

Название проекта:

Физика лазерного воздействия на материалы:

теория, моделирование и приложения

ФОРМА 4

4.1. Научная проблема, на решение которой направлен проект

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 РФФ 14-19-01599 вместе с созданием теории формирования куполов [2,3] была создана теория и проведено моделирование 3D 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 РФФ 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 РФФ 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 фононной 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. B. 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 фононной 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. T. 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 остросфокусированным 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 нанотколе 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.)

4.2. Научная значимость и актуальность решения обозначенной проблемы

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 плазмонных 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
- 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 плазмонных 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 заменят 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 удастся 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 показана схема приложений лазерного синтеза коллоидов.

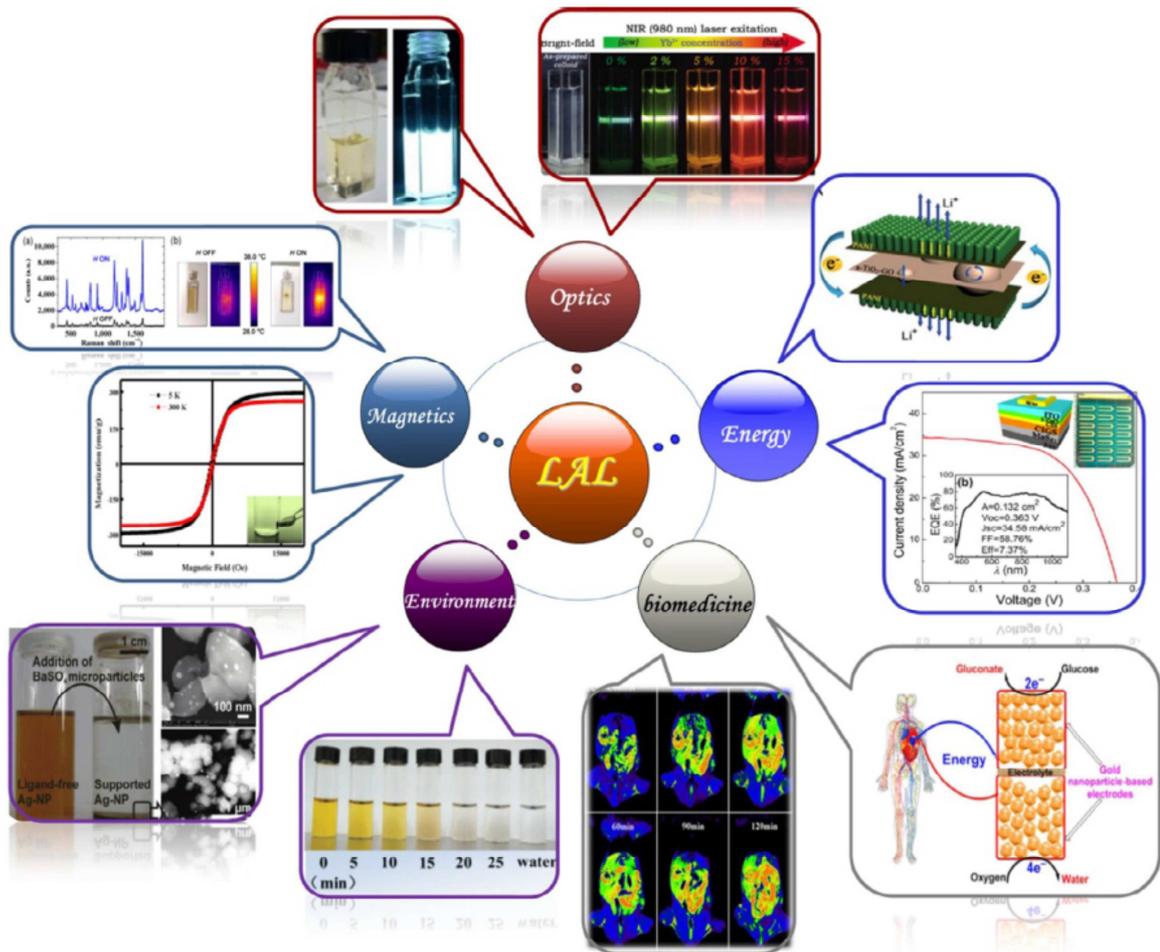


Fig. 4. The increasing and extensive applications based on LAL reported by the present literatures, including optics, magnetics, energy, environment as well as biomedicine.

Рис. 5. Приложения лазерного синтеза из статьи Xiao et al., Progress in Materials Science V. 87, 140-220 (2017), см. 2] в п. 1.4.

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 ЕАМ потенциалу рутения [1,2]. 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 3Д 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, что для изучения динамики электрон-ионной релаксации в микрометровых и более толстых мишенях важным является аккуратность описания теплопереноса от более нагретых электронов приповерхностного слоя вглубь мишени. Сама актуальность исследования обработки поверхности кремниевых пленок ультракоротким лазером 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. Поэтому оценка важности учёта влияния электронного нагрева на фононный спектр на результаты метода Аллена-Даунера представляется одной из важных задач, поскольку позволит выяснить её роли при сравнении результатов для динамики электрон-ионной релаксации. Современный подход электронного силового поля (electron force field), применимый для описания электрон-ионной релаксации в разных фазах

нагретого вещества, делает возможным проверку утверждения о справедливости двух вышеуказанных подходов для разных фаз, строго говоря, сформулированных для твердого вещества.

Литература к п. 4.2

[1] M. Igarashi, M. Khantha, V. Vitek, "N-body interatomic potential for hexagonal close-packed metals", *Phil. Mag. B*, 63, 603-627 (1991)

[2] S. Chen, J. Xu, H. Zhang, "A new scheme of many-body potentials for hcp metals", *Computational Materials Science*, 29, 428-436 (2004)

4.3. Конкретная задача (задачи) в рамках проблемы, на решение которой направлен проект, ее масштаб и комплексность

Перечислим конкретные проблемы, которые будут решены.

А) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазмонных 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. 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. Оматцу 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.

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 и 4, 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. Baranov *et al*, *Optica*, 4(7), 814, 2017) является несомненным, а, с другой стороны, существуют данные, свидетельствующие о влиянии электронного нагрева на их фоннные

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

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

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

На сегодня в мировой литературе нет ни описания, ни решения задачи о сочетании плазмонных 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 Кретчманна 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.

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.

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

А) 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 вихревых 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 работе [13] 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. Жигилея [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 или XUV – 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, ICPEEA 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 порогах абляции и сравнении с опытами.

Е) Лазерное плавление порошков

В проекте будет изучено важнейшее звено самой современной технологии, называемой 3Д 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 3Д 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 звеном остается звено, связанное с физикой лазерного плавления насыпки и рекристаллизации. Имеется значительное число работ в этой области. В основном это эксперимент [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 Монте-Карло теплопроводностью и на SPH коде, который специально приспособлен для описания 3Д 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 квазиравновесную 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-нс воздействии преобладают термомеханические эффекты в конденсированной фазе. Т.е. физика действия на материалы качественно меняется.

После создания способа формировать ультракороткие импульсы 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 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 Грюнайзена, 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 VPD³ (Voronoi particle dynamical domain decomposition), поскольку, также как и MPD³, основан на трехмерном разбиении пространства на ячейки Вороного, см. детальное описание ниже.

Относительно недавно МД (MD) программа дополнена модулем расчета электронной теплопроводности методом 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, характеризующихся 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 эйлерова 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, ближайšie 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 локализован; 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 (ЕАМ), который является многочастичным потенциалом, что необходимо для моделирования металлической связи [28-32]. Первое поколение ЕАМ 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 ЕАМ 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 металла при сильных сжатиях в десятки ГПа и выше. В частности наблюдается снижение 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 ЕАМ 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 ЕАМ 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 ЕАМ 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 ЕАМ потенциалов специально настроенных на достоверное воспроизведение поведения материалов в широком диапазоне давлений и температур. В основе построения подгоночной базы данных лежит выбор атомных конфигураций соответствующих состояниям вещества, возникающих при непрерывном холодном сжатии. Таким образом, в основе базы данных лежит *ab initio* уравнение состояния вещества при абсолютном нуле температуры, а именно кривая холодного давления $P(V)$ при однородном сжатии/растяжении и компоненты тензора напряжений (тензора давлений) 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 ЕАМ 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 ЕАМ 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.

3) 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 ранее 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 А. 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.

Литература к п. 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. 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, Салащенко 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, 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* 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. Zhakhovsky, 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. 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, 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. Syryanyy, 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, Rilpho 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.82.054109>
- [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.B864>

- [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. doi: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)

А) Пространственно распределенный нагрев за счет комбинации плазмонных 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.

Б) Действие вихревых 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 поведе 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 (c) 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 пузырьки. 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-Грюнаизена, 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 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/a 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-Грюнайзена. 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 которой 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).

3) 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 расчётов 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 плазмонных 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.

Б) Действие вихря 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.

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 эpsilon-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 \(2010\)](#) [М. В. 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., Ilnitsky, 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. Ilnitsky, 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.; Il'nitsky, 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. 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, 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 нанотолке 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). doi: 10.1063/1.4901943;
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. Ilnitsky, Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, T.A. Pikuz, S. Takayoshi, T. Euyama, 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. 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*, 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[1-9]
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 нанотколе 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. П' nitsky Thin 10-100 nm film in contact with substrate: Dynamics after femtosecond laser irradiation. J. Phys.: Conf. Ser., v. 653, 012003, 2015.
DOI: 10.1088/1742-6596/653/1/012003
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. Pnitsky, 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) [4 pages]
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) [9 pages]
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) pdf [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) pdf].
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.

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 K-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)

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.

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 микрокаплей 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.

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 требуют 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 внутрь 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)

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 вихря пучков

Будет проделана большая работа по подготовке к расчетам и расчетам воздействия вихря пучка, см. рис. 2. 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 вихря 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 микрокаплями 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.

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)

Покупок не планируется