной адиабаты, расчет двухфазной области, расчет адиабат, связывающих адиабату Гюгонио и проходящих внутри двухфазной области. Уравнение состояния рутения, уравнение состояния молибдена в двухтемпературных и одготемпературных условиях. Расчет коэффициента теплопроводности и коэффициента электрон-ионного взаимодействия для рутения и молибдена в двухтемпературных и одготемпературных условиях.

4. Хохлов Виктор Александрович.

Гидродинамические расчеты по задачам А, Б, В, Г, Д, Е. Адаптация полного уравнения состояния воды в жидком и паровом состояниях в схему гидродинамического расчета. Адаптация схемы кода для решения задач по рутению и молибдену.

5. Жаховский Василий Викторович.

Важный член коллектива. Создает физические модели. Адаптирует коды к реальной ситуации, которую требуется описать. Разрабатывает межатомный потенциал взаимодействия для рутения. Выполнит работы по молекулярно-динамическому и гидродинамическому SPH моделированию задач А, Б, В, Г, Д, Е. Разработает новые и модифицирует существующие коды в рамках задачи Ж.

Члены коллектива до 39 лет:

6. Мигдал Кирилл Петрович.

Будет использовать свой опыт применения пакетов квантово-механического моделирования для нахождения требуемых в расчетах термодинамических и транспортных данных по рутению и молибдену. Выполнит работу по свойствам кремния при лазерном облучении. Уточнит расчеты коэффициента электрон-ионного взаимодействия. Все эти работы важны для успеха проекта.

7. Григорьев Сергей Юрьевич.

Очень нужный для проекта специалист. Выполнит работу по применению кода SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) и молекулярной динамики для решения задач в пп. В, Г, Е. Выполнит работы по развитию алгоритмической базы коллектива (п. Ж).

8. Дьячков Сергей Александрович.

Нужный для проекта специалист. Выполнит работу по применению кода SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) и молекулярной динамики для решения задач в пп. В, Г, Е. Выполнит работы по развитию алгоритмической базы коллектива (п. Ж).

9. Егорова Мария Сергеевна.

Нужный для проекта специалист. Выполнит работу по применению кода SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) и молекулярной динамики для решения задач в пп. В, Г, Е. Выполнит работы по развитию алгоритмической базы коллектива (п. Ж).

10. Мурзов Семен Александрович.

Нужный для проекта специалист. Выполнит работу по применению кода SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) и молекулярной динамики для решения задач в пп. В, Г, Е. Выполнит работы по развитию алгоритмической базы коллектива (п. Ж).

4.11. Ожидаемые в конце первого года конкретные научные результаты *(форма изложения должна дать возможность провести экспертизу результатов и оценить степень выполнения заявленного в проекте плана работы)*
на русском языке

А) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазмонных и лазерных ЭМ полей

Будут выполнены расчеты плазмонных полей, инициируемые внешней падающей лазерной волной. Будет найдено суммарное действующее поле в скин-слое металла. Будет вычислена соответствующая диссипация.

Подчеркнем, что расчеты 2019 г. качественно отличаются от более простых расчетов, описанных в статьях [4], см. список ссылок к п. 1.4 проекта. В работах [4] геометрия была относительно простой, волны были двумерными, т.е. находились в плоскости волновых векторов лазерных волн, одной, распространяющейся в клине Кретчманна, и другой, падающей на пленку из вакуума. В нашем случае волны трехмерные, поскольку возбуждаются на бугорке-куполе пленки и бегут в разные стороны от купола.

Будут выполнен комплект расчетов термо-гидродинамики, которые опишут отклик мишени на диссипацию в тепло в скин-слое. Эта диссипация неоднородная по пленке. Описание отклика означает, что мы воссоздадим картину плавления, движения и замораживания в финальные структуры, которые будут сопоставлены с опытами коллег из Владивостока и ФИАНа.

Будут рассчитаны движения куполов, показанных на рис. 1. Мы не будем пользоваться приближением осевой симметрии. Будет установлена неизвестная сегодня и интригующая ученых причина сильной радиальной гофрировки на куполах.

Б) Действие вихревых пучков

Будет проделана большая работа по подготовке к расчетам и расчетам воздействия вихревого пучка, см. рис. 2 в приложенном 4.13 файле 1. Мы применим все имеющиеся у нас средства и опишем механизм формирования хиральных заострений. Отметим, что на сегодня в литературе сталкиваются две противоположные точки зрения.

Японские авторы и некоторые другие утверждают, что причиной хиральности является угловой момент, приносимый вихревым пучком фотонов, см. первые две работы в списке литературы к п. 1.4 под номером [5]. Тогда как коллеги из ФИАНа и университета в г. Самара считают, что дело в неоднородности освещения в пятне на поверхности мишени. Таким образом, ситуация очень интересная и сложная.

В) Образование наночастиц при абляции в жидкость

Будет закончена работа по включению полного уравнения состояния воды в гидродинамический расчет абляции золота

в воду. Будет выполнено молекулярно-динамическое (МД) моделирование процессов взаимопроникновения металла и воды за счет диффузии. Будет промоделирована конденсация в кластеры золота при расширении и охлаждении пара золота в диффузионном слое с водой и внутри чистого пара золота. Будут выполнены расчеты абляции металла в жидкость с применением SPH кода. Предстоит сравнить МД и SPH результаты. Будет выполнено гидродинамическое моделирование с помощью кода в переменных Лагранжа. Будет понято, когда и каким образом формируются наночастицы.

Г) Лазерная фрагментация жидких капель и струй

Код SPH будет переведен с аналитического на табличное уравнение состояния. Будут начаты работы по проблеме взаимодействия жесткого рентгеновского пучка LCLS с микрокаплей или микроструей воды. Предстоит создать задел для дальнейшей работы и опубликовать первые полученные данные по динамике капли или струи после сильнейшего концентрированного вдоль тонкой ниточки рентгеновского воздействия.

Д) Абляция тугоплавких металлов

Будут завершены расчеты по рентгеновским зеркалам с применением рутения. Будут написаны и сданы в печать статьи по этой работе.

Е) Лазерное плавление порошков

Будут выполнены гидродинамические расчеты лазерного нагрева микрочастиц. Будет определен порог плавления первого слоя микрочастиц. Будет создана картина плавления двух-трех первых слоев микрочастиц. Будут начаты молекулярно-динамические расчеты. Будет подготовлен SPH код к расчетам нагрева мезоскопических ансамблей микрочастиц. Полученные результаты будут подготовлены для публикации.

Ж) Вычислительная физика, крупномасштабное высокопроизводительное численное моделирование

Будут встроены необходимые усовершенствования в коды для выполнения расчетов в 2019 г.

З) Характеристики кремния, облученного лазером

Будет выполнена основная часть запланированных на два года работ

И) Новые подходы к расчетам коэффициента электрон-ионного взаимодействия в металлах

Будут выполнены расчеты взаимодействия электронной и ионной подсистем металла с помощью нового подхода.

на английском языке

A) Spatially distributed heating due to a combination of plasmon and laser EM fields.

Calculations of plasmon fields initiated by an external incident laser wave will be performed. The total effective field in the skin layer of the metal will be found. The corresponding dissipation will be calculated.

We emphasize that the calculations of 2019 are qualitatively different from the simpler calculations described in the articles [4], see the list of references to section 1.4 of the project. In [4], the geometry was relatively simple, the waves were two-dimensional, i.e. were in the plane of the wave vectors of the laser waves, one propagating in the Kretschmann wedge, and the other falling on the film from a vacuum. In our case, the waves are three-dimensional, since they are excited on the tubercle-dome of the film and run in different directions from the dome.

A set of thermo-hydrodynamic calculations will be performed that describe the target response to dissipation into heat in the skin layer. This dissipation is not uniform over the film. Description of the response means that we will recreate the picture of melting, movement and freezing into final structures, which will be compared with the results of experiments of colleagues from Vladivostok and FIAN.

The movements of the domes shown in fig. 1 in the attached p. 4.13 file 1 will be calculated. We will not use the axial symmetry approximation. An unknown and intriguing reason for the strong radial corrugation on the domes will be established.

B) Action of vortex beams.

Much work will be done to prepare for the calculations and performing calculations of the action of the vortex beam, see fig. 2. We will apply all the means at our disposal and describe the mechanism for the formation of chiral points. Note that today in the literature there are two opposing points of view. Japanese authors and some others argue that the cause of chirality is the angular momentum brought by the vortex photon beam, see the first two papers in the list of references to section 1.4 under the number [5]. At the same time, colleagues from FIAN and the university in Samara believe that it is caused by the heterogeneity of the illumination in the spot on the surface of the target. Thus, the situation is very interesting and complex.

C) The formation of nanoparticles during ablation into a liquid.

The work on the inclusion of the complete equation of state of water in the hydrodynamic calculation of the ablation of gold into water will be completed. Molecular dynamics (MD) modeling of the processes of metal and water interpenetration due to diffusion will be performed. Condensation into clusters of gold will be simulated when the gold vapor expands and cools in the diffusion layer with water and inside pure gold vapor. Calculations of metal ablation into liquid using the SPH code will be performed. It is necessary to compare the MD and SPH results. Hydrodynamic modeling will be performed using a code in

Lagrange variables. It will be understood when and how nanoparticles are formed.

D) Laser fragmentation of liquid droplets and jets.

The SPH code will be transferred from analytic to a tabular equation of state. Work will be started on the problem of the interaction of a hard X-ray beam LCLS with a microdroplet or microjet of water. It is necessary to create a reserve for further work and publish the first data obtained on the dynamics of a drop or jet after a strong concentrated X-ray exposure along a thin thread.

E) Ablation of refractory metals.

Calculations on x-ray mirrors using ruthenium will be completed. Articles on this work will be written and put into print.

F) Laser melting of powders.

The hydrodynamic calculations of the laser heating of the microparticles will be performed. The melting threshold of the first layer of microparticles will be determined. A melting pattern will be created for the two or three first layers of microparticles. Molecular dynamics calculations will be initiated. An SPH code will be prepared for the heating of mesoscopic ensembles of microparticles. The results will be prepared for publication.

G) Computational physics, large-scale high-performance numerical simulation.

The necessary improvements will be embedded in the codes for performing calculations in 2019.

H) Characteristics of silicon irradiated by laser.

Most of the work planned for two years will be completed.

I) New approaches to the calculation of the coefficient of electron-ion interaction in metals.

Calculations of the interaction between the electron and ion subsystems of the metal will be performed using a new approach.

4.12. Перечень планируемых к приобретению за счет гранта оборудования, материалов, информационных и других ресурсов для выполнения проекта (в том числе – описывается необходимость их использования для реализации проекта)

Не планируется

4.13. Файл с дополнительной информацией 1

С графиками, фотографиями, рисунками и иной информацией о содержании проекта. Один файл в формате pdf, до 3 Мб.

Скачать...

Текст в файлах с дополнительной информацией должен приводиться на русском языке. Перевод на английский язык требуется в том случае, если руководитель проекта оценивает данную информацию существенной для эксперта.

4.14. Файл с дополнительной информацией 2 (если информации, приведенной в файле 1 окажется недостаточно)

С графиками, фотографиями, рисунками и иной информацией о содержании проекта. Один файл в формате pdf, до 3 Мб.

Скачать...

Подпись руководителя проекта _____/С.И. Анисимов/

Форма 5. Запрашиваемое финансирование на 2019 год

5.1. Планируемые расходы по проекту

№ п.п.	Направления расходования гранта	Сумма расходов (тыс.руб.)
	ВСЕГО	6000
	Вознаграждение членов научного коллектива (с учетом страховых взносов во внебюджетные фонды, без лиц категории «вспомогательный персонал»)	5000
	Вознаграждение лиц категории «вспомогательный персонал» (с учетом страховых взносов во внебюджетные фонды)	0
1	Итого вознаграждение (с учетом страховых взносов во внебюджетные фонды)	5000
2	Оплата научно-исследовательских работ сторонних организаций, направленных на выполнение научного проекта (не более 15 процентов от суммы гранта)	0
3	Расходы на приобретение оборудования и иного имущества, необходимых для проведения научного исследования (включая обучение работников, монтажные, пуско-наладочные и ремонтные*** работы) *** Не связанные с осуществлением текущей деятельности организации.	0
4	Расходы на приобретение материалов и комплектующих для проведения научного исследования	0
5	Иные расходы для целей выполнения проекта	400
6	Накладные расходы организации (не более 10 процентов от суммы гранта)	600

5.2. Расшифровка планируемых расходов

№ п.п.	Направления расходования гранта, расшифровка
1	Итого вознаграждение (с учетом страховых взносов во внебюджетные фонды) (указывается сумма вознаграждения (включая руководителя, основных исполнителей и иных исполнителей, привлекаемых к выполнению работ по проекту), включая установленные законодательством Российской Федерации гарантии, отчисления по страховым взносам на обязательное пенсионное страхование, на обязательное медицинское страхование, на обязательное социальное страхование на случай временной нетрудоспособности и в связи с материнством, на обязательное социальное страхование от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний) 5000
2	Оплата научно-исследовательских работ сторонних организаций, направленных на выполнение научного проекта (приводится перечень планируемых договоров (счетов) со сторонними организациями с указанием предмета и суммы каждого договора) нет
3	Расходы на приобретение оборудования и иного имущества, необходимых для проведения научного исследования (представляется перечень планируемых к закупке оборудования и иного имущества, необходимых для проведения научного исследования (в соответствии с п. 4.12 формы 4)) нет
4	Расходы на приобретение материалов и комплектующих для проведения научного исследования (представляется расшифровка запланированных материалов и комплектующих (в соответствии с п. 4.12 формы 4)) нет
5	Иные расходы для целей выполнения проекта (приводятся иные затраты на цели выполнения проекта, в том числе на командировки, оплату услуг связи, транспортных услуг, расходы <u>не</u> <u>расшифровываются</u>)

Подпись руководителя проекта _____/С.И. Анисимов/

Подпись руководителя организации (уполномоченного представителя, действующего на основании доверенности или распорядительного документа), **печать** (при ее наличии) **организации.**

В случае подписания формы уполномоченным представителем организации (в т.ч. – руководителем филиала) к печатному экземпляру заявки прилагается копия распорядительного документа или доверенности, заверенная печатью организации.

_____/_____
М.П.