

На правах рукописи

Фокин Владимир Борисович

**Континуально-атомистическая модель  
и ее применение  
для численного расчета воздействия  
одиночного и двойного  
фемтосекундного лазерного импульса  
на металлы**

01.04.08 – Физика плазмы

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва – 2017

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенном институте высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель: к. ф.-м. н. Левашов Павел Ремирович,  
ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва

Официальные оппоненты: д. ф.-м. н. Иногамов Наиль Алимович,  
ФГБУН Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, г. Черноголовка;  
д. ф.-м. н. Красюк Игорь Корнелиевич,  
ФГБУН Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, г. Москва

Ведущая организация: Федеральное государственное унитарное предприятие Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, г. Москва

Защита состоится «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2017 г. в \_\_\_\_\_ часов на заседании диссертационного совета Д 002.110.02 Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук по адресу: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, корпус Л-3, экспозиционный зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке *ОИВТ РАН*.

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2017 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,

к. ф.-м. н.



*М. М. Васильев*

## Общая характеристика работы

**Актуальность работы.** В настоящее время, благодаря появлению новых технологий и уменьшению размера и энергопотребления различных технических устройств, возрастает необходимость в создании и совершенствовании физических моделей, способных описывать различные процессы в веществе на атомарном уровне. Континуальный подход, основанный на осреднении кинематических параметров атомов и молекул по времени и пространству, применим лишь в условиях локального термодинамического равновесия. В противном случае более корректными являются атомистические подходы, которые позволяют естественным образом учитывать атомарную структуру кристаллической решетки, влияние примесей, наличие дислокаций, кинетику фазовых переходов, явления нуклеации и откола при растяжении вещества и многие другие процессы. При этом динамика такой системы, состоящей из атомов (или молекул), будет определяться, главным образом, выбором потенциала межчастичного взаимодействия. Современные потенциалы воспроизводят с высокой точностью различные свойства вещества, такие как изотермическое сжатие, кривая плавления, скорость звука, модуль сдвига, однако не учитывают в явном виде свойства вырожденной электронной подсистемы, которая играет чрезвычайно важную роль при лазерном нагреве, используемом во многих современных высокотехнологических приложениях. Возможным решением проблемы является объединение атомистического подхода для ионов с континуальной моделью электронной подсистемы, свойства которой описываются с помощью уравнения состояния, а также моделей транспортных и оптических свойств. Такая гибридная модель будет воспроизводить динамику вещества как во время, так и после лазерного воздействия, учитывая поглощение излучения, эффекты, связанные с теплопроводностью, процессы плавления решетки, нуклеацию и откол вещества. В данной работе формулируется гибридная континуально-атомистическая модель для численного исследования воздействия одного или нескольких ультракоротких лазерных импульсов на вещество, и анализируются результаты, полученные с применением этой модели.

**Цель диссертационной работы** состоит в создании гибридной континуально-атомистической модели воздействия лазерного излучения на металл, в моделировании абляции алюминия под воздействием одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импульса с применением созданной модели, а также в сравнении полученных результатов с другими подходами и экспериментальными данными.

Для достижения поставленной цели были последовательно решены следующие задачи:

- внесены модификации в код программного комплекса LAMMPS, реализующие решение уравнения теплопроводности по неявной схеме для электронов, а также поправки к силам, действующим на атомы;
- произведен анализ нескольких потенциалов межчастичного взаимодействия типа внедренного атома и выбран наиболее подходящий потенциал для исследуемой области фазовой диаграммы для алюминия;
- проведены тестовые расчеты абляции металлов (никеля, алюминия и золота) с применением полученного кода, работающего в однопроцессорном режиме;
- создан программный модуль для расчета комплексной диэлектрической проницаемости, коэффициентов электронной теплопроводности и электрон-фононного взаимодействия;
- разработана параллельная версия программы с оригинальным алгоритмом сбора статистики по атомам;
- реализовано решение уравнения энергии для электронов, которое учитывает их перенос вместе с ионами внутри моделируемого образца;
- реализован алгоритм гибридной модели с переменным временным шагом — учитываются два критерия расчета величины временного шага и ограничение на скорость его возрастания от итерации к итерации;
- на основе программного комплекса LAMMPS реализована параллельная версия гибридной континуально-атомистической модели, проведены тесты масштабируемости программы;
- проведено моделирование воздействия одиночного фемтосекундного лазерного импульса на алюминиевую мишень с помощью гибридной континуально-атомистической модели, проведено сравнение полученной динамики абляции с гидродинамическими расчетами, а также с имеющимися экспериментальными данными;
- проведено моделирование воздействия двойного фемтосекундного лазерного импульса на алюминиевую мишень с помощью гибридной континуально-атомистической модели.

**Научная новизна.** Впервые предложена континуально-атомистическая модель, которая позволяет:

- моделировать воздействие лазерного излучения на металл, имеющий сложный профиль плотности, в широком диапазоне температур и давлений;

- моделировать воздействие нескольких ультракоротких лазерных импульсов с различной частотой и поляризацией;
- моделировать воздействие мощного импульса излучения, энергия которого многократно превышает порог абляции;
- описывать развитие процессов, протекающих при абляции, на атомарном уровне, без привлечения моделей термодинамических и транспортных свойств ионной подсистемы.

Впервые с помощью атомистического моделирования для алюминия продемонстрировано:

- уменьшение глубины абляционного кратера при времени задержки между импульсами, превышающем 10 пс;
- экранирование мишени от второго импульса продуктами абляции первого импульса при времени задержки между импульсами, превышающем 50 пс;
- трехкратное увеличение электронной температуры плюма при времени задержки между импульсами 100–200 пс.

**Научная и практическая значимость.** Разработанная гибридная континуально-атомистическая модель может быть использована для:

- теоретического описания быстропротекающих процессов при воздействии лазерного излучения на вещество;
- моделирования процесса образования наночастиц и нанокластеров посредством лазерной абляции в различные среды;
- планирования экспериментов по лазерной обработке металлов.

**На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:**

1. Гибридная континуально-атомистическая модель для численного исследования воздействия ультракоротких лазерных импульсов на металлы с учетом реалистичных моделей теплофизических свойств плотной плазмы.
2. Расчетная глубина абляции при воздействии одиночного фемтосекундного лазерного импульса на металл, полученная с помощью гибридной континуально-атомистической модели, близка к глубине абляции по континуальной модели и меньше, чем экспериментальная глубина.
3. Для двойного импульса при задержках, превышающих 20 пс, наблюдается эффект экранирования плазмой, при котором второй импульс не достигает мишени.

4. При задержках между импульсами более 10 пс глубина кратера монотонно уменьшается с ростом задержки, а при задержках более 50 пс глубина кратера становится меньше, чем для одиночного импульса.
5. При задержках между импульсами 100–200 пс наблюдается трехкратное увеличение электронной температуры плюма.
6. Уменьшение глубины кратера, наблюдаемое и в экспериментах, и в гибридном моделировании, происходит: в случае задержек менее 20 пс — из-за подавления фрагментации в волне разрежения, вызванной первым импульсом, а в случае задержек более 50 пс — из-за осаждения внутренних аблированных слоев вещества обратно на мишень.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях, семинарах и симпозиумах: 8-й Российский симпозиум «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах» (Новый Афон, Абхазия, 2010 г.); 53-я научная конференция МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук» (Москва, 2010 г.); XXVI International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Нальчик, 2011 г.); 54-я научная конференция МФТИ «Проблемы фундаментальных и прикладных естественных и технических наук в современном информационном обществе» (Москва, 2011 г.); XXVII International Conference on Equations of State for Matter (Эльбрус, 2012 г.); X Международный семинар «Математические модели и моделирование в лазерно-плазменных процессах и передовых научных технологиях» (Петровац, Черногория, 2012 г.); XIV Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование» (Саров, 2012 г.); 55-я научная конференция МФТИ «Проблемы фундаментальных и прикладных естественных и технических наук в современном информационном обществе» (Москва, 2012 г.); XXVIII International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, 2013 г.); XV Liquid and Amorphous Metals Conference (Пекин, Китай, 2013 г.); XI Международный семинар «Математические модели и моделирование в лазерно-плазменных процессах и передовых научных технологиях» (Будва, Черногория, 2013 г.); 12th International Conference on Laser Ablation (Искья, Италия, 2013 г.); 56-я научная конференция МФТИ «Актуальные проблемы фундаментальных и прикладных наук в современном информационном обществе» (Москва, 2013 г.); XXIX International Conference on Equations of State for Matter (Эльбрус, 2014 г.); Международная конференция «XVI Харитоновские тематические научные чтения „Мощная импульсная электрофизика“» (Саров, 2014 г.); 2014 International High Power Laser Ablation Symposium (Санта Фе, США, 2014 г.); XII Международная конференция «Забабахинские научные чтения» (Снежинск, 2014 г.); ALT'14:

International Conference on Advanced Laser Technologies (Кассис, Франция, 2014 г.); XV Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование» (Саров, 2014 г.); XIV Российская конференция (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (Казань, 2014 г.); XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, 2015 г.); XIII Международный семинар «Математические модели и моделирование в лазерно-плазменных процессах и передовых научных технологиях» (Петровац, Черногория, 2015 г.); 15 International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas (Алма-Ата, Казахстан, 2015 г.); Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics (Москва, 2015 г.); XXXI International Conference on Equations of State for Matter (Эльбрус, 2016 г.); Международная конференция «XVIII Харитоновские тематические научные чтения „Проблемы физики высоких плотностей энергии“ » (Саров, 2016 г.); XXXII International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, 2017 г.); XIII Международная конференция «Забабахинские научные чтения» (Снежинск, 2017 г.)

**Публикации.** Материалы диссертации опубликованы в 35 печатных работах, из них 6 статей в рецензируемых журналах и 29 тезисов докладов.

**Личный вклад автора.** Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Автором были проведены все расчеты с применением гибридной континуально-атомистической модели и выполнена интерпретация полученных данных. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты, выводы и заключения получены лично автором.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из списка сокращений и обозначений, введения, обзора литературы, 3-х глав, заключения, 3-х приложений и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 153 страницы, включая 31 рисунок и 3 таблицы. Список литературы включает 170 наименований.

## Содержание работы

**Во введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

**В обзоре литературы** кратко рассматриваются различные подходы для моделирования воздействия фемтосекундных лазерных импульсов на вещество. Обсуждаются как двухтемпературные континуальные модели различных модификаций, так и метод молекулярной динамики (МД). Приведены преимущества и описаны недостатки континуальных методов и МД, описываются различные модификации гибридной модели с указанием их особенностей.

Значительную часть обзора литературы занимает рассмотрение экспериментов по изучению абляции металла, модификации поверхности и получению наночастиц вследствие воздействия короткоимпульсного лазерного излучения, а также обзор некоторых работ, в которых было проведено численное моделирование абляции вследствие такого воздействия.

**В первой главе** приведено краткое описание разработанной ранее одномерной двухтемпературной гидродинамической модели (ГДМ) [1, 2], затем рассказано о методе моделирования классической МД и об используемом в работе потенциале межчастичного взаимодействия [3], затем представлена **гибридная континуально-атомистическая модель** (ГиКАМ), объединяющая достоинства этих двух методов моделирования.

В ходе разработки ГиКАМ за основу была взята модель Иванова–Жигилея [4], которая была значительно усовершенствована:

1. Для электронов вместо уравнения теплопроводности решается уравнение энергии, которое учитывает перенос электронов вместе с ионами, при этом связь между энергией электронов и их температурой  $\epsilon_e(\rho, T_e)$  определяется согласно тепловой части полуэмпирического уравнения состояния (УрС), основанного на модели Томаса–Ферми [5] ( $\rho$  — плотность вещества,  $T_e$  — температура электронной подсистемы). Эволюция ионной подсистемы описывается уравнениями, предложенными Д. С. Ивановым и Л. В. Жигилеем в [4].
2. Поглощение лазерного излучения рассчитывается путем решения уравнений Гельмгольца для электромагнитного поля [6], что позволяет моделировать воздействие на металл со сложным профилем плотности как одиночных, так и двойных импульсов (этот вопрос обсуждается в главе 3).
3. Коэффициенты электронной теплопроводности  $\kappa_e(\rho, T_i, T_e)$  и электрон-фононного взаимодействия  $\gamma(\rho, T_i, T_e)$  рассчитываются с использованием широкодиапазонных моделей [2], а электронная теплоемкость  $c_e(\rho, T_e)$  вычисляется по широкодиапазонному УрС [5] ( $T_i$  — температура ионной подсистемы).



Ионная подсистема в ГиКАМ описывается системой модифицированных МД-уравнений:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{f}_i + \xi m_i \mathbf{v}_i^T, \text{ где } \xi = \frac{\gamma V (T_e - T_i)}{3k_B N T_i}. \quad (1)$$

Здесь  $m_i$  — масса  $i$ -го иона,  $\mathbf{r}_i$  — радиус-вектор его положения в трехмерном пространстве,  $t$  — время,  $\mathbf{f}_i$  — сила, действующая на этот ион со стороны остальных ионов,  $\mathbf{v}_i^T$  — его тепловая скорость (скорость в системе отсчета, связанной с центром масс ансамбля окружающих частиц),  $N$  — количество ионов в одной ячейке пространственной вычислительной сетки объемом  $V$ ,  $\xi$  — коэффициент трения, характеризующий влияние электронной жидкости на  $i$ -й ион, одинаковый для всех ионов в пределах одной ячейки сетки,  $k_B$  — постоянная Больцмана. Для интегрирования уравнений (1) в ГиКАМ используется алгоритм Верле, реализованный в виде программного кода на C++, включенного в программный комплекс LAMMPS [7]. Расчет сил производится по потенциалу, предложенному В. В. Жаховским и его коллегами в [3].

Для электронной жидкости в ГиКАМ решается одномерное уравнение энергии:

$$\frac{\partial(\rho\epsilon_e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho w\epsilon_e)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - \gamma(T_e - T_i) + S, \quad (2)$$

где  $\epsilon_e$  — удельная энергия свободных электронов,  $S = S(z, t)$  — объемный энерговклад (плотность мощности) от лазерного излучения,  $w$  — скорость в направлении оси  $z$ . Уравнение (2), решение которого производится на одномерной пространственной сетке, расщепляется по физическим процессам, связанным с макроскопическими и микроскопическими эффектами:

$$\frac{\partial(\rho\epsilon_e)}{\partial t} = -\gamma(T_e - T_i) + S, \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\rho\epsilon_e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho w\epsilon_e)}{\partial z} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial(\rho\epsilon_e)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial z} \right). \quad (5)$$

Уравнение (3) описывает изменение энергии электронов из-за обмена с ионами и поглощения лазерной энергии; эти процессы не связаны с макроскопическим движением вещества. В процессе моделирования после решения уравнения (3) производится шаг интегрирования уравнений (1) эволюции ионной подсистемы с помощью LAMMPS [7], в результате которого определяются новые координаты и скорости ионов. Затем решается уравнение (4) изменения

энергии свободных электронов, которые движутся вместе с ионами. Наконец, решается уравнение теплопроводности (5) по неявной схеме методом прогонки.

Временной шаг решения уравнений (1) и (2) в ГиКАМ — переменный: значение временного шага перед началом каждой следующей итерации моделирования вычисляется таким образом, чтобы одновременно выполнялись следующие критерии:

- за один временной шаг в каждой ячейке вычислительной сетки каждый ион должен передвигаться на расстояние, не превышающее 3% от среднего межйонного расстояния  $(r_{\text{int}})_j$  в этой ячейке:  $\Delta t^{\text{I}} = \min_j \{0.03(r_{\text{int}})_j / (v_{\text{max}})_j\}$ , где  $j$  — номер ячейки,  $(v_{\text{max}})_j$  — скорость наиболее быстро движущегося атома в этой ячейке;
- при лазерном нагреве за один временной шаг температура электронов должна возрасти не более, чем на 0.5% от ее текущего значения:  $\Delta t^{\text{II}} = \min_j \{0.005(c_e)_j \cdot (T_e)_j / S_j\}$ , где  $(c_e)_j$ ,  $(T_e)_j$ ,  $S_j$  — величины  $c_e$ ,  $T_e$  и  $S$ , соответственно, рассчитанные в ячейке  $j$ .

Решающим является тот критерий, который приводит к меньшей величине временного шага:  $\Delta t_{\text{MD}} = \min \{\Delta t^{\text{I}}, \Delta t^{\text{II}}\}$ .

Полный алгоритм моделирования, посредством которого реализована представленная в работе ГиКАМ, приведен в **Приложении А**.

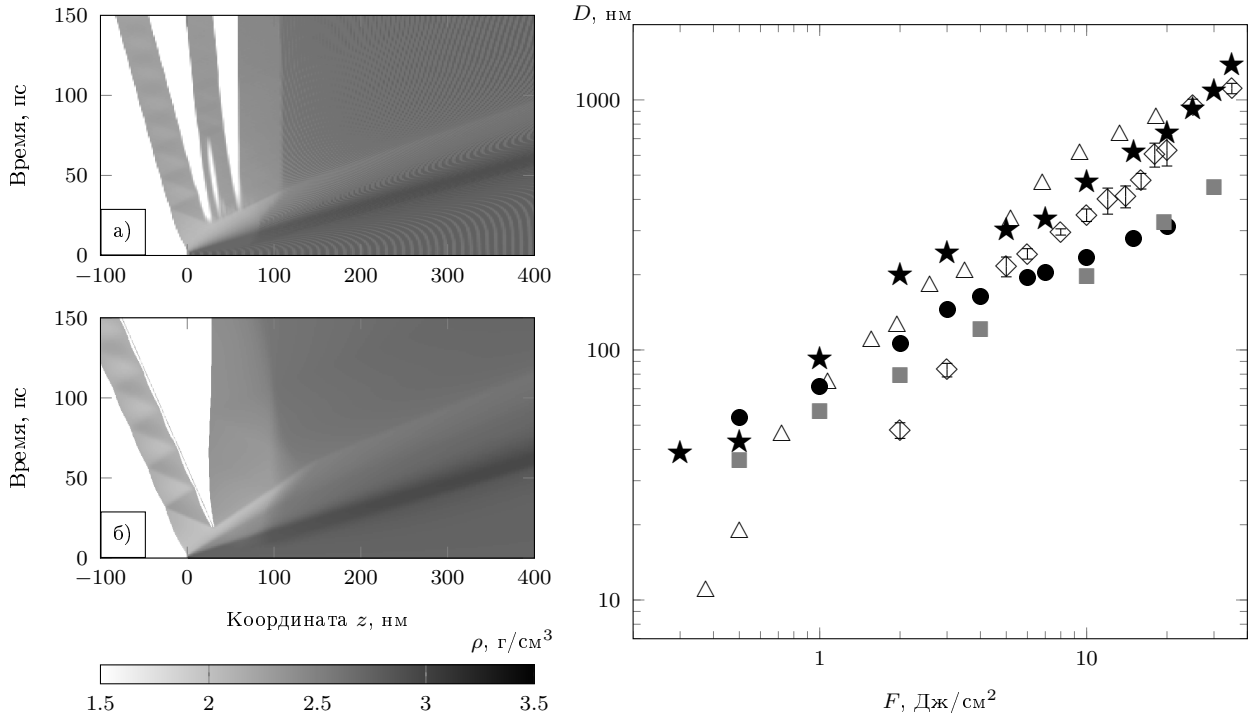
**Во второй главе** рассказывается о проверке ГиКАМ путем сравнения результатов, полученных с ее помощью, с результатами ГДМ [2].

Рассматривается воздействие одиночного фемтосекундного лазерного импульса на алюминиевую мишень.

Длина волны лазера 800 нм, длительность импульса  $\tau = 100$  фс. Временной профиль интенсивности импульса имеет гауссову форму:  $I(t) = I_0 \cdot 16^{-(t-t_0)^2/\tau^2}$ , где  $I_0$  — максимальная интенсивность,  $t_0 \geq 2$  пс — момент времени, на который приходится максимум интенсивности лазерного импульса. Значение интегральной плотности падающего излучения  $F$  ( $F \approx 1.0645 I_0 \tau$ ) устанавливалось из интервала от 0.1 до 20 Дж/см<sup>2</sup>.

При моделировании по ГиКАМ толщина мишени задавалась от 2 до 4 мкм, а площадь поперечного сечения —  $8 \times 8$  нм. Общее количество атомов в одном запуске (в зависимости от толщины мишени) составляло от  $\sim 8$  до  $\sim 16$  млн.

Диаграммы плотности в координатах  $z-t$ , рассчитанные с применением ГиКАМ и ГДМ и демонстрирующие развитие процесса абляции вследствие воздействия лазерного импульса с  $F = 0.5$  Дж/см<sup>2</sup>, приведены на рис. 1.



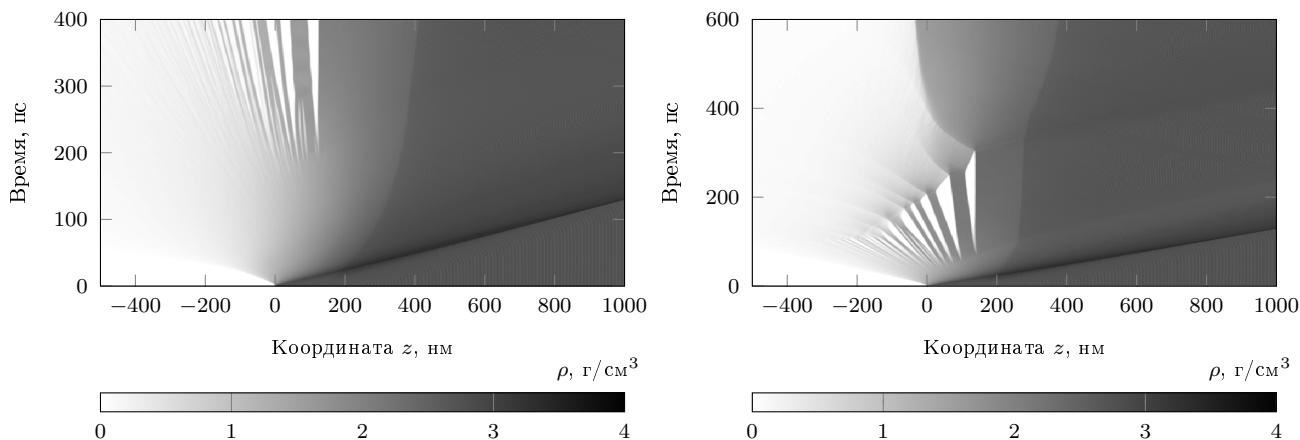
**Рис. 1.** Диаграммы плотности алюминия  $\rho$  в координатах  $z-t$  при  $F = 0.5$  Дж/см<sup>2</sup>. Расчеты произведены методами: а) — ГиКАМ, б) — ГДМ.

**Рис. 2.** Зависимость глубины абляции алюминия  $D$  от интегральной плотности падающего излучения  $F$ : ● — ГиКАМ, ■ — ГДМ, ◇ — эксперимент [8], △ — эксперимент [9]. Маркерами ★ обозначена глубина плавления в ГДМ.

Механический откол, который происходит в жидкой фазе, возникает в области встречи двух волн разгрузки (ВР), в этой области минимальное значение давления достигает  $-3$  ГПа. Формирование пустот завершается к моменту времени  $\approx 20$  пс в ГДМ и к  $\approx 40$  пс в ГиКАМ, затем образуется новая поверхность. ГиКАМ позволяет проанализировать количество атомов, покинувших мишень, что делает возможным определить толщину откола ( $\approx 54$  нм на рис. 1, а), которую можно отождествлять с глубиной абляционного кратера, полученного в эксперименте. ГиКАМ предсказывает скорость аблированного слоя  $\approx 0.5$  км/с, а ГДМ —  $\approx 1$  км/с.

В работе также рассматривается поведение алюминия под воздействием лазерного импульса с другими значениями  $F$  и приводится сравнение профилей температуры и давления в мишени после прохождения импульса, рассчитанных методами ГиКАМ и ГДМ, для различных  $F$ . Такое сравнение показывает качественное соответствие профилей как температуры, так и давления. Для  $F = 0.5$  Дж/см<sup>2</sup> обе модели предсказывают амплитуду зарождающейся ударной волны (УВ) около 7 ГПа, а затем давление падает до  $-3$  ГПа.

Глава завершается сравнением зависимости теоретически рассчитанной (с использованием ГиКАМ и ГДМ) глубины абляции алюминия от интеграль-



**Рис. 3.** Диаграмма плотности алюминия  $\rho$  в координатах  $z-t$  при  $\tau_D = 20$  пс.

**Рис. 4.** То же, что на рис. 3, только  $\tau_D = 100$  пс.

ной плотности падающего излучения с аналогичной зависимостью, полученной в экспериментальных работах: обсуждается график этой зависимости (рис. 2), на который нанесены как теоретически рассчитанные, так и экспериментально полученные точки. Наблюдается удовлетворительное согласование расчетных значений с экспериментом.

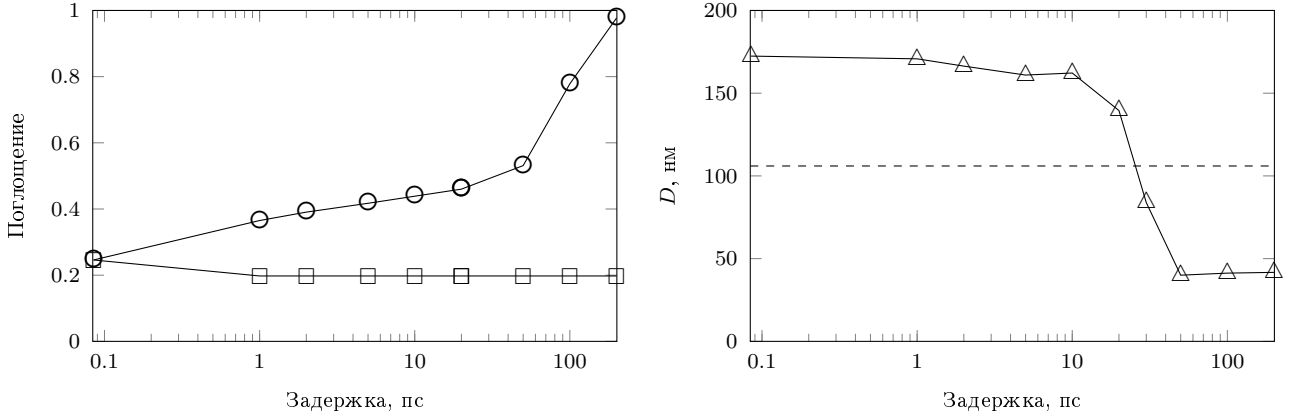
Точные значения глубины абляции, рассчитанные с использованием ГиКАМ для различных значений  $F$ , приведены в виде таблицы в **Приложении Б**.

В **третьей главе** приводится описание результатов моделирования воздействия двойного лазерного импульса на алюминиевую мишень посредством ГиКАМ и обсуждается картина абляции алюминия в результате такого воздействия.

Параметры задачи аналогичны постановке для одиночного импульса из главы 2, отличается лишь временной профиль лазерного импульса — теперь он состоит из двух следующих друг за другом гауссовых импульсов. Интегральная плотность излучения каждого импульса  $F = 2$  Дж/см<sup>2</sup>, временной промежуток между импульсами (задержка)  $\tau_D$  варьируется от 0 до 200 пс.

В работе приводится анализ динамики абляции при задержках  $\tau_D = 0, 10, 20, 50, 100$  и 200 пс, для каждого из этих значений приводятся  $z-t$ -диаграммы основных термодинамических параметров вещества мишени — плотности, температуры, давления.

На рис. 3 представлена  $z-t$ -диаграмма плотности в случае  $\tau_D = 20$  пс. При такой задержке второй импульс поглощается в области  $-100 \lesssim z \lesssim 0$  нм. Динамика абляции ослабевает по сравнению с динамикой при меньших задержках: ВР более слабая, момент откола наступает позднее, а толщина аблированного вещества уменьшается, хотя глубина расплавленного слоя (350 нм)



**Рис. 5.** Зависимость интегрального поглощения первого ( $\square$ ) и второго ( $\circ$ ) импульсов от  $\tau_D$ . Интегральная плотность излучения каждого импульса  $2 \text{ Дж/см}^2$ .

**Рис. 6.**  $\triangle$  — зависимость глубины абляции алюминия  $D$  от  $\tau_D$ . Пунктирная линия — глубина абляции после воздействия одиночного импульса с  $F = 2 \text{ Дж/см}^2$ .

остается той же самой, что и в случае 0- и 10-пс задержки. Такие эффекты являются следствием первого механизма подавления абляции, который доминирует при  $\tau_D \lesssim 20$  пс, приводя к монотонному уменьшению глубины абляционного кратера: этот механизм связан с подавлением ВР (формирующейся после прохождения первого импульса), он отвечает за процесс гомогенной нуклеации в жидком слое мишени под действием растягивающего напряжения.

Когда  $\tau_D$  возрастает до 50 пс, подключается второй механизм подавления лазерной абляции. При  $\tau_D = 50$  пс второй импульс поглощается в плазменном плюме в области  $-300 \lesssim z \lesssim -100$  нм, и в этой области формируется вторая УВ, которая проходит сквозь аблированные слои и вызывает схлопывание полостей. Слои меняют направление своего движения на противоположное и осаждаются обратно на мишень, уменьшая глубину абляции. Аналогичный эффект более ярко выражен в случае задержки 100 пс (рис. 4), когда максимум поглощения энергии второго импульса сдвигается в область с  $z \approx -500$  нм. В этом случае заметен процесс ликвидации фрагментации, вызванной первым импульсом; также можно отметить, что осаждение слоев на мишень приводит к дополнительному ее плавлению, поскольку осаждающиеся слои имеют температуру, намного превышающую температуру плавления алюминия.

На рис. 5 показана зависимость интегрального поглощения энергии второго импульса от задержки между импульсами. Вторым импульс поглощается плазменным плюмом, возникающим после воздействия первого импульса. Заметно, что с ростом задержки от 0 до 200 пс растет доля поглощенной энергии от  $\approx 25\%$  до  $98\%$ . В результате более эффективного поглощения электронная

температура в плюме с ростом задержки возрастает почти в три раза. Такой рост электронной температуры приводит к значительному повышению светимости плюма, что было зафиксировано в эксперименте.

На рис. 6 приведена полученная в работе зависимость глубины абляции от длительности задержки между импульсами. С ростом задержки глубина абляции монотонно уменьшается и при задержках, больших 30 пс, достигает значений, меньших, чем после одноимпульсного воздействия. Аналогичный эффект наблюдался в эксперименте [10, 11].

Точные значения глубины абляции, рассчитанные с использованием ГиКАМ для различных значений  $\tau_D$ , приведены в виде таблицы в **Приложении В**.

**В заключении** сформулированы основные результаты работы:

1. Создана улучшенная версия гибридного метода — ГиКАМ — путем развития модели Иванова–Жигилея. ГиКАМ позволяет более реалистично моделировать воздействие на металл как одиночного импульса высокой интенсивности (по сравнению с порогом абляции), так и двойного импульса.
2. ГиКАМ удовлетворительно согласуется как с гидродинамическим моделированием, так и с экспериментальными данными в широком диапазоне интегральной плотности падающего излучения лазера, от 0.1 до 20 Дж/см<sup>2</sup>.
3. ГиКАМ требует значительных вычислительных ресурсов, но эта модель точно воспроизводит все процессы на атомарном уровне, в том числе динамику фрагментации мишени и нуклеацию в метастабильной жидкой фазе.
4. При двухимпульсном воздействии эффективность поглощения второго импульса изменяется от 25% при задержке между импульсами 0 пс до 98% при задержке 200 пс.
5. При задержках  $\gtrsim 20$  пс наблюдается эффект экранирования плазмой, и второй импульс не достигает мишени, что подтверждается в эксперименте.
6. С ростом задержки между импульсами от минимальной до 100–200 пс наблюдается увеличение электронной температуры плюма, что объясняет рост светимости плюма, зафиксированный в эксперименте.
7. Уменьшение глубины кратера, наблюдаемое и в эксперименте, и в моделировании, происходит в случае задержек  $\lesssim 20$  пс из-за подавления фрагментации в волне разгрузки, вызванной первым импульсом, а в случае задержек  $\gtrsim 50$  пс — из-за осаждения внутренних аблированных слоев ионов вещества обратно на мишень.

Материалы диссертации опубликованы в работах [12–17].

## Цитированная литература

1. Povarnitsyn M. E., Itina T. E., Khishchenko K. V., Levashov P. R. Multi-material two-temperature model for simulation of ultra-short laser ablation // *Applied Surface Science*. 2007. Vol. 253, no. 15. P. 6343–6346.
2. Povarnitsyn M. E., Andreev N. E., Apfelbaum E. M. et al. A wide-range model for simulation of pump-probe experiments with metals // *Applied Surface Science*. 2012. Vol. 258, no. 23. P. 9480–9483.
3. Zhakhovskii V. V., Inogamov N. A., Petrov Y. V. et al. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // *Applied Surface Science*. 2009. Vol. 255, no. 24. P. 9592–9596.
4. Ivanov D. S., Zhigilei L. V. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films // *Physical Review B*. 2003. Vol. 68, no. 6. P. 064114.
5. Shemyakin O. P., Levashov P. R., Obruchkova L. R., Khishchenko K. V. Thermal contribution to thermodynamic functions in the Thomas–Fermi model // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2010. Vol. 43, no. 33. P. 335003.
6. Povarnitsyn M. E., Andreev N. E., Levashov P. R. et al. Dynamics of thin metal foils irradiated by moderate-contrast high-intensity laser beams // *Physics of Plasmas*. 2012. Vol. 19, no. 2. P. 023110.
7. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammps.sandia.gov>.
8. Colombier J. P., Combis P., Bonneau F. et al. Hydrodynamic simulations of metal ablation by femtosecond laser irradiation // *Physical Review B*. 2005. Vol. 71, no. 16. P. 165406.
9. Hashida M., Semerok A. F., Gobert O. et al. *Ablation thresholds of metals with femtosecond laser pulses* // Nonresonant Laser-Matter Interaction (NLMI-10) / Ed. by M. N. Libenson. Vol. 4423. The International Society for Optical Engineering (SPIE), 2001. P. 178–185.
10. Semerok A., Dutouquet C. Ultrashort double pulse laser ablation of metals // *Thin Solid Films*. 2004. Vol. 453-454. P. 501–505.
11. Donnelly T., Lunney J. G., Amoroso S. et al. Double pulse ultrafast laser ablation of nickel in vacuum // *Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 106, no. 1. P. 013304.

## Список публикаций

12. Fokin V. B., Povarnitsyn M. E., Levashov P. R. Simulation of ablation and plume dynamics under femtosecond double-pulse laser irradiation of aluminum: Comparison of atomistic and continual approaches // [Applied Surface Science](#). 2017. Vol. 396. P. 1802–1807.
13. Minakov D. V., Levashov P. R., Fokin V. B. Vibrational spectrum and entropy in simulation of melting // [Computational Materials Science](#). 2017. Vol. 127. P. 42–47.
14. Povarnitsyn M. E., Fokin V. B., Levashov P. R. Microscopic and macroscopic modeling of femtosecond laser ablation of metals // [Applied Surface Science](#). 2015. Vol. 357. P. 1150–1156.
15. Povarnitsyn M. E., Fokin V. B., Levashov P. R., Itina T. E. Molecular dynamics simulation of subpicosecond double-pulse laser ablation of metals // [Physical Review B](#). 2015. Vol. 92, no. 17. P. 174104.
16. Фокин В. Б., Поварницын М. Е., Левашов П. Р. Континуально-атомистическое моделирование абляции и образования наночастиц при воздействии фемтосекундного лазерного импульса на тонкие фольги // Вестник Казанского технологического университета. 2014. Т. 17, № 22. С. 55–58.
17. Фокин В. Б., Поварницын М. Е., Левашов П. Р., Хищенко К. В. Континуально-атомистическое моделирование лазерной абляции алюминия // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2014. Т. 4, № 1. С. 60–65.



