

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединённый
Институт Высоких Температур Российской Академии Наук

На правах рукописи

Перов Евгений Александрович

**Молекулярно-динамическое моделирование воздействия
коротких и ультракоротких лазерных импульсов на
кристаллическую структуру твердого вещества**

Специальность 1.3.14 —
«Теплофизика и теоретическая теплотехника»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук
Долуденко Алексей Николаевич

Москва — 2025

Оглавление

Стр.

Введение	5
Глава 1. Обзор литературы	14
Глава 2. Объекты исследований и методы моделирования.	22
2.1 Математические методы моделирования	22
2.1.1 Молекулярная динамика	22
2.1.1.1 Описание классического метода молекулярной динамики.	23
2.1.1.2 Численные методы решения уравнений молекулярной динамики.	25
2.1.1.3 Сравнение молекулярной динамики и гидродинамики.	27
2.1.1.4 Получение континуальных величин в молекулярной динамике.	28
2.2 Описание проведения расчетов	30
2.2.1 Расчетная схема	31
2.2.2 Кристаллическая решетка	31
2.2.2.1 Трансляции и кристаллические решетки	32
2.2.2.2 Операции симметрии	32
2.2.2.3 Базис и кристаллическая структура	33
2.2.2.4 Прimitives ячейки кристаллической решетки	34
2.2.2.5 Кристаллические решетки исследуемых материалов	35
2.2.2.6 Ориентация плоскостей в кристаллах	35
2.2.3 Термостат	38
2.2.4 Потенциалы взаимодействия	41
2.2.4.1 Краткое описание потенциалов взаимодействия	42
2.2.4.2 Потенциалы взаимодействия исследуемых материалов	43
2.2.5 Декомпозиция расчетной области и параллелизация	47
2.2.5.1 Разбиение расчетной области на ячейки Вороного	48
2.2.5.2 Библиотека MPI	50

Глава 3. Численное исследование воздействия ультракороткого лазерного импульса на алюминий	52
3.1 Сравнительный анализ двумерных плоской и осесимметричной геометрий	52
3.2 Моделирование модификации кристалла алюминия	55
3.2.1 Постановка задачи	55
3.2.2 Молекулярно-динамическое моделирование модификации алюминия лазерной ударной волной при разных температурах образца	57
3.2.3 Молекулярно-динамическое моделирование модификации кристалла алюминия лазерной ударной волной (при температуре образца 850 К)	59
3.2.4 Сравнительный анализ влияния различной вложенной энергии на процесс модификации алюминия лазерной ударной волной	60
3.3 Влияние граничных условий на модификацию алюминия лазерной ударной волной	63
3.3.1 Молекулярно-динамическое моделирование при поглощающих граничных условиях	63
3.3.2 Молекулярно-динамическое моделирование при периодических граничных условиях	65
Глава 4. Исследование образования полости в кристалле фторида лития под действием жесткого рентгеновского излучения	67
4.1 Потенциал взаимодействия для фторида лития	67
4.2 Эксперимент с образованием полости	70
4.3 Образование полости в плоскости, перпендикулярной лучу нагрева	71
4.3.1 Постановка задачи	72
4.3.2 Результаты моделирования процесса образования полости в перпендикулярной плоскости	73
4.4 Образование полости в плоскости, расположенной вдоль луча нагрева	75
4.4.1 Постановка задачи	75

4.4.2	Результаты моделирования процесса образования полости в перпендикулярной плоскости	76
Глава 5. Пластическое термоциклирование поликристалла меди лазерными импульсами		
5.1	Оптикопластический эффект	82
5.1.1	Проявление оптикопластического эффекта в эксперименте	82
5.1.2	Проявление оптикопластического эффекта в эксперименте	83
5.2	Молекулярно-динамическое моделирование оптикопластического эффекта у поликристалла меди	84
5.2.1	Постановка задачи	84
5.2.2	Первичная подготовка поликристалла перед облучением .	85
5.2.3	Эволюция приповерхностного слоя	86
5.2.4	Динамика сдвиговых напряжений в поликристалле меди .	88
Заключение		93
Список литературы		95

Введение

Актуальность. В последние десятилетия развитие лазерных технологий открыло новые перспективы в области модификации и обработки материалов на микро- и наноуровне. Особый интерес представляют короткие (наносекундные) и ультракороткие (фемтосекундные) лазерные импульсы, которые позволяют осуществлять высокоточное воздействие на твердотельные структуры, а в случае фемтосекундных импульсов ещё и без значительного теплового повреждения окружающих областей. Такие импульсы вызывают сложные процессы, которые приводят к структурным модификациям в кристаллических решетках.

Исследование механизмов взаимодействия коротких и ультракоротких лазерных импульсов с твердыми телами является актуальной задачей как для фундаментальной науки, так и для практических приложений. В частности, понимание этих процессов необходимо для разработки новых методов лазерной микрообработки, создания наноструктурированных материалов, а также для применения в фемтосекундной оптике, фотонике и квантовых технологиях.

Однако, экспериментальное изучение динамики атомных и электронных процессов при лазерном воздействии сопряжено с существенными трудностями из-за экстремально малых временных и пространственных масштабов явлений. В этой связи молекулярно-динамическое моделирование становится мощным инструментом, позволяющим детально исследовать эволюцию кристаллической структуры под действием лазерного излучения, включая такие сложные физические процессы, как фазовые переходы, образование дефектов в кристаллической решетке и плавление.

Актуальность настоящего исследования обусловлена необходимостью разработки теоретических и вычислительных подходов для описания нестационарных процессов в твердых телах при воздействии коротких и сверхкоротких лазерных импульсов. Полученные результаты могут внести вклад в понимание механизмов лазерно-индуцированных структурных изменений и способствовать оптимизации параметров лазерной обработки для новых технологических приложений.

Целями данной работы являются:

1. Моделирование и анализ воздействия ультракоротких лазерных импульсов на кристаллические материалы разного рода (алюминий, медь, фторид лития) с учетом вариаций параметров импульса (длительности, вложенной энергии, пространственного профиля) и характеристик образцов (кристаллографической ориентации, количества зерен в кристалле, природы материала). Комплексное изучение воздействия позволит выявить механизмы модификаций кристаллической структуры, вызванные лазерным излучением.
2. Установление количественных закономерностей модификации кристаллической решетки в монокристаллическом алюминии и исследование зависимости глубины пластически деформированного слоя от параметров лазерного воздействия (вложенной энергии) и термомеханических свойств материала. Результаты могут лечь в основу прогностических моделей для управления глубиной модификации при лазерной обработке материала.
3. Изучение динамики образования цилиндрической полости в кристалле фторида лития (LiF) под действием лазерного излучения в рентгеновском диапазоне. Акцент делается на анализе образования и роста полости внутри материала. Это направление имеет значение для разработки радиационно-стойких оптических материалов.
4. Исследование механизма рельефообразования в поликристаллической меди при многократном термоциклировании наносекундными импульсами. Ключевыми аспектами анализа являются роль границ зерен, накопление пластических деформаций и формирование поверхностных структур.

Для достижения поставленных целей необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Проведение серии атомистических моделирований методом молекулярной динамики (МД) с использованием высокопроизводительных вычислений. Моделирование включало:
 - а) Построение вычислительных моделей для каждого материала (Al, Cu, LiF) с учетом их кристаллической структуры и термодинамических свойств.

- б) Выбор и адаптацию потенциалов межатомного взаимодействия, адекватно описывающих поведение материалов при высоких темпах нагрева и деформации.
 - в) Имитацию воздействия лазерных импульсов различной длительности (фемто- и наносекундного диапазона).
2. Обработка и систематизация результатов МД-моделирования, включая:
- а) Автоматизированный анализ временных рядов атомных конфигураций (распределения температуры, напряжений, дефектов кристаллической решетки) с использованием специализированных программных инструментов.
 - б) Построение количественных зависимостей (глубина деформированного слоя от энергии импульса, диаметр поры от времени моделирования, величина сдвиговых напряжений от стадии термоциклирования) с оценкой статистической значимости результатов.
3. Сопоставление предсказанных МД-моделью параметров (топография поверхности, размеры пор, глубина залегания пластических деформаций) с данными, полученными экспериментальным путем (электронной микроскопией).

Научная новизна:

1. Установление взаимосвязи между динамикой ударных волн и пороговыми параметрами лазерного воздействия в монокристаллическом алюминии:
- а) Методом молекулярной динамики изучена эволюция ударных волн, генерируемых ультракороткими лазерными импульсами, с учетом анизотропии кристаллической решетки (направления $[100]$, $[110]$, $[111]$).
 - б) Определены критические значения вложенной энергии импульса, необходимые для инициирования необратимой пластической деформации. Показано, что пороговые значения энергии существенно зависят от начальной температуры кристалла.

2. Исследование механизма образования цилиндрических полостей в кристалле LiF при рентгеновском лазерном воздействии:
 - а) Экспериментально наблюдаемые цилиндрические полости в ионных кристаллах интерпретированы при помощи молекулярно-динамического моделирования. Их форма обусловлена цилиндрической ударной волной, расходящейся от оси прогрева.
 - б) Обнаружено, что процесс происходит в две стадии: сначала, в жидком состоянии системы, за наносекунды образуются пустоты, а затем они объединяются в более крупные поры под действием термоупругих напряжений в процессе кристаллизации.
3. Определение механизма формирования лазер-индуцированного нанорельефа поликристаллической меди, основанный на кумулятивном эффекте термоциклирования:
 - а) Показано, что многократное наносекундное воздействие приводит к миграции границ зерен вследствие термоактивированного скольжения дислокаций и дислокационной релаксации напряжений, связанных с анизотропией теплового расширения различно ориентированных зерен.
 - б) Наблюдается накопительный эффект пластической деформации материала в процессе термоциклирования.

Практическая значимость. Результаты диссертационной работы обладают прикладным потенциалом в различных областях высокотехнологичных производств и научно-технических разработок:

1. Улучшение процесса лазерной обработки алюминия:
 - а) Установленные закономерности формирования пластически деформированного слоя в монокристаллическом алюминии позволяют контролировать глубину модификации материала при лазерной резке, гравировке и упрочнении. Это способствует созданию деталей с повышенной механической стабильностью и износостойкостью (например, в авиационной промышленности).
 - б) Определение пороговых энергий для необратимой деформации решетки минимизирует риск термического повреждения

окружающих областей, что повышает точность обработки тонкослойного материала.

2. Разработка радиационно-стойких оптических материалов на основе фторида лития:

- а) Выявленный механизм образования полости под действием лазерного излучения в рентгеновском диапазоне энергий позволяет прогнозировать деградацию оптических элементов в экстремальных условиях (например, в космических аппаратах).
- б) Полученные данные могут быть использованы для создания LiF-структур с управляемой плотностью дефектов, что актуально при создании дифракционных решеток, сцинтилляторов и УФ-оптики с повышенным ресурсом эксплуатации.

3. Сохранение оптических характеристик медных зеркал при экстремальных тепловых режимах:

- а) Результаты исследования механизма рельефообразования в поликристаллической меди позволяют разработать режимы лазерной обработки, направленные на минимизацию деградации поверхности. Это важно для медных зеркал, используемых в высокоэнергетических лазерных системах, где даже незначительное образование рельефа приводит к снижению отражательной способности
- б) Установленные закономерности влияния термоциклирования на миграцию границ зерен и накопление остаточных напряжений помогают прогнозировать долговременную стабильность зеркал в условиях повторяющегося термического воздействия. Это способствует созданию приповерхностного слоя, менее подверженному к рекристаллизации.

Методология и методы исследования. Работа основывается на методе классической молекулярной динамики (МД), который заключается в численном решении уравнений движения Ньютона для системы атомов. Эволюция моделируемых кристаллов во времени рассчитывалась с помощью дискретных временных шагов, на каждом из которых силы взаимодействия между частицами определялись с помощью потенциальной функции, описывающей взаимодействие, характерное для конкретного материала. В специальной

программе для расчетов [1] реализован эффективный алгоритм параллельных вычислений, что позволило моделировать системы, содержащие до полутора десятков миллионов атомов. Все расчеты выполнялись на мощном вычислительном кластере. Ключевое преимущество метода – атомистическое описание процессов, что исключает приближения сплошных сред и обеспечивает точность при анализе наноразмерных эффектов.

Ограничения классического метода:

1. Игнорирование квантовых эффектов — неприменимость для систем, где квантовые эффекты играют большую роль (сверхмалые расстояния между атомами, сверхбыстрые процессы, экстремально низкие и высокие температуры).
2. Вычислительные ресурсы — ограничение размеров моделируемых областей (порядка микрометра) и временных масштабов (порядка десятков наносекунд), что требует оптимизации условий и параметров моделирования.

Несмотря на ограничения, метод МД остаётся ключевым инструментом для изучения лазер-индуцированных процессов в кристаллах, дополняя экспериментальные данные микроскопической картиной эволюции дефектов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Исследование эволюции ударной волны в монокристалле алюминия при различных начальных условиях. Рассмотрены различные начальные условия, такие как величина вложенной энергии, ориентация кристаллической решетки относительно направления распространения волны, а также влияние температуры системы. Полученные данные позволили определить результат воздействия ударной волны на кристаллическую решетку.
2. Механизм образования полости в кристалле фторида лития при лазерном воздействии в рентгеновском диапазоне энергии, описываемый кинетикой зарождения и коалесценции пустотных кластеров (кавитационных пузырьков) с учетом анизотропии диссипации энергии в ионной решетке на основе данных молекулярно-динамического моделирования.
3. Модель рельефообразования в поликристаллической меди при термоциклировании наносекундными лазерными импульсами, учитывающая миграцию границ зерен, накопление остаточных напряжений и форми-

рование структур на поверхности в рамках атомарного подхода с явным описанием термомеханических свойств материала.

Достоверность полученных результатов подтверждается их согласованностью с данными реальных экспериментальных исследований. Результаты моделирования характеризуются высокой степенью обоснованности с учетом допущений и ограничений, присущих используемому методу атомистического моделирования. Несмотря на то, что численные эксперименты проводились на относительно малых пространственно-временных масштабах, принятые физические модели позволяют с достаточной уверенностью экстраполировать полученные закономерности на более крупные системы и длительные временные интервалы. Полученные данные согласуются с результатами, представленными в литературе и полученными независимыми исследовательскими группами, что дополнительно подтверждает корректность и воспроизводимость проведенного моделирования.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на:

1. XXII Международная конференция по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2021) 4-13 сентября 2021, г. Алушта, Крым;
2. Восьмая Российская национальная конференция по теплообмену (РНКТ-8), Москва, 17-22 октября 2022 года;
3. VIII Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии» ЛаПлаз-2022, посвященная 100-летию со дня рождения лауреата Нобелевской премии по физике Басова Николая Геннадиевича, 22 марта - 25 марта 2022 г.;
4. VII Всероссийская научная конференция «Теплофизика и физическая гидродинамика» с элементами школы молодых учёных, г. Сочи, 5-14 сентября 2022 г.;
5. XIII Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике, Санкт-Петербург, 21–25 августа 2023 года;
6. XXIII Международная конференция по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2023) 4-10 сентября 2023, г. Алушта, Крым;
7. XXXIX Фортовская международная конференция "Уравнения состояния вещества Терскол, Кабардино-Балкария, 1 - 6 марта 2024 года;

8. XXIII Всероссийская конференция "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений". пос. Вишневка, пансионат МГУ "Буревестник 20 сентября 2024 г.- 29 сентября 2024 г.;
9. XIII Международная конференция "Фазовые превращения и прочность кристаллов"(ФППК-2024) памяти академика Г.В. Курдюмова 28 октября – 1 ноября 2024 г., г. Черноголовка, Россия;
10. XXXX Фортовская международная конференция "Уравнения состояния вещества Терскол, Кабардино-Балкария, 1 - 6 марта 2025 года.

Личный вклад. Автор диссертационной работы самостоятельно проводил численные эксперименты с использованием методов атомистического моделирования. Постановки задач и согласование с экспериментальными данными проводились совместно с соавторами. В рамках исследований были реализованы алгоритмы подготовки исходных моделей, задания граничных и начальных условий, выбора подходящих потенциалов межатомного взаимодействия, а также проведены расчёты на высокопроизводительных вычислительных системах. Автор самостоятельно проводил обработку данных, включая результаты моделирования, построение зависимостей, визуализацию структурных изменений. Анализ и интерпретация физических процессов проводились совместно с соавторами.

В процессе подготовки публикаций автор как самостоятельно, так и в коллективе авторов, оформлял текстовые разделы, посвященные методике атомистического моделирования, описанию модельных подходов, а также в формулировке выводов на основе проанализированных данных. Научное осмысление и общее направление исследований определялись совместно в рамках коллектива исполнителей.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 17 печатных изданиях, 5 из которых изданы в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, а также рекомендованных ВАК; 12 — в тезисах докладов. Публикации, изданные в периодических журналах:

1. V. Shepelev, Yu. Petrov, N. Inogamov, V. Zhakhovsky, E. A. Perov, S. Fortova. *Attenuation and inflection of initially planar shock wave generated by femtosecond laser pulse*. Optics and Laser Technology, vol. 152, p. 108100, 2022. DOI: [10.1016/j.optlastec.2022.108100](https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2022.108100).
2. N. Inogamov, E. Perov, V. Zhakhovsky, V. Shepelev, Yu. Petrov, S. Fortova. *Laser Shock Wave: The Plasticity and Thickness of the Residual*

- Deformation Layer and the Transition from the Elastoplastic to Elastic Propagation Mode*. JETP Letters, vol. 115, pp. 71–78, 2022. DOI: [10.1134/S0021364022020047](https://doi.org/10.1134/S0021364022020047).
3. E. A. Perov, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, V. V. Shepelev, S. V. Fortova, A. N. Doludenko. *Молекулярно-динамическое моделирование модификации алюминия лазерной ударной волной*. Математическое моделирование и численные методы, no. 4, pp. 74–92, 2023.
 4. I. V. Nelasov, S. S. Manokhin, Yu. R. Kolobov, V. V. Zhakhovsky, E. A. Perov, Yu. V. Petrov, Yu. V. Khomich, T. V. Malinsky, N. A. Inogamov, V. E. Rogalin. *Эволюция микроструктуры приповерхностного слоя меди при термоциклировании лазерными импульсами наносекундной длительности*. Журнал экспериментальной и теоретической физики, vol. 167, no. 6, pp. 782–797, 2025.
 5. S. S. Makarov, S. A. Grigoryev, V. V. Zhakhovsky, P. Chuprov, T. A. Pikuz, N. A. Inogamov, V. V. Khokhlov, Yu. V. Petrov, E. Perov, V. Shepelev, T. Shobu, A. Tominaga, L. Rapp, A. V. Rode, S. Juodkazis, M. Makita, M. Nakatsutsumi, T. R. Preston, K. Appel, Z. Konopkova, V. Cerantola, E. Brambrink, J.-P. Schwinkendorf, I. Mohacsi, V. Vozda, V. Hajkova, T. Burian, J. Chalupský, L. Juha, N. Ozaki, R. Kodama, U. Zastrau, S. A. Pikuz. *Formation of high-aspect-ratio nanocavity in LiF crystal using a femtosecond of x-ray FEL pulse*. arXiv: [2409.03625](https://arxiv.org/abs/2409.03625) [physics.plasm-ph], 2024.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения. Полный объём диссертации составляет 115 страниц, включая 41 рисунок и 1 таблицу. Список литературы содержит 214 наименований.

Глава 1. Обзор литературы

Развитие лазерных технологий за последние десятилетия существенно повлияло на фундаментальную науку и инженерию, открыв новые возможности для модификации материалов и создания инновационных решений. Многие направления, связанные с применением лазеров, уже выделились в самостоятельные научные или технологические дисциплины. Особое внимание уделяется таким областям, как лазерное структурирование поверхностей [2—9], включая формирование лазерно-индуцированных периодических структур [10], а также аддитивные технологии, например, селективное лазерное плавление, которые активно используются в современной промышленности [11; 12]. Кроме того, значительный интерес вызывает метод лазерной абляции в жидкости, позволяющий эффективно получать наночастицы различного типа [13—27].

Одним из перспективных направлений является лазерное ударное упрочнение, реализуемое с помощью наносекундных лазерных импульсов [28—32]. Этот метод предполагает использование защитного покрытия и облучения через воду, что позволяет значительно повысить долговечность металлических деталей. По данным компании LSP Technologies [33], срок службы изделий увеличивается в 2–5 раз при затратах, не превышающих 1% от их стоимости. Лазерное упрочнение также снижает риск образования микротрещин и повышает сопротивляемость материала усталостным нагрузкам. Поскольку микротрещины чаще всего зарождаются на поверхности, её упрочнение становится ключевым фактором для повышения надежности деталей. Принципы лазерного ударного упрочнения тесно связаны с процессами лазерной абляции в жидкостях [29; 30], так как вода используется для усиления воздействия на материал.

В последние годы в ряде работ [34—38] было предложено и успешно протестировано применение фемтосекундных лазерных импульсов для лазерного ударного упрочнения. Важно отметить, что этот метод реализуется без использования защитной ленты и воды, что принципиально отличает его от традиционного лазерного упрочнения с использованием наносекундных импульсов. Тем не менее, физические механизмы, лежащие в основе упрочнения с использованием фемтосекундных импульсов, всё ещё остаются недостаточно

изученными, несмотря на то, что пластические деформации, вызванные ударным воздействием, давно и подробно изучаются в машиностроении [39].

Давление, создаваемое фемтосекундным лазерным импульсом, существенно превышает величину давления, получаемую при использовании наносекундных импульсов. При этом в процессе с фемтосекундными импульсами не используются ни защитные покрытия, ни вода, поскольку нагревания слоя материала-мишени происходит почти изохорически (очень быстро). Наличие воды не оказывает влияния на эволюцию лазерной ударной волны, которая обеспечивает упрочнение материала. Более того, удаление водяного слоя позволяет достичь более интенсивного освещения поверхности, так как порог оптического пробоя воздуха выше, чем у жидкости. В работе [40] более подробно объясняется, почему отпадает необходимость в использовании воды как защитного слоя. Объяснение основано на теории волн Римана и на том факте, что волна имеет треугольную форму.

Поскольку эффект упрочнения материала напрямую связан с величиной напряжений в приповерхностном слое, расчет пространственной эволюции напряжений в индуцированной лазером ударной волне в металлах имеет первостепенное значение. Сильные ударные волны разделяются на пластическую ударную волну и упругую с давлением ниже P_{HEL} , которое называется пределом упругости Гюгонио [41—44]. В отличие от ударных волн большой длительности, характеризующихся относительно низким значением P_{HEL} в упругом предвестнике, сверхкороткие ударные волны, генерируемые фемтосекундными лазерными импульсами, создают значительно более сильный упругий предвестник [45—50]. Такое мощное упругое сжатие становится возможным благодаря крайне короткой длительности нагружения.

Упругая волна, проходящая через металл, не создает модификаций [51; 52], в отличие от пластической ударной волны, которая приводит к необратимым деформациям твердого тела. Именно такие остаточные деформации играют ключевую роль в процессе ударного упрочнения. Для инициирования процесса упрочнения необходимо создать сдвиговое напряжение, превышающее предел текучести материала. Это является пороговым условием для создания пластических деформаций [40]. В этой работе на примере кристалла алюминия рассматривается определения порога вложенной энергии, после которой начинаются пластические деформации в веществе.

Интенсивно развивающаяся область исследований, направленная на поиск новых способов формирования наноканалов с высоким соотношением длины к диаметру (более 1000), обусловлена запросом на создание нового поколения нанофлюидных аналитических инструментов для биологических применений [53—55]. Наносистемы, состоящие из массивов плотно упакованных наноканалов, обладают значительным потенциалом для обеспечения точного и высокоселективного молекулярного транспорта, а также высокочувствительного анализа на уровне отдельных клеток и молекул [56—58]. Небольшие объемы образцов на наноуровне, необходимые для диагностики, такие как картирование и разделение ДНК, растущий спрос на технологии высокопроизводительного скрининга и передовые лаборатории-на-чипе, являются основными движущими силами поиска новых экономически эффективных методов изготовления. Эти методы должны обеспечивать меньшие поперечные сечения каналов, более высокую точность и воспроизводимость устройств [54; 57—59].

С фундаментальной точки зрения химические реакции, синтетическая химия и динамика белков в наноканалах существенно отличаются от их аналогов в более крупных каналах. Некоторые транспортные свойства жидкостей, находящихся в ограниченном пространстве наноканалов, демонстрируют значительные отклонения от значений в объемной фазе. К таким свойствам относятся коэффициент диффузии, сдвиговая вязкость и теплопроводность [60; 61]. Уникальные особенности течения жидкости в наноканалах включают нелинейный перенос за счет поверхностного заряда на границе раздела раствора и стенки наноканала, кулоновскую блокаду и сверхбыстрый перенос воды [62; 63]. Новые электрохимические явления открывают возможности для исследования фундаментальных законов физики и химии в наномасштабе, новых принципов физики жидкостей и механизмов, управляющих переносом вещества в наноканалах [62; 64; 65].

Среди различных технологий изготовления наноканалов сверхбыстрая лазерная обработка занимает особое место благодаря своей гибкости, универсальности, высокой точности и возможности трехмерного формирования структур [66—68]. Сверхбыстрые лазеры представляют собой категорию импульсных лазеров с ультракороткой длительностью импульса — от нескольких пикосекунд до десятков фемтосекунд. Благодаря крайне короткой длительности импульса они обеспечивают высокую пиковую интенсивность, что позволяет модифицировать прозрачные материалы за счет многофотонного поглощения.

Кроме того, под действием мощных ударных волн и волн разрежения внутри материала могут формироваться полости — эффект, недостижимый с использованием других технологий.

Ультракороткие лазерные импульсы широко применяются в промышленности для выполнения различных технологических задач [69]. Например, высокоинтенсивное лазерное излучение используется в литографии [70], для обработки светодиодных компонентов с целью повышения эффективности свечения и управления цветовой температурой [71], а также для производства волоконно-оптических датчиков температуры с высокой чувствительностью [72]. В дополнение к этому, данная технология позволяет выполнять гибридную обработку прозрачных, твердых и хрупких материалов [73], а также осуществлять сварку керамики с локализованным расплавлением [74].

Впервые было продемонстрировано, что наноканалы с высоким соотношением длины к диаметру могут быть созданы в условиях микровзрыва с помощью фемтосекундных лазерных импульсов, преобразованных в игольчатый недифрагирующий пучок Бесселя-Гаусса [75]. Такой пучок представляет из себя цилиндрически симметричное интерференционное поле, которое формируется за счет когерентной суперпозиции конических плоских оптических волн [76]. Использование импульса в форме Бесселя позволяет эффективно перестраивать значительные объемы материала, создавая наноканалы с исключительно высоким соотношением сторон ($\sim 1 : 100$) [75; 77]. Благодаря цилиндрической геометрии распространения ударной волны достигается более высокая плотность энергии по сравнению с традиционными методами, использующими сферически расширяющиеся ударные волны, генерируемые остро сфокусированными гауссовыми пучками [75; 77; 78].

Однако, как и в случае микровзрывов с использованием гауссовых пучков, происхождение пучков Бесселя-Гаусса возможно только в материалах, прозрачных для длины волны лазерного излучения. Это требуется для достижения высокой плотности энергии более 1 МДж/см^3 (или давления более 1 ТПа , где $1 \text{ МДж/см}^3 = 1 \text{ ТПа}$), что зависит от модуля Юнга и прочностных характеристик материала [79; 80].

Несмотря на прогресс в формировании наноканалов с использованием ультракоротких лазерных импульсов в форме Бесселя, создание наноканалов с контролируемыми размерами и свойствами поверхности остается сложной задачей. Основные ограничения связаны с возможностью формирования пучков

Бесселя только в оптически прозрачных материалах и отсутствием экономически эффективных технологий для массового производства с воспроизводимыми результатами. Это подчеркивает необходимость дальнейших исследований для совершенствования существующих методов и разработки новых подходов к созданию наноканалов с заданными характеристиками.

Появление рентгеновских лазеров на свободных электронах (XFEL) предоставляет уникальные возможности для исследования воздействия фемтосекундного рентгеновского излучения высокой интенсивности на различные материалы. Это способствует определению порога радиационной стойкости, моделированию процессов разрушения материалов и развитию новых технологий. Ключевым преимуществом XFEL является сочетание уникальных характеристик: высокая энергия фотонов, обеспечивающая глубокое проникновение в материал; высокая пространственная когерентность, гарантирующая направленность и возможность фокусировки до наноразмерного сечения; высокая пиковая мощность, позволяющая эффективно аккумулировать энергию в объеме материала [81].

Современные технологии фокусировки пучков XFEL позволяют достигать области размеров от нескольких десятков до сотен нанометров при энергии импульса от десятков до сотен микроджоулей и длительности импульса в несколько десятков фемтосекунд. Это обеспечивает интенсивность излучения в диапазоне $\sim 10^{18-22}$ Вт/см² [82—86], что уже сопоставимо с современными петаваттными лазерными системами, работающими в оптическом диапазоне [87].

В этой работе проводится молекулярно-динамическое моделирование образования поры и наноканала субмикронного диаметра с увеличенным соотношением сторон более чем в 1000 раз в объеме кристалла LiF, которые формируются под воздействием единичного лазерного импульса в рентгеновском диапазоне энергии. Кристалл LiF широко используется в качестве флуоресцентного рентгеновского детектора благодаря возможности создания центров окраски под воздействием электромагнитного излучения с энергией фотонов выше 14 эВ [88—90]. Низкая атомная масса LiF обеспечивает глубокое проникновение рентгеновских фотонов в образец (коэффициент поглощения $\mu = 8,865$ см⁻¹ при энергии 9 кэВ) и позволяет наблюдать результат воздействия рентгеновского пучка в материале с субмикронным пространственным разрешением с помощью флуоресцентного оптического микроскопа.

Кроме того, этот материал представляет особый интерес из-за низкой атомной массы и значительной разницы в массах между составляющими его атомами лития и фтора (6,94 а.е.м. и 18,99 а.е.м., соответственно). Большое пространственное разделение атомов Li и F, обусловленное различием в скоростях диффузии ионов, способствует образованию необычных кристаллических структур лития. Это явление аналогично формированию алюминия с объемноцентрированной кубической решеткой, наблюдаемому в экспериментах по лазерному микровзрыву сапфира [91].

Благодаря значительным достижениям в разработке высококачественных источников лазерной накачки и керамических активных элементов, произошло интенсивное развитие твердотельных лазерных систем [92]. Это привело к созданию экономически выгодных установок, способных генерировать мощные наносекундные импульсы с частотой повторения до 50 кГц. В фундаментальном обзоре [93] представлен всесторонний анализ современного состояния технологий лазерной микрообработки металлов с использованием наносекундных комплексов. Основным механизмом воздействия технологиях обработки материала лазерными импульсами выступают абляционные процессы [94; 95], инициируемые при достижении температур, существенно превышающих точки плавления и испарения обрабатываемых материалов.

Значительное внимание привлекают явления, происходящие в твердых телах при предпороговых нагрузках, когда материал сохраняет твердое состояние, но температура его поверхностного слоя достигает значений, близких к температуре плавления. Процессы нагрева и последующего охлаждения реализуются на временной шкале десятков наносекунд. При этом в поверхностном слое материала наблюдаются существенные термомеханические преобразования, оказывающие влияние на дефектную структуру кристаллической решетки. Пионерские работы в данном направлении были выполнены Мирзоевым [96], который теоретически рассмотрел данные явления. До недавнего времени отсутствовали систематические экспериментальные исследования, несмотря на единичные публикации [95; 97—101], которые не получили исчерпывающего теоретического обоснования.

Медь и ее сплавы характеризуются хорошо изученными физико-химическими свойствами, что обусловлено их выдающимися техническими характеристиками. Высокие значения тепло- и электропроводности делают медь ключевым материалом в электротехнической отрасли, а также удобным мо-

дельным объектом для исследования новых физических явлений. В последние годы было выявлено уникальное поведение меди и ее сплавов под воздействием наносекундных лазерных импульсов в ультрафиолетовом диапазоне [102—106]. Наблюдаемый эффект был назван оптикопластическим, поскольку он демонстрирует аналогии с известными электропластическим [107; 108], магнитопластическим [108; 109] и акустопластическим [110] эффектами.

Оптикопластический эффект проявляется при воздействии на металлическую поверхность лазерного импульса с интенсивностью порядка $\sim 10^8$ Вт/см², что значительно ниже порога оптического пробоя воздуха ($\sim 10^{10} - 10^{11}$ Вт/см²) [111]. Этот эффект характеризуется развитием высокотемпературной пластической деформации в приповерхностном слое металла. Ключевым результатом данного явления является существенная трансформация структуры поверхностного слоя материала, происходящая без перехода вещества в жидкое или газообразное состояние.

Особую значимость представляет изучение устойчивости приповерхностного слоя меди к доабляционным лазерным воздействиям, что обусловлено широким применением цельнометаллических зеркал из меди в мощных газовых СО₂- и СО-лазерах [112]. Режим эксплуатации таких зеркал в мощных импульсных газовых ИК-лазерах характеризуется экстремальными нагрузками, близкими к порогу оптического пробоя, но не превышающими его. Тем не менее, длительное воздействие высокоинтенсивного излучения на металлические зеркала частотно-импульсных лазеров приводит к возникновению пластической деформации поверхности. Данное явление, известное как оптическая усталость (эффект "апельсиновой корки"), оказывает негативное влияние на качество отражаемого излучения.

Для поддержания высоких эксплуатационных характеристик лазерной системы требуется регулярное восстановление качества отражающих поверхностей зеркал путем их переполитровки. Данная процедура является технологически сложной и экономически затратной. Это подчеркивает актуальность исследований, направленных на понимание механизмов возникновения оптической усталости, а также разработку методов ее предотвращения или минимизации. Решение данной проблемы позволит повысить надежность и эффективность использования металлических зеркал в мощных лазерных системах, что имеет важное значение для современных технологий лазерной физики и оптики.

Проявление оптикопластического эффекта определяется следующим образом: в области воздействия лазерного излучения наблюдалось неравномерное поднятие поверхности материала. Основной причиной данного явления является значительная термически индуцированная активизация зерен (кристаллитов) поликристаллической структуры. Последующие лазерные импульсы усиливали деформацию поверхности, что выражалось в увеличении высоты и площади поднятых участков, а также в появлении признаков движения границ зерен и кристаллографического скольжения внутри них. По мере увеличения числа импульсов наблюдалась кумулятивная динамика изменений. В поверхностном слое материала происходило резкое возрастание концентрации структурных дефектов, что, как предполагается, оказывает существенное влияние на оптические свойства материала. В настоящей работе проводится моделирование поведения медных образцов [102—106] под воздействием интенсивного лазерного излучения наносекундного диапазона [113].

Глава 2. Объекты исследований и методы моделирования.

В данной работе проводится моделирование воздействия лазерной ударной волны при различных начальных условиях. Численный эксперимент проводится при помощи метода классической молекулярной динамики. Исследуется воздействие на такие материалы, как алюминий, медь и фторид лития.

2.1 Математические методы моделирования

Используя методы математического моделирования, можно показать эволюцию разнообразных физических процессов. В случае исследования ударно-волнового взаимодействия применяются различные подходы: континуальный (гидродинамика или кинетический метод на основе уравнений Больцмана) и атомистический (молекулярная динамика или прямое моделирование методом Монте-Карло). Кинетический метод на основе уравнений Больцмана и метод Монте-Карло применимы только для разреженных газов, поэтому в работе используется метод молекулярной динамики в классическом представлении. В данной главе проводится описание метода и его связь с континуальными методами моделирования.

2.1.1 Молекулярная динамика

В этой работе все системы моделируются при помощи классического метода молекулярной динамики, поэтому он будет рассмотрен наиболее подробно. В этом вычислительном методе учитываются взаимодействия отдельных атомов друг с другом в зависимости от расстояния между ними, то есть, система не рассматривается как сплошная среда. Данный метод считается методом прямого атомистического моделирования, так как производятся расчеты напрямую над атомами.

2.1.1.1 Описание классического метода молекулярной динамики.

Классический метод молекулярной динамики (МД) – метод, который позволяет имитировать движение атомов (молекул) с помощью решения классических уравнений движения, учитывая взаимодействие атомов между собой. Начиная расчет с некоторой начальной конфигурации, рассчитываются новые координаты и скорости всех атомов системы при интегрировании в течение некоторого временного шага δt . Полученные данные можно применять для расчета термодинамических характеристик системы, для исследования её поведения и изменения её структуры во времени.

При помощи метода молекулярной динамики можно исследовать полимеры (цепочки и кольца молекул), биомолекулы (структура белков и их сворачивание), динамику жидкости (различные виды течений, неньютоновские жидкости), а также деформации твердых тел (распределение дислокаций и их миграцию, структурные изменения, разрушения, изучение упругих и пластических свойств) [114]. Метод МД наиболее интересен тем, что позволяет рассматривать вещество не как сплошную среду, а как набор взаимодействующих друг с другом атомов. Модель расчета разрабатывается исходя из того, что в методе учитывается расстояние между атомами, из которых состоит вещество.

У классического метода молекулярной динамики есть существенные ограничения. Первое ограничение заключается в том, что данный метод нельзя применять для исследования материалов, где квантовые эффекты играют большую роль (сверхмалые расстояния между атомами, сверхбыстрые процессы, экстремально низкие и высокие температуры) [115; 116], так как движение атомов описывается только при помощи второго закона Ньютона (в форме уравнений Гамильтона). Второе ограничение накладывается из-за высоких вычислительных затрат метода. Из-за того, что у МД высокая вычислительная сложность, рассчитывать процессы в макромасштабе не представляется возможным, поэтому ограничения расчетной области составляют порядка микрометра [117]. В настоящее время число атомов, которое можно включить в расчет, сохранив вычислительную скорость, составляет максимум 10^6 единиц на процессорное ядро.

Несмотря на то, что размер моделируемой системы сравнительно мал (относительно других методов моделирования), результаты расчетов переносят на

макроскопические системы. Это можно сделать, поскольку при расчете термодинамических параметров на макроскопическом уровне нет необходимости в огромном количестве атомов, если использовать периодические граничные условия. В этом случае принимается, что вокруг моделируемой системы находятся её копии, создаваемые при помощи операции трансляции. Каждая отдельная копия включает в себя копии всех атомов исходной системы, но расчеты производятся только над теми частицами, что находятся в исходном объеме. Всё пространство заполнено атомами, а воздействие стенки можно не учитывать, так как мы принимаем, что взаимодействие происходит не с ней, а с атомами-копиями.

В основе метода МД лежит второй закон Ньютона, уравнения которого решаются при помощи выбранной расчетной схемы. В традиционном варианте метода используются классические уравнения движения. Это означает, что моделируемая система представляет собой замкнутую систему, в которой сохраняется полная энергия (сумма кинетической и потенциальной энергий). В статистической физике такая система называется микроканоническим ансамблем и имеет обозначение NVE (постоянные число частиц, объем и энергия). Существуют системы, которые находятся при постоянных значениях давления и температуры (NPT) или при постоянных значениях объема и температуры (NVT). Такие ансамбли называются каноническими. Для их моделирования применяют алгоритмы, которые поддерживают давление и/или температуру постоянными. Для поддержания давления используют функции баростата, для температуры – термостата. В этой работе используется метод неравновесной молекулярной динамики, поскольку происходит внешнее воздействие на моделируемую систему. Когда нет внешнего воздействия, то систему можно описать как NVE ансамбль.

Поскольку при применении метода МД приходится решать большое количество уравнений, прибегают к некоторым методам ускорения расчетов. Ищется компромисс между точностью вычислений, надежностью расчетной модели, скоростью расчета и вычислительными затратами. Необходимо задавать разумный размер модели и выбирать оптимальный шаг интегрирования Δt . Проверкой, что расчет выполняется верно, является сохранение полной энергии системы и полного импульса (при отсутствии воздействия извне). Из-за того, что на дальних расстояниях атомы практически не оказывают влияния друг на друга, при расчете можно не решать уравнения, связанные с этими ато-

мами. Для этого вводится такая величина, как радиус обрезания потенциала взаимодействия. Это существенно ускоряет расчет, поскольку основное время занимает расчет сил взаимодействия между атомами.

2.1.1.2 Численные методы решения уравнений молекулярной динамики.

Основу расчетной схемы для решения системы уравнений МД составляют обыкновенные дифференциальные уравнения Гамильтона. В данной работе исследуются физические явления, происходящие в конденсированных средах, поэтому используются уравнения Гамильтона, которые можно использовать для атомов твердого тела. У таких уравнений есть очень важная особенность, необходимая для МД. Они обладают симплектическими свойствами, вследствие чего сохраняется фазовый объем системы атомов, и система является обратимой по времени [118–121]. В общем виде уравнения Гамильтона решаются численным методом при помощи выбранной расчетной схемы. В таком случае дифференциальный оператор меняют на разностный. Симплектические свойства расчетной схемы важны, иначе может развиваться неустойчивость, при которой задача не будет верна физически [122]. Разностные схемы, сохраняющие симплектические свойства уравнений Гамильтона, строят при помощи операторного метода [123] и метода Рунге–Кутты [124].

Гамильтониан системы из N частиц массой m имеет вид $H = K + V$, где K – кинетическая энергия, а V – потенциальная энергия взаимодействия. В явном виде:

$$H = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} + V(x_1, x_2, \dots, x_{3N}), \quad (1)$$

где x_i – координаты, p_i – импульсы, а индекс $i = 1, \dots, 3N$ означает степени свободы системы. Уравнения Гамильтона, получаемые из (1), имеют вид:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = f_i, \quad (2)$$

где f_i – сила, соответствующая i -й степени свободы. Рассмотрим операторный метод, при помощи которого можно построить подходящую разностную схему.

Рассмотрим решение задачи Коши для системы уравнений (2) с использованием такого метода [123]. Примем, что при $t = 0$ нам известны координаты и импульсы частиц, то есть, мы знаем x_i^0 и p_i^0 . Необходимо найти решение для (2) при $t > 0$. Для этого мы разбиваем интервал времени $(0, t)$ на M равных отрезков длиной $\tau = t/M$. Получаем следующие решение системы уравнений (2) в операторном виде:

$$\begin{aligned} \varphi(x_i, p_i) &= \hat{U} \varphi(x_i^0, p_i^0), \quad \hat{U} = \exp(\hat{L}t) = \hat{U}_n^M = (\exp(\hat{L}\tau))^M, \\ \hat{L} &= \hat{L}_1 + \hat{L}_2, \quad \hat{L}_1 = \sum_i \frac{p_i}{m} \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad \hat{L}_2 = \sum_i f_i(x_i) \frac{\partial}{\partial x_i}, \end{aligned} \quad (3)$$

где φ – вектор состояния, $\hat{L}$ – оператор Лиувилля, $\hat{U}$ – оператор эволюции, он же пропагатор, связывающий вектор в начальном и конечном состояниях системы, $\hat{U}_n^M$ – пропагатор, связывающий n -ый шаг по времени с шагом $(n+1)$ [125].

Разложим пропагатор из (3) на произведение операторов [126] при помощи формулы Бейкера–Кемпбелла–Хаусдорфа [127] и получим следующее выражение:

$$\hat{U}_n = \exp((\hat{L}_1 + \hat{L}_2)\tau) = \exp\left(\frac{\hat{L}_1\tau}{2}\right) \exp(\hat{L}_2\tau) \exp\left(\frac{\hat{L}_1\tau}{2}\right) + C\tau^3, \quad (4)$$

где $C \sim [\hat{L}_1[\hat{L}_1, \hat{L}_2]]/12 + [\hat{L}_2[\hat{L}_2, \hat{L}_1]]/12$. Комбинируя (4) и (3), получаем:

$$\varphi^{n+1} = \hat{U}_n \varphi_n, \quad \hat{U}_n = \exp\left(\frac{\tau}{2} f(x) \frac{\partial}{\partial p}\right) \exp\left(\tau \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x}\right) \exp\left(\frac{\tau}{2} f(x) \frac{\partial}{\partial p}\right). \quad (5)$$

Для простоты понимания, (5) было записано без использования индекса i (здесь и далее) [125]. Прежде чем записать окончательную форму разностной схемы, необходимо также определить действие операторов сдвига на вектор состояния:

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{\tau}{2} f(x) \frac{\partial}{\partial p}\right) \varphi^n(x^n, p^n) &= \varphi\left(x^n, p^n + \frac{\tau}{2} f(x^n)\right), \\ \exp\left(\tau \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x}\right) \varphi^n(x^n, p^n) &= \varphi\left(x^n + \tau \frac{p^n}{m}, p^n\right). \end{aligned} \quad (6)$$

Считая, что в (5) $\varphi^n = (x^n, p^n/m)$, а ещё учитывая (6), получаем скоростную разностную схему Верле второго порядка точности [128], с использованием которой были выполнены все расчеты в этой работе:

$$x^{n+1} = x^n + \tau \dot{x}^n + \frac{\tau^2}{2m} f(x^n), \quad \dot{x}^{n+1} = \dot{x}^n + \frac{\tau}{2m} (f(x^n) + f(x^{n+1})). \quad (7)$$

Форма (7) не является единственно верной записью разностной схемы. Эту схему можно записать в координатном варианте:

$$x^{n+1} = 2x^n + x^{n-1} + \frac{\tau^2}{m}f(x^n), \quad \dot{x}^n = \frac{1}{2\tau}(x^{n+1} - x^{n-1}). \quad (8)$$

2.1.1.3 Сравнение молекулярной динамики и гидродинамики.

Рассмотрим особенности гидродинамического и молекулярно-динамического подходов в моделировании и определим, какой метод лучше всего подходит для той или иной ситуации.

Гидродинамика рассматривает моделируемую среду как область с непрерывным распределением вещества. Такой подход называется макроскопическим, так как влияние отдельных молекул/атомов не учитывается. Основные физические величины, используемые в таком подходе – это плотность, скорость, давление, температура [129]. Например, гидродинамика используется для описания взаимодействия жидкости с твердыми поверхностями [130]. В основе математической модели гидродинамики лежат уравнения сохранения массы, энергии, импульса. Они описывают, как происходит изменение плотности, давления и полей скоростей в процессе расчета [129]. Гидродинамика, как макроскопический метод, может применяться на произвольных временных и пространственных масштабах [130]. Поэтому гидродинамика применяется для моделирования крупномасштабных явлений и процессов, таких как течение жидкостей и газов, аэродинамические расчеты, гидравлика [131]. Вычислительная сложность зависит от размеров и разрешения расчетной сетки. Метод конечных элементов позволяет рассчитывать большие системы [129].

Классическая молекулярная динамика учитывает взаимодействие всех атомов/молекул системы. Такой метод работает на микроскопическом уровне и позволяет исследовать влияние отдельных атомов на макроскопические свойства системы [132]. МД применяют для исследования полимеров, биологических структур [133], ударно-волнового воздействия [134; 135]. Математическая модель молекулярной динамики в классическом представлении предполагает решение уравнений движения Ньютона для каждой из частиц системы. Сила воздействия одной частицы на другую рассчитывается при помощи потенциа-

ла взаимодействия, например, потенциал Леннард-Джонса [132]. МД исследует микроскопические процессы, длительностью от фемтосекунд до наносекунд, а пространственный масштаб ограничен размерами от ангстремов до сотен нанометров [136] (в некоторых случаях размер системы вдоль одной из осей может принимать размеры порядка микрометра [137]). Молекулярная динамика является прямым атомистическим методом. Она исследует процессы на атомарном уровне, такие как фазовые переходы, диффузия, взаимодействие биологических структур [133]. У МД большие требования к вычислительным ресурсам из-за необходимости решать огромное количество уравнений движения, особенно для задач с большими размерами системы и на длительном временном интервале. Для ускорения используют алгоритмы параллельных вычислений и специальное оборудование для счета, например, графические процессоры [132].

При всех своих различиях, методы имеют связь между собой. Гидродинамика может быть предельным случаем МД при переходе к макроскопическим масштабам. Для этого выполняется усреднение макроскопических величин по всему ансамблю частиц. Если в МД использовать методы более грубого представления системы, то возможен переход от микроскопического уровня к масштабам, близким к гидродинамическим [138].

Классическая молекулярная динамика и гидродинамика являются подходами, взаимно дополняющими друг друга. МД описывает систему на атомарном уровне и позволяет исследовать фундаментальные процессы. Гидродинамика эффективна для описания системы на макроскопическом уровне. Выбор метода зависит от задачи, доступных вычислительных ресурсов и необходимой точности расчета.

2.1.1.4 Получение континуальных величин в молекулярной динамике.

Базовые величины, используемые в расчете методом классической молекулярной динамики, являются координаты и скорости атомов. Многие физические величины (давление, плотность, температура и т.д.) описываются в рамках континуального подхода, в котором отдельные атомы неинтересны,

а вещество рассматривается как сплошная среда; работа проводится здесь с полями – непрерывными функциями координат и времени.

Молекулярная динамика моделирует движение атомов под действием межатомных сил при помощи интегрирования второго закона Ньютона. Полученные траектории дают полное представление о системе из N атомов на микроскопическом уровне. Для сопоставления с макроскопическими исследованиями и континуальными моделями необходимо перейти от атомистического описания к непрерывным полям. Такой переход осуществляется при помощи локального усреднения, которое позволяет сопоставить каждой точке пространства континуальную величину, усредненную по частицам в окрестности этой точки.

Рассмотрим получение континуальных величин, которые используются в этой работе. Параметром, который используется при оценке эволюции фронта ударной волны, является гидростатическое давление:

$$P = \frac{P_x + P_y + P_z}{3}. \quad (9)$$

В его основу входят напряжения вдоль всех трех осей, которые рассчитываются следующим образом:

$$\begin{aligned} P_{xx} &= \frac{k_b T_x N}{V} + \frac{\sum_{i=0, j=0}^N r_x F_x}{6V}, \\ P_{yy} &= \frac{k_b T_y N}{V} + \frac{\sum_{i=0, j=0}^N r_y F_y}{6V}, \\ P_{zz} &= \frac{k_b T_z N}{V} + \frac{\sum_{i=0, j=0}^N r_z F_z}{6V}, \end{aligned} \quad (10)$$

где r_x, r_y, r_z означают расстояния между i -й и j -й частицами по осям X, Y, Z , а F_x, F_y, F_z – силы воздействия j -й частицы на i -ю частицу по соответствующим осям; k_b – константа Больцмана, описывающая связь энергии и температуры; T_x, T_y, T_z – температуры вдоль осей X, Y и Z ; V – контрольный объем вокруг точки, где будет происходить усреднение, а N – число атомов в объеме.

В работе используется величина среднего сдвигового напряжения, характеризующее внутреннее сопротивление среды деформации сдвига. Среднее сдвиговое напряжение в кристалле имеет вид:

$$\langle \tau \rangle = -\frac{1}{2}(\langle P_z \rangle - (\langle P_y \rangle + \langle P_x \rangle)/2). \quad (11)$$

Средняя температура системы имеет вид:

$$T = \frac{T_x + T_y + T_z}{3}, \quad (12)$$

где T_x, T_y, T_z – температуры поступательных степеней свободы по осям X, Y и Z . Эти температуры определяются через среднюю кинетическую атомов, исходя из закона равномерного распределения энергии по степеням свободы. В этой работе предполагается, что все частицы имеют по 3 степени свободы на частицу, тогда общее число степеней равно $3N$, на одну ось приходится N . Расчет температур по осям выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} T_x &= \frac{1}{Nk_b} \sum_{i=1}^N m v_x^2, \\ T_y &= \frac{1}{Nk_b} \sum_{i=1}^N m v_y^2, \\ T_z &= \frac{1}{Nk_b} \sum_{i=1}^N m v_z^2, \end{aligned} \quad (13)$$

где N – число атомов в контрольном объеме, k_b – константа Больцмана, m – масса i -ой частицы, v_x, v_y, v_z – скорости i -ой частицы вдоль осей. Средняя температура в контрольном объеме будет иметь вид:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{3Nk_b} \left\langle \sum_{i=1}^N m_i v_i^2 \right\rangle. \quad (14)$$

В молекулярной динамике можно получить значения континуальных величин, если они являются функциями координат. К ним относятся величины, которые зависят от положений атомов в системе. Они могут быть скалярными (энергия), векторными (сила), тензорными (тензор напряжений), функциями распределения (плотность). Но из значений координат нельзя получить величины, которые требуют квантовых подходов (электронная структура, магнитные свойства, квантовые эффекты, химические реакции).

2.2 Описание проведения расчетов

Для изучения ударно-волновых процессов в веществе используется специальный расчетный код [1]. При помощи этого кода было посчитано множество

различных задач [4; 6; 23; 40; 46; 48; 134; 135; 139—143]. В этом пункте будут рассмотрены основные понятия, используемые при проведении молекулярно-динамического моделирования.

2.2.1 Расчетная схема

Как говорилось ранее, для метода молекулярной динамики необходимо использовать расчетную схему, которая обладает симплектическими свойствами (сохраняется фазовый объем и обратима по времени). В данном коде используется схема Верле второго порядка точности. Её преимущество перед схемами более высокого порядка заключается в том, что для неё требуется решать меньшее количество уравнений. Из этого следует, что для её работы требуется меньшее количество памяти для хранения данных.

2.2.2 Кристаллическая решетка

Кристаллическая решетка вещества состоит из атомов, расположенных в определенном порядке. Эти атомы являются структурными единицами решетки. Идеальный кристалл можно построить путем бесконечного закономерного повторения в пространстве одинаковых структурных единиц. Далее будем описывать кристаллическую структуру вещества с помощью повторяющихся в пространстве элементарных ячеек (элементарной части кристаллической решетки). В такую элементарную ячейку может входить один или несколько атомов, каждая ячейка привязана к определенной точке пространства. Такая группа атомов называется базисом кристаллической решетки [144].

2.2.2.1 Трансляции и кристаллические решетки

Обозначим идеальный кристалл как тело, состоящее из атомов, которые расположены в пространстве так, что можно ввести три вектора трансляций $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ и $\mathbf{c}$. Если рассматривать решетку из некоторой произвольной точки $\mathbf{r}$, то решетка будет иметь такой же вид, что и из точки $\mathbf{r}'$:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}, \quad (15)$$

где n_1, n_2, n_3 – произвольные целые числа. Используя их в различной вариации, можно получить множество точек $\mathbf{r}'$, которые определяют кристаллическую решетку вещества. Кристаллическая решетка представляет из себя математическую абстракцию, и решетку можно считать образованной в том случае, если с каждой точкой $\mathbf{r}'$ связан базис решетки [144].

В качестве ортов кристаллографических осей координат выбираются векторы примитивных трансляций. Эти векторы $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ составляют смежные углы элементарного параллелепипеда. Параллелепипед считается примитивным, если точки решетки расположены в его углах [144].

Трансляцией называется операция перемещения кристалла как единого целого параллельно самому себе. Вектор трансляции кристаллической решетки имеет смысл связи двух любых точек решетки и имеет следующий вид [144]:

$$\mathbf{T} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}. \quad (16)$$

2.2.2.2 Операции симметрии

Для построения кристаллической решетки необходимо выполнить операции, описанные в п. 2.2.2.1, и произвести некоторый набор операций симметрии, при помощи которых выполняется параллельный перенос кристаллической структуры материала. К таким операциям относятся трансляционные преобразования, операции вращения и отражения. Последние две операции относятся к типу точечных операций симметрии, которые являются дополнением к трансляционным.

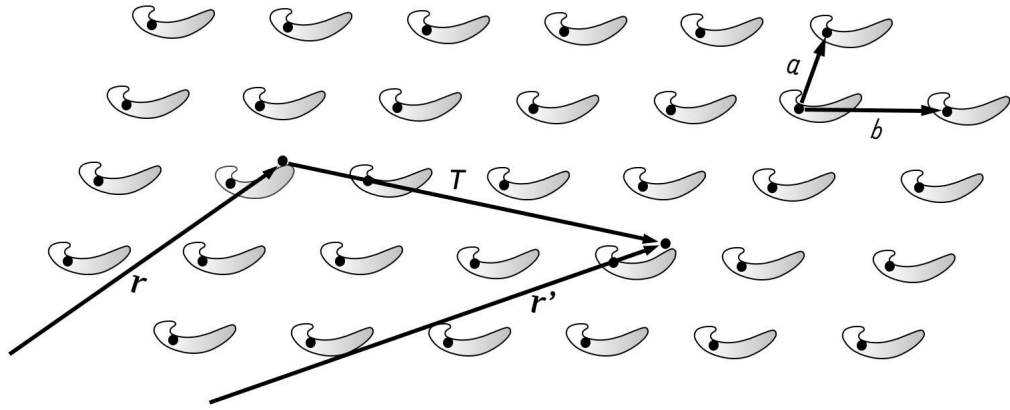


Рисунок 1 — Часть кристалла, состоящего из некоторых молекул. Изображение взято из [144].

На рисунке 1 изображена кристаллическая структура некоторого вещества. Расположение атомов не меняет своего вида в зависимости от того, из какой точки пространства на него смотреть. То есть, расположение имеет одинаковый вид из точки $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$, а вектор трансляции $\mathbf{T}$, который связывает эти две точки, является кратным векторов примитивных трансляций $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$. Здесь $\mathbf{T} = -\mathbf{a} + 3\mathbf{b}$.

2.2.2.3 Базис и кристаллическая структура

Каждая точка кристаллической решетки связана минимум с одним атомом или некоторой группой атомов. Такой атом или группа атомов называются базисом кристаллической решетки. Их состав, ориентации и расположение относительно друг друга являются идентичными. Базис, в чей состав входит N атомов, определяется точно таким же количеством векторов:

$$\mathbf{r}_i = x_i \mathbf{a} + y_i \mathbf{b} + z_i \mathbf{c}. \quad (17)$$

Эти векторы определяют положения центров атомов базиса относительно той точки, с которой связан базис решетки. Обычно принимается, что $0 \leq x_i, y_i, z_i \leq 1$ [144].

2.2.2.4 Прimitives ячейки кристаллической решетки

Примитивной ячейкой кристаллической решетки называется такая элементарная ячейка, чьи размеры ребер равны векторам $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ и $\mathbf{c}$.

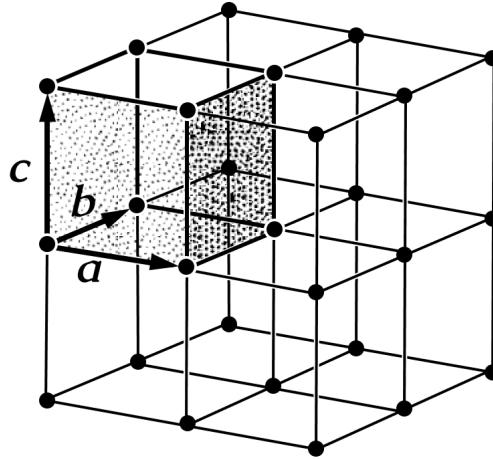


Рисунок 2 — Пример примитивной ячейки. Изображение взято из [144].

Примитивная ячейка является примером элементарной ячейки с минимально возможным объемом. Подобными ячейками, применяя трансляционные операции, можно заполнить всю кристаллическую структуру. Так как число атомов в примитивной ячейке кристаллической решетки равно числу атомов базиса этой решетки, то на одну такую ячейку будет приходиться одна точка кристаллической решетки. На рисунке 2 видно, что в каждом углу примитивной ячейки расположена точка решетки, но каждая такая точка принадлежит одновременно всем восьми ячейкам, что сходятся в наблюдаемой точке кристаллической решетки. Объем примитивной ячейки можно определить так:

$$V_c = |\mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}|. \quad (18)$$

Базис такой примитивной ячейки тоже имеет название примитивный, число атомов в нем минимально.

Способ выбора примитивной ячейки не является единственным. В п. 2.2.4.1 рассматривается декомпозиция расчетной области на ячейки Вороного. Эти ячейки также носят название ячеек Вингера-Зейтца, и способ их построения может быть взят за основу для примитивной ячейки [144].

2.2.2.5 Кристаллические решетки исследуемых материалов

Все кристаллические решетки обладают симметрией в пространстве, следовательно, над ними можно проводить операции симметрии. Такой операцией является вращение вокруг оси, проходящей через некоторую точку кристаллической решетки. Такая ось называется поворотной, и имеет определенный порядок, такой, чтобы ячейки, из которых состоит кристаллическая структура, могли вплотную прилегать друг к другу. То есть, могут существовать оси, у которых порядок поворотной оси равен 1, 2, 3, 4, 6. Нет осей с порядком 5 и 7, так как пятиугольники и семиугольники не могут прилегать друг к другу вплотную в кристаллической структуре.

Совокупность всех операций симметрии определяет кристаллическую систему и тип решетки. В трехмерном пространстве существует четырнадцать типов кристаллических решеток, известных как решетки Браве. Они разделяются на семь систем, в зависимости от типа элементарной ячейки. Ячейка может быть триклинной, моноклинной, ромбической, кубической, гексагональной, тетрагональной, тригональной. Форма определяется из соотношения осей **a**, **b** и **c**, а также углов между ними.

Среди кубических решеток широко распространена гранецентрированная кубическая (ГЦК) решетка, в которой узлы расположены в вершинах куба и в центрах всех его граней. Такая структура характеризуется высокой плотностью упаковки атомов и распространена среди металлов. В данной работе исследуются алюминий и медь, которые имеют гранецентрированную кубическую кристаллическую решетку. У фторида лития, чей базис состоит из двух атомов (лития и фтора), решетка тоже имеет форму ГЦК. На рисунке 3 представлено схематическое изображение ГЦК решетки для металлов [144], а на рисунке 4 представлена решетка для фторида лития.

2.2.2.6 Ориентация плоскостей в кристаллах

Ориентация плоскости в кристалле определяется по координатам трёх атомов, лежащих в этой плоскости. Положение такой атомной плоскости задается

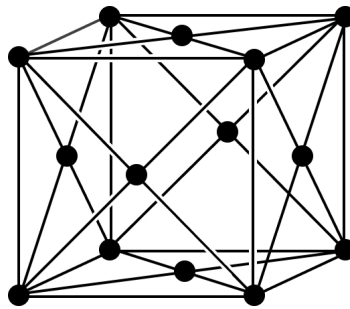


Рисунок 3 — Схематическое изображение ГЦК решетки у металлов (примитивная ячейка). Черные точки здесь обозначают атомы металла. Изображение взято из [144].

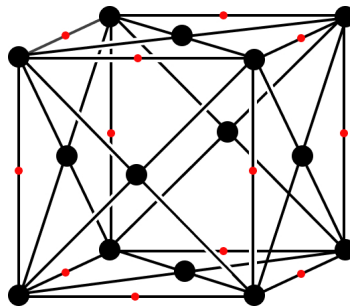


Рисунок 4 — Схематическое изображение ГЦК решетки (примитивная ячейка). Черные точки здесь обозначают атомы фтора, красные — лития.

координатами каждого из трех атомов, лежащих на каждой из трех кристаллографических координатных осей. Например, если у таких атомов координаты равны $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, 0, 1)$ в некоторой кристаллографической системе координат, то эту плоскость можно охарактеризовать тремя единицами.

Метод для описания плоскости, которым пользуются при структурном анализе кристаллов, называется индексы Миллера [144]. Их определяют следующим образом:

1. Находим точки на кристаллографических осях, в которых рассматриваемая плоскость пересекает основные координатные оси;
2. Возьмем обратные значения полученных чисел и приведем их к наименьшему целому числу, кратному каждому из них, заключив результат в круглые скобки.

На рисунке 5 показана плоскость, для которой определяются индексы Миллера. Здесь она отсекает отрезки на осях размером $3a$, $2b$, $2c$. Следовательно, обратные числа равны $1/3$, $1/2$, $1/2$. Наименьшие кратные целые числа — 2, 3, 3. Получается, индексы Миллера для такой плоскости — (233) .

Набор индексов можно обозначить как (hkl) . В случае, если плоскость пересекает ось в отрицательной области, то знак минуса ставится над индексом,

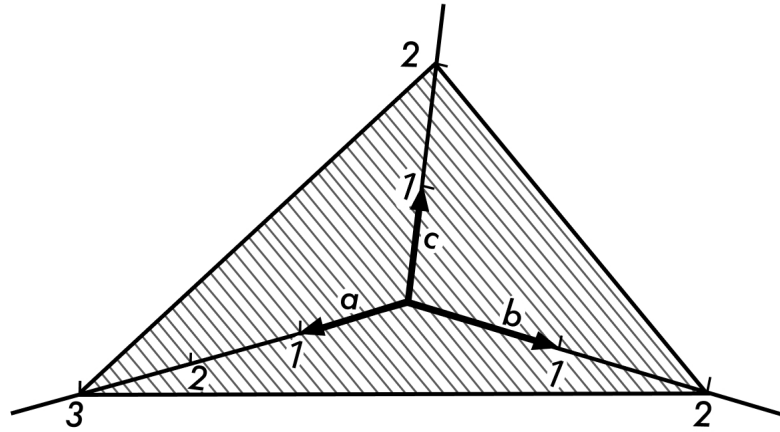


Рисунок 5 — Определение индексов Миллера. Изображение взято из [144].

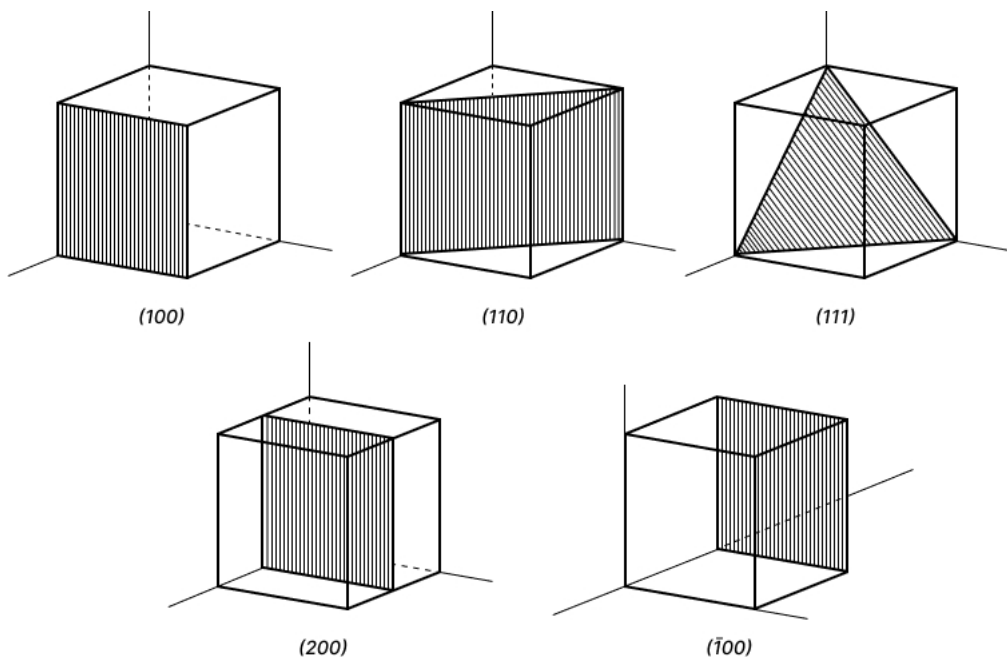


Рисунок 6 — Индексы Миллера для наиболее распространённых плоскостей. (200) параллельна (100). Изображение взято из [144].

а не перед ним. Например, в случае кубического кристалла, индексы Миллера для его плоскостей равны (100) , (010) , (001) , $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$, $(00\bar{1})$.

Для направлений в кристаллах используются числа, которые соотносятся между собой как компоненты вектора, являющегося параллельным для рассматриваемого направления в соответствующей системе координат. Они представляют из себя набор наименьших целых чисел. Направления записываются в квадратных скобках в виде $[hkl]$. Если направление направлено в отрицательную сторону, то знак минус ставится над индексом, так же, как и для индексов Миллера. В кубических кристаллах направление $[hkl]$ всегда

будет перпендикулярным к плоскости (hkl) , но для других типов кристаллов это не соблюдается [144].

2.2.3 Термостат

Для задания определенной температуры системе, а также для моделирования нагрева, используется термостат. Существует множество термостатов – термостат с масштабированием скоростей, термостат Берендсена [145], термостат Нозе-Гувера [146—149], термостат Ланжевена [150]. Последний имеет ряд преимуществ перед термостатами Берендсена и Нозе-Гувера.

Термостат Ланжевена превосходит термостат Берендсена своей физической обоснованностью и корректностью в воспроизведении статистических свойств термодинамического равновесия. Термостат Берендсена действует за счет искусственного масштабирования скоростей частиц с целью приближения температуры к заданному значению, а термостат Ланжевена моделирует реальное взаимодействие системы с окружающей средой через комбинацию силы трения и случайных столкновений, что соответствует физической картине динамики в вязкой среде. Это позволяет системе не только достигать заданной температуры, но обеспечивать корректные флуктуации энергии и других термодинамических величин. Термостат Берендсена подавляет естественные флуктуации, что приводит к искажению статистики и делает его пригодным лишь для начальной стадии моделирования, когда производится релаксация системы и доведение до определенной температуры.

Термостат Ланжевена лучше термостата Нозе-Гувера в отношении устойчивости и эргодичности. Термостат Нозе-Гувера детерминирован и расширяет фазовое пространство системы за счет введения дополнительной динамической переменной, отвечающей за термостатирование. Это позволяет точно воспроизводить каноническое распределение. На практике этот термостат может сталкиваться с проблемами недостаточной эргодичности (способность системы полностью пройти все свое фазовое пространство за достаточно долгое время). Так происходит, если в системе малое число степеней свободы или используется жесткая потенциальная функция, когда система не может достичь устойчивого равновесного распределения. Термостат Ланжевена обеспечивает постоянное

случайное возбуждение степеней свободы благодаря включению стохастического шума, что способствует эффективному перемешиванию и выходу системы на необходимую температуру. Параметр трения в термостате Ланжевена имеет ясную физическую интерпретацию. Он связан со временем релаксации скоростей и может быть подобран в соответствии с реальными условиями, например, вязкостью, в отличие от абстрактных параметров Нозе-Гувера.

Во всех моделированиях, которые проводятся в этой работе, используется термостат Ланжевена. Уравнение движения частицы массой m с использованием термостата Ланжевена записывается в виде:

$$m \frac{dv}{dt} = F_{pot} + F_r + F_f, \quad (19)$$

где F_{pot} – сила, определяемая потенциалом межатомного взаимодействия; F_r – случайная (стохастическая) сила, моделирующая взаимодействие с тепловым резервуаром; F_f – сила трения, обеспечивающая диссипацию энергии.

Случайная сила F_r имеет гауссово распределение с нулевым средним и дисперсией σ_t^2 :

$$F_r \sim N(0; \sigma_t^2), \quad \sigma_t^2 = \frac{2k_b T_t m}{\tau_t \delta t}, \quad (20)$$

где k_b – постоянная Больцмана ($1,380649 \times 10^{-23}$ Дж/К), связывающая температуру с кинетической энергией; T_t – целевая температура системы в Кельвинах; m – масса частицы в кг; τ_t – характерное время термостатирования в секундах; δt – шаг интегрирования в МД-моделировании в секундах.

Сила трения вводится для компенсации стохастического нагрева (случайной силы) и выглядит следующим образом:

$$F_f = -\frac{m(v - v_f)}{\tau_t}, \quad (21)$$

где: v – текущая скорость частицы (м/с); v_f – скорость потока (используется при моделировании течения, иначе $v_f = 0$).

Время термостатирования τ_t определяет скорость достижения теплового равновесия. Если значение τ_t мало, то это соответствует жесткому термостатированию (быстрая релаксация, но возможно нарушение стабильности кристалла при $F_r \gg F_{pot}$). Если значение τ_t велико, то термостатирование происходит мягче (медленное приближение к равновесию, но более естественная динамика).

Дисперсия случайной силы σ_l^2 зависит от температуры, массы частицы и шага интегрирования. Она обеспечивает выполнение флуктуационно-диссипационного соотношения между стохастическим нагревом и диссипацией энергии, то есть, воздействия случайной силы (которая разгоняет частицы) и силы трения (которая тормозит частицы) должны быть сбалансированны.

Рассмотрим связь термостата Ланжевена и расчетной схемой Верле в скоростном виде, используемой в этой работе. Стохастическая (случайная) и диссипативная (сила трения) силы добавляются на этапе обновления скоростей. Стандартный алгоритм выглядит следующим образом:

1. Обновление скоростей на половине шага и координат на полный шаг;
2. Расчет новых сил с использованием потенциальной функции взаимодействия атомов;
3. Обновление скоростей на второй половине шага с учетом новых сил.

Теперь в расчет добавляются случайная сила F_r и сила трения F_f . Формулы для расчета в таком случае имеют новый вид. Обновление скоростей на половине шага и координат на полный шаг:

$$\begin{aligned} v\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) &= v(t) + \frac{F(t)}{2m}\delta t, \\ \frac{F(t)}{2m}\delta t &= \frac{F_{pot}(t)}{2m}\delta t - \frac{v(t)}{2\tau_t}\delta t + \frac{F_r(t)}{2m}\delta t, \\ r(t + \delta t) &= r(t) + v\left(t + \frac{\delta t}{2}\right)\delta t, \end{aligned} \tag{22}$$

где $F(t)$ – полная сила, $r(t)$ – координаты частицы в момент t , $v(t)$ – скорости, $F_{pot}(t)$ – потенциальные силы, $F_r(t)$ – случайная сила, обновляемая на каждом шаге (из гауссова распределения $N(0, \sigma_l^2)$); сила трения F_f уже поделена на m , поэтому она здесь имеет вид $F_f/m = -(v/\tau_t)$.

Затем происходит вычисление $F_{pot}(t + \delta t)$ исходя из $r(t + \delta t)$. После вычисляются обновленные скорости на второй половине шага:

$$\begin{aligned} v(t + \delta t) &= v\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) + \frac{F(t + \delta t)}{2m}\delta t, \\ \frac{F(t + \delta t)}{2m}\delta t &= \frac{F_{pot}(t + \delta t)}{2m}\delta t - \frac{v\left(t + \frac{\delta t}{2}\right)}{2\tau_t}\delta t + \frac{F_r\left(t + \frac{\delta t}{2}\right)}{2m}\delta t. \end{aligned} \tag{23}$$

Из выражений (22) и (23) можно сделать следующие выводы о добавлении стохастической и диссипативной сил. Случайная сила F_r используется на

каждом полном шаге δt и применяется дважды за шаг (на обоих полушагах обновления скорости). Её дисперсия

$$\sigma_l^2 = \frac{2k_B T_t m}{\tau_t \delta t}$$

уже включает δt , поэтому умножение на δt в формуле компенсирует это. Если F_r добавлять только один раз за шаг, дисперсия должна быть вдвое больше:

$$\sigma_l^2 = \frac{4k_B T_t m}{\tau_t \delta t}.$$

Сила трения F_f используется на обоих полушагах обновления скорости и зависит от текущей скорости v [150].

Стоит отдельно пояснить, как именно получается такая форма дисперсии σ_l^2 . Из уравнения движения (19) величину $F_r(t)$ можно выразить следующим образом:

$$\langle F_r(t) F_r(t') \rangle = 2\gamma m k_B T_t \delta(t - t'), \quad \gamma = \frac{1}{\tau_t}, \quad (24)$$

где γ – коэффициент трения. Так как случайная сила добавляется дважды за шаг $\delta(t)$ (на половине шага), то интеграл от функции $\delta(t - t')$ можно заменить следующим выражением:

$$\int_0^{\delta t} \langle F_r(t) F_r(t') \rangle dt' \approx \sigma_l^2 \cdot \delta t.$$

Для сохранения флуктуационно-диссипационного соотношения необходимо соблюдение следующего выражения:

$$\sigma_l^2 \cdot \delta t = 2\gamma m k_B T_t,$$

откуда получается:

$$\sigma_l^2 = \frac{2\gamma m k_B T_t}{\delta t} = \frac{2m k_B T_t}{\tau_t \delta t}. \quad (25)$$

2.2.4 Потенциалы взаимодействия

Ключевым вопросом в методе молекулярной динамики является выбор правильного потенциала межатомного взаимодействия $U(\mathbf{r})$. Именно потенциал определяет физическое взаимодействие атомов друг с другом. Существует

множество потенциалов, описывающих межатомное взаимодействие. Выбор потенциала обуславливается тем, какую задачу необходимо решить, то есть, потенциал должен физически верно описывать те или иные свойства и процессы, которые необходимо рассмотреть. В случае ударно-волнового взаимодействия, такими параметрами могут быть: ударная адиабата, свойства фазовых переходов, свойства дефектов кристаллической решетки, упругие характеристики кристаллической решетки и другие.

2.2.4.1 Краткое описание потенциалов взаимодействия

На заре создания классического метода молекулярной динамики существовали парные потенциалы взаимодействия, в основе которых лежит идея о взаимодействии пары частиц друг с другом. Например, к таким потенциалам относится потенциал Леннард-Джонса [151], который подходит для описания взаимодействия между сферическими неполярными молекулами; для описания энергии двухатомной молекулы – потенциал Морзе [152]; если у молекул образуется постоянный дипольный момент – потенциал Штокмайера [153].

С дальнейшим развитием вычислительного метода и науки в целом, появляются вопросы к уже существующим потенциалам взаимодействия. Известно, что парные потенциалы не могут достаточно корректно описывать некоторые виды материалов, например, металлы. Это происходит по причине того, что данный вид потенциалов учитывает лишь только вклад электромагнитных сил парного взаимодействия. Такого рода потенциалы не позволяют получить физически верную конфигурацию кристаллических решеток, чей тип не относится к плотноупакованным. То есть, если применять данные потенциалы к типу решетки объемно-центрированная кубическая (ОЦК), то построенный кристалл не будет обладать реальными физическими свойствами в большинстве случаев применения парных потенциалов взаимодействия.

Существует такой подход к моделированию взаимодействия атомов внутри металлов и полупроводников, как метод погруженного атома (ЕАМ). В его основе лежит предположение о взаимодействии не только между атомами, но и о взаимодействии атомов с электронной плотностью.

Если вещество состоит из более чем одного типа атомов, ситуация обстоит несколько иным образом. Большинство конструкционных материалов являются многокомпонентными веществами, например, сплавы металлов. Они способны менять свои прочностные свойства в зависимости от состава. Таким образом, создание новых или модификация существующих конструкционных материалов позволит обеспечить технологическое развитие промышленности. В создании может помочь прямое атомистическое моделирование, но для работы этого метода необходим потенциал взаимодействия.

В случае с многокомпонентными системами, создание такого потенциала является трудновыполнимой задачей, так как необходимо учитывать множество разнообразных взаимодействий внутри вещества. Для получения физически верных результатов моделирования необходимо использовать такой потенциал взаимодействия, который наиболее точно отобразит исследуемые свойства. Определение, что потенциал является достаточно точным в описании необходимых свойств вещества, происходит следующим образом: проводят сравнение реальных экспериментальных свойств с тем, что было посчитано при использовании данного потенциала. В случае с многоатомными потенциалами наблюдается недостаток натурных экспериментов.

В данной работе проводится моделирование с использованием таких материалов, как алюминий, медь и фторид лития. Далее будет описана связь между исследуемыми объектами и их потенциалами взаимодействия.

2.2.4.2 Потенциалы взаимодействия исследуемых материалов

В работе [154] было предложено разделение полной потенциальной энергии атомов на энергию парного взаимодействия электромагнитных сил и энергию погружения. Предполагается, что каждый атом окружён некоторым облаком электронного газа и испытывает влияние от соседних электронных облаков. Плотность облака рассчитывается согласно теории Хартри-Фока [155], по которой многочастичная задача сводится к одночастичной, предполагая, что каждая частица движется в усреднённом поле, которое создано остальными частицами. Энергия погружения считается как избыточная энергия, которая есть у атома в однородном электронном газе в сравнении с потенциальной энергией

взаимодействия атома, разделенного с этим газом. Полная энергия системы, рассчитанная при помощи ЕАМ-потенциала, будет иметь вид:

$$\begin{aligned} E_{tot} &= \sum_i E_i, \\ E_i &= F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j, j \neq i} \varphi_{ij}(r_{ij}), \\ \rho_i &= \sum_j \varphi(r_{ij}), \end{aligned} \tag{26}$$

где E_i – потенциальная энергия атома, взаимодействующего с окружающей его средой; F_i – функция погружения; $\bar{\rho}_i$ – электронная плотность в ближайшей окрестности рассматриваемого атома; φ_{ij} – парная энергия взаимодействия двух разных атомов (не учитывая влияние электронного газа); r_{ij} – расстояние между двумя рассматриваемыми атомами; φ – вклад плотности заряда электронов от атома с индексом j в месте расположения атома с индексом i ; ρ_i – электронная плотность, которая получается при этом вкладе.

Используя такой подход построения потенциала межатомного взаимодействия при решении поставленных задач, получаются результаты, которые достаточно хорошо описывают ряд физико-механических свойств (упругие свойства, свойства дефектов). Данный вид потенциалов хорошо описывает свойства материалов с гранецентрированной-кубической решеткой (ГЦК) [156].

Алюминий в чистом виде имеет гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку, шаг которой равен $a = 0,405$ нм. Так как алюминий является металлом, то его кристаллическая решетка относится к типу металлической и имеет в своем составе свободные электроны, что накладывает определенные условия для физически верного моделирования: необходимо выбрать подходящий потенциал взаимодействия между атомами.

Сам алюминий является хорошо изученным веществом как с практической, так и с теоретической точки зрения. С помощью метода молекулярной динамики был проведен расчет ударной адиабаты и определена зависимость температура алюминия от давления при ударном сжатии, а полученные данные хорошо совпали с результатами экспериментов [157]. При расчетах также определяют другие физические параметры, например, теплоемкость [158] или теплопроводность [159]. Метод молекулярной динамики позволяет изучить изменение кристаллической структуры алюминия при его различных фазовых

состояниях [160; 161], причем не только в чистом виде [162]; существуют исследования для других процессов, которые происходят в многокомпонентной системе, например, твердофазное горение в сплаве $TiAl$ [163]. Использование прямого атомистического моделирования дает возможность смоделировать образование дефектов в кристаллической структуре, проявляющиеся при бомбардировке ионами низких энергий [164].

В Главе 3 исследуется пороговая энергия образования пластических деформаций в кристаллической решетке алюминия, а также эволюции ударной волны в веществе. Для описания взаимодействия между атомами используется хорошо отработанный ЕАМ-потенциал для алюминия [139]. Потенциал имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} x &= a_1 r^2, x_c = a_1 r_c^2, \\ V(r) &= \left(\frac{1}{x} - a_c\right)(x - x_c)^{10}((x - x_c)^6 + a_3 x^6), \\ F(n) &= \frac{b_1 n(b_2 + (b_3 + n)^2)}{1 + b_4 n}, \\ n(r) &= \frac{c_1(r^2 - r_c^2)^2}{1 + (c_2 r^2)^3}, \end{aligned} \tag{27}$$

где r_c – радиус обрезки потенциала взаимодействия и равен 0,6874 нм. Параметры a_N , b_N , c_N подбирались с помощью подгонки, $V(r)$ – парный потенциал взаимодействия, $F(n)$ – энергия погружения атома в электронное облако, $n(r)$ – функция плотности электронного облака, r – расстояние между двумя атомами. Параметры подгонки a_N , b_N , c_N были найдены путем минимизации суммы отклонений от компонент тензора холодного давления и представлены в работе [139].

Вторым из исследуемых металлов в работе является медь. Кристаллическая решетка меди относится к типу ГЦК, шаг решетки равен $a = 0,3615$ нм. Вещество относится к металлам, поэтому особенности моделирования будут такими же, как и для алюминия.

Медь, как и алюминий, является хорошо изученным и достаточно популярным материалом для проведения моделирования и экспериментов. Моделирование методом молекулярной динамики тоже проводится с использованием ЕАМ потенциала [165]. Такая методика расчета хорошо согласуется

с экспериментальными данными, например, при сравнении результатов моделирования зависимости температуры плавления от давления [166—168] с данными, полученными экспериментальным путём [169—172]. При помощи метода молекулярной динамики можно изучать механическое поведение медного кристалла в нанометровом масштабе на атомарном уровне [173; 174]. Также существуют моделирования воздействия лазерного излучения на кристалл меди, например, исследование процесса плавления меди при определенной объемной плотности вложенной энергии [175]; исследование изменения поверхности материала перед диффузионной сваркой под воздействием лазерных импульсов для улучшения адгезии [176—178].

В Главе 5 исследуется процесс термоциклирования на примере поликристалла меди. Для описания взаимодействия атомов используется ЕАМ потенциал, описанный в работе [179; 180]. Общая форма у него остается такая же, как и в (26). Потенциальная функция имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 V(r) &= v_1 (r_0^{-2} - r^{-2}) (r_c^2 - r^2)^{10} \left[(r_c^2 - r^2)^4 + v_2 r^6 \right] + \\
 &\quad \sum_{m=1}^8 e_m (r_c^2 - r^2)^{m+2} \left[1 + \sum_{m=1}^8 f_m (r_c^2 - r^2)^m \right]^{-1}, \\
 F(n) &= \frac{\sum_{m=2}^{11} c_m [(n-1)^m - (-1)^m]}{1 + \sum_{m=2}^{11} d_m [(n-1)^m - (-1)^m]}, \\
 n(r) &= \sum_{m=1}^{10} a_m (r_c^2 - r^2)^{m+2} \left[1 + \sum_{m=1}^{10} b_m (r_c^2 - r^2)^m \right]^{-1},
 \end{aligned} \tag{28}$$

где r_c — радиус обрезки потенциала взаимодействия и равен 0,5859 нм. Параметры v_1 , v_2 , r_0 , a_m , b_m , c_m , d_m , e_m , f_m подбирались с помощью подгонки, $V(r)$ — парный потенциал взаимодействия, $F(n)$ — энергия погружения атома в электронное облако, $n(r)$ — функция плотности электронного облака, r — расстояние между двумя атомами. Подгонка проводилась путём минимизации целевой функции, состоящей из отклонений от базы данных подгонки и штрафов за нарушение монотонности кривых напряжение–деформация, с использованием алгоритма Нелдера–Мида [181; 182].

В Главе 4 исследуется процесс образования полости на примере кристалла фторида лития. Этот кристалл имеет химическую формулу LiF, что говорит о его неметаллической природе. Для его моделирования используется парный потенциал.

За основу потенциала взаимодействия, который используется в данном моделировании, взят потенциал Букингема [183]. Он относится к парному типу потенциалов взаимодействия. Но в отличие от стандартных парных потенциалов, в которых взаимодействие двух частиц зависит только от их положения относительно друг друга, потенциал Букингема можно считать более обоснованным с теоретической точки зрения. Он включает в себя дополнительное слагаемое, которое описывает притяжение за счет диполь-квадрупольного взаимодействия ($\sim r^{-8}$). В потенциал также входят экспоненциальное отталкивание (Ae^{-Br}) и слагаемое притяжения ($\sim r^{-6}$):

$$U(r) = Ae^{-Br} - \frac{\lambda}{r^6} - \frac{\lambda'}{r^8}. \quad (29)$$

Здесь величины A , B , λ – некоторые параметры потенциала, r – расстояние между двумя частицами. Более подробная информация представлена в Главе 4, так как данная потенциальная функция была впервые апробирована на описываемой в главе задаче.

2.2.5 Декомпозиция расчетной области и параллелизация

Самой трудозатратной операцией в методе молекулярной динамики является расчет большого количества расчета межатомных расстояний, необходимых для расчета сил взаимодействия, а также подсчет новых скоростей, координат и ускорений. Для ускорения используются как программные методы (применение различного рода алгоритмов), так и аппаратные методы (применение большего количества вычислительных узлов в кластере или использование GPU). В данной работе расчетная область декомпозируется на ячейки Вороного, параллелизация обеспечивается использованием библиотеки MPI, расчёты проводятся на вычислительном кластере.

2.2.5.1 Разбиение расчетной области на ячейки Вороного

В качестве программного метода ускорения расчетов рассматривается обрезание радиуса потенциала взаимодействия. Для этого выбирается некоторая величина r_{cutoff} , такая, что при $r_{ij} > r_{cutoff}$ взаимодействием между атомами можно пренебречь, и тогда сила взаимодействия становится равной нулю. Расчет уравнений производится только с теми частицами, которые удовлетворяют условию $r_{ij} < r_{cutoff}$. Но такой вариант предполагает перебор частиц всей системы для определения тех, кто удовлетворяет условию.

Можно воспользоваться следующим допущением. Предполагается, что за малый промежуток времени положение частиц в пространстве не успевает сильно измениться. Тогда, можно принять, что список наблюдаемых соседей, удовлетворяющих условию $r_{ij} < r_{hor}$, достаточен для определения взаимодействующих пар на некотором интервале времени. Радиус наблюдения $r_{hor} = r_{cutoff} + r_{buff}$ представляет из себя увеличенный на некоторый буффер радиус обрезания, размер буффера определяется условиями задачи. Отпадает необходимость выполнять проверку частиц всей системы на предмет удовлетворения условия. После 10-15 шагов расчета, данный список соседних атомов или же, другими словами, список соседей, перестраивается. Происходит это следующим образом.

Рассмотрим моделируемую область с размером $L_x L_y L_z$, разбитую на ячейки размером r_{hor} . Тогда число ячеек в направлении всех трех осей будет равно:

$$N_i = \frac{L_i}{r_{hor}}, \quad i = x, y, z. \quad (30)$$

Общее число ячеек $N_{all} = N_x N_y N_z$. Линейные размеры ячеек вычисляются как:

$$l_i = \frac{L_i}{N_i}, \quad i = x, y, z. \quad (31)$$

Построение такой структуры данных происходит следующим образом. Выбранная область разбивается на ячейки с некоторым размером, не больше радиуса наблюдения r_{hor} . Считается, что атом в ячейке может взаимодействовать только с атомами, находящимися в этой ячейке, а также с атомами из соседних ячеек. Для нумерации ячеек используется декартовая нумерация $[i, j, k]$.

Зная индекс выбранной ячейки, мы можем найти 26 её соседей (в трехмерном случае), у которых будут следующие номера: $[i - 1, j - 1, k - 1]$, $[i, j - 1, k - 1]$, ..., $[i + 1, j + 1, k + 1]$. У выбранной ячейки индекс равен $[i, j, k]$. Ячейки, которые находятся на границе моделируемой области, получают своих соседей исходя из используемых граничных условий.

Возможно применение комбинации алгоритмических методов ускорения расчета с аппаратными. В таком случае, при использовании большого числа вычислительных машин, можно уменьшить количество рассчитываемых атомов. Число уравнений по отношению к одной вычислительной единице тоже уменьшится. Для определения числа атомов, которые должна считать одна вычислительная машина, проводится декомпозиция расчетной области. В данной работе область разбивается на ячейки Вороного.

Ячейки Вороного представляют из себя выпуклые многоугольники, которые затем собираются в диаграмму Вороного. Выпуклые многоугольники образуются пересечением конечного числа замкнутых полуплоскостей. В ячейках находятся атомы, которые ближе всего к выбранной точке в пространстве, вокруг которой строится ячейка. Для построения одной ячейки произвольно выбираются две точки. Затем проводится отрезок, соединяющий эти две точки, и прямая, которая пересекает этот отрезок в качестве серединного перпендикуляра. Эта прямая разделяет плоскость на полуплоскости, где одной полуплоскости принадлежит одна из выбранных точек, а другой – другая. Если ячейка строится для первой точки, то выбирается новая точка из первой полуплоскости, и выполняются те же самые операции. Так происходит до тех пор, пока выбранная точка не окажется внутри выпуклого многоугольника. Полученный многоугольник и есть ячейка Вороного. Данная операция повторяется для оставшихся точек до тех пор, пока каждая выбранная точка не окажется внутри своего многоугольника.

В математической постановке это выглядит следующим образом. Представим, что у нас есть некоторое множество P , состоящее из n точек на плоскости. Эти точки называются являются центрами ячеек. Применим некоторый алгоритм к этому множеству точек, такой, чтобы каждый из сайтов имел подмножество точек, расстояние до которых является меньше, чем до других центров. Иными словами, $dist(x, s) \leq \min_{z \in P} (dist(x, z)) \rightarrow x \in V(a)$, где $V(a)$ обозначает ячейку.

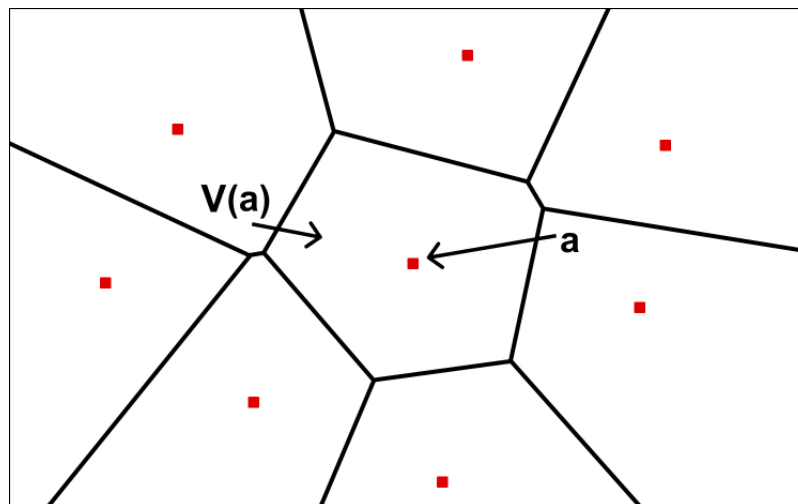


Рисунок 7 — Схематическое изображение ячеек Вороного. На плоскости a — центр ячейки, $V(a)$ — сама ячейка.

Выбор разбиения расчетной области на ячейки Вороного обусловлен способностью автоматически адаптироваться к пространственному распределению частиц. Диаграмма Вороного способна измельчаться в областях с высокой плотностью частиц и укрупняться в разреженных областях. Это свойство обеспечивает балансировку вычислительной нагрузки между процессами в параллельных алгоритмах, минимизируя объем межпроцессорного обмена.

2.2.5.2 Библиотека MPI

Кроме алгоритмического ускорения применяется аппаратное ускорение. В этом случае расчет проводится не на одном вычислительном узле, а на нескольких. Таким образом, задача решается в параллельном режиме, когда происходит разбиение основной задачи на подзадачи, которые решаются одновременно.

Для правильной параллелизации необходимо настроить взаимодействие между вычислительными машинами. Настройка производится при помощи программной библиотеки MPI (message passing interface). Эта библиотека содержит набор функций, которые предназначены для поддержки работы параллельных вычислений. MPI предоставляет единый механизм взаимодействия процессов внутри параллельного приложения. Программа, написанная с использованием MPI, является более простой в плане отладки и переноса на другие платформы.

В минимальном виде в состав MPI входят заголовочные и библиотечные файлы, а также загрузчик приложений. Библиотека используется для языков программирования C, C++ и FORTRAN. Взаимодействие вычислительных машин друг с другом может быть настроено тремя разными способами:

1. Через общую память;
2. Через скоростную сеть многопроцессорных систем;
3. Через протокол TCP/IP.

Параллельное приложение состоит из нескольких процессов, которые выполняются одновременно. Каждому процессу присваивается уникальный номер. Не имеет значения, на одном или нескольких процессорах выполняются процессы, так как алгоритм обмена данными будет одинаковым. Каждому процессу присваивается свой уникальный номер.

В вычислительной задаче процессы обмениваются следующей информацией. Так как расчетная область разбивается на ячейки Вороного, то каждый процесс производит расчет над одной ячейкой. В процессе вычисления частицы меняют свои координаты, следовательно, и меняется принадлежность частиц к ячейкам Вороного. По прошествии некоторого количества шагов по времени происходит перестроение ячеек, и процессы передают своим соседям о частицах, которые теперь принадлежат не им, а соседним процессам. Происходит передача частиц соседям, при этом передаются значения координат, скоростей и ускорений атомов. Кроме того, происходит передача информации об атомах, которые находятся в приграничной области ячейки, так как они оказывают влияние на соседние ячейки. Передается информация о координатах таких частиц, так как это необходимо для расчета сил взаимодействия. Толщина приграничного слоя не превышает значения радиуса наблюдения взаимодействия потенциала.

Глава 3. Численное исследование воздействия ультракороткого лазерного импульса на алюминий

При мощном лазерном воздействии возможны необратимые изменения в кристаллической решетке облучаемого материала. При воздействии лазерного излучения на материал в веществе возникает ударная волна. Ударная волна может быть чисто упругой, создавая только упругие деформации, а может иметь двухволновую конфигурацию, то есть, состоять из упругой и пластической волн. Такая конфигурация возникает в том случае, если ударная волна обладает давлением выше предела пластичности материала. Если лазерный импульс имеет достаточно энергии для образования двухволновой конфигурации, то пластическая ударная волна сможет создать пластические деформации в глубине вещества.

Исследование ударной волны в реальном времени экспериментальными методами является трудоемким процессом, который требует наличия сложного оборудования и постобработки. Для того, чтобы увидеть движение ударной волны в каком-либо веществе, необходимо использовать рентгеновский микроскоп. В таком микроскопе излучение необходимой мощности и длительности получают при использовании лазера на свободных электронах [184]. Также существует система VISAR, которая использует лазерную интерферометрию для измерения скорости поверхности твердых тел, движущихся с высокой скоростью [185]. Таких установок в мире мало, поэтому использование моделирования является наиболее подходящим вариантом для исследования эволюции ударной волны. Моделирование позволяет нам оценить результаты воздействия на вещество со стороны ударно-волнового фронта.

3.1 Сравнительный анализ двумерных плоской и осесимметричной геометрий

При помощи прямого атомистического моделирования в двумерной постановке исследовано множество различных задач воздействия УВ на вещество [186—195]. В контексте данной работы представляют интерес исследования в

области высокоэнергетических ударно-волновых процессов, а именно исследование ультракороткого лазерного воздействия на вещество [4; 196]. В данных работах описание эволюции ударной волны в двумерной постановке проводится при помощи метода молекулярной динамики. Этот метод используется из-за возможности провести прямое атомистическое моделирование процесса волнообразования, возникающего при облучении мишени ультракоротким лазерным импульсом, и исследовать последствия облучения: изменение поверхности и приповерхностного слоя материала, а также его кристаллическую структуру в глубине вещества [40; 140; 197; 198].

При ультракоротком лазерном воздействии источником ударной волны является часть вещества, поперечный размер которого равен некоторому диаметру D_L . Толщина прогретого слоя составляет d_T . Такой нагрев происходит очень быстро, за время, много меньшее $t_s = d_T/c_s$, где c_s – скорость звука, t_s – время, за которое звук проходит толщину прогретого слоя d_T . То есть, нагрев слоя толщиной d_T происходит за время, которое меньше звукового масштаба времени t_s .

В реальных условиях при лазерном облучении возникает двухтемпературный режим, когда энергия сначала поглощается электронной подсистемой, а затем передается кристаллической решетке через электрон-фононную релаксацию [199]. Характерное время этой релаксации для металлов составляет сотни фемтосекунд. В данной работе не используется двухтемпературная модель, поскольку время нагрева во всех расчетах этой работы превышает характерное время электрон-фононной релаксации, что позволяет считать процесс нагрева однотемпературным. Электронная и ионная подсистемы находятся в состоянии локального теплового равновесия к моменту формирования ударной волны. Глубина прогрева в моделировании подразумевает, что электронная подсистема прорелаксировала до этого значения. К тому же, классическая молекулярная динамика имеет ограничения при моделировании электронов.

В двумерном моделировании можно рассматривать плоскую и осесимметричную геометрии. Выбор зависит от того, в какой области образца и какие процессы рассматриваются. Благодаря правильному выбору геометрии, можно значительно упростить расчет, снизив нагрузку на вычислительную машину [134], или расширить своё представление о процессе, если требуется понимание пространственных эффектов явления. В случае, если пятно нагрева тонкое ($d_T \ll R_L$) и рассматриваемые процессы находятся в ближней зоне

($L_{SW} \ll R_L$), то отличий в плоской и осесимметричной геометриях нет. Здесь R_L – радиус пятна фокусировки на поверхности облучаемого материала, L_{SW} – дистанция распространения ударной волны. Отличия будут наблюдаться в дальней зоне, когда ударная волна пройдет глубже в вещество. Это объясняется тем, что асимптотические законы затухания зависят от геометрии [40; 200].

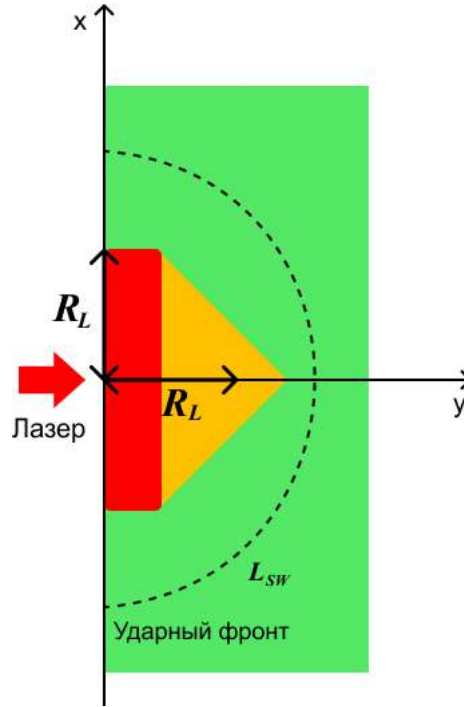


Рисунок 8 — Схематичное изображение моделируемого нагрева. Черная пунктирная линия есть граница L_{SW} .

Рассмотрим подробнее основные отличия плоской и осесимметричной геометрий. Движение плоской волны направлено вдоль одной из координатных осей, совпадающей с направлением воздействия ударной волны. Осесимметричная ударная волна направлена от поверхности вглубь вещества. Направления воздействия подбираются, исходя из индексов Миллера (пункт 2.2.2.6). Индексы определяют плоскости, перпендикулярно которым происходит воздействие на материал. Выбор конкретной кристаллографической ориентации позволяет исследовать анизотропные эффекты – различия в скорости распространения, структуре фронта волны или механизмах пластической деформации в зависимости от направления.

Плоский фронт ударной волны можно получить на начальной стадии, если пятно нагрева будет иметь размеры, при которых глубина прогрева меньше ширины прогрева. В нашем случае, глубина прогрева составляет $d_T = 20$ нм, а ширина прогрева $R_L = 50$ нм. При этом пятно нагрева представляет из себя

тонкий и широкий прямоугольник. В самом начале скорость волны одинаковая во всех её точках. По мере прохождения ударной волны вглубь вещества, происходит уменьшение скорости волны по краям, в центре ударного фронта скорость так быстро не угасает. Это происходит из-за того, что на краях фронта возникают волны разгрузки, которые формируются, когда ударное возмущение достигает границы нагретой области и взаимодействует с невозмущенным материалом. На центральную часть волны оказывает влияние разгрузка, возникающая только от прохождения волны вглубь вещества, поэтому фронт волны закругляется. Окончательное завершение перехода к осесимметричной геометрии происходит тогда, когда волна проходит расстояние, примерно равное диаметру пятна нагрева. Далее будут рассмотрены процессы, которые происходят при эволюционном развитии ударно-волнового воздействия.

3.2 Моделирование модификации кристалла алюминия

В качестве примера исследования ударной волны и результатов её воздействия на вещество рассмотрим следующее. Определим, как влияют различные начальные условия образца на глубину залегания пластически деформированного слоя, а также определим энергию, при которой эти самые деформации начинаются.

3.2.1 Постановка задачи

Численное моделирование проводилось с использованием метода молекулярной динамики. В качестве образца выступает тонкая пленка из алюминия с гранецентрированной кубической решеткой (ГЦК, постоянная решетки $a = 0,405$ нм, обозначающая размер элементарной ячейки во всех трёх направлениях) и размерами $L_x * L_y * L_z = 200 * 640 * 20$ нм, примерное число частиц равно $4 * (L_x * L_y * L_z) / a^3 \approx 154 * (10^6)$.

В поперечном направлении образец обладает малыми размерами по сравнению с другими направлениями. Поэтому эта задача условно называется

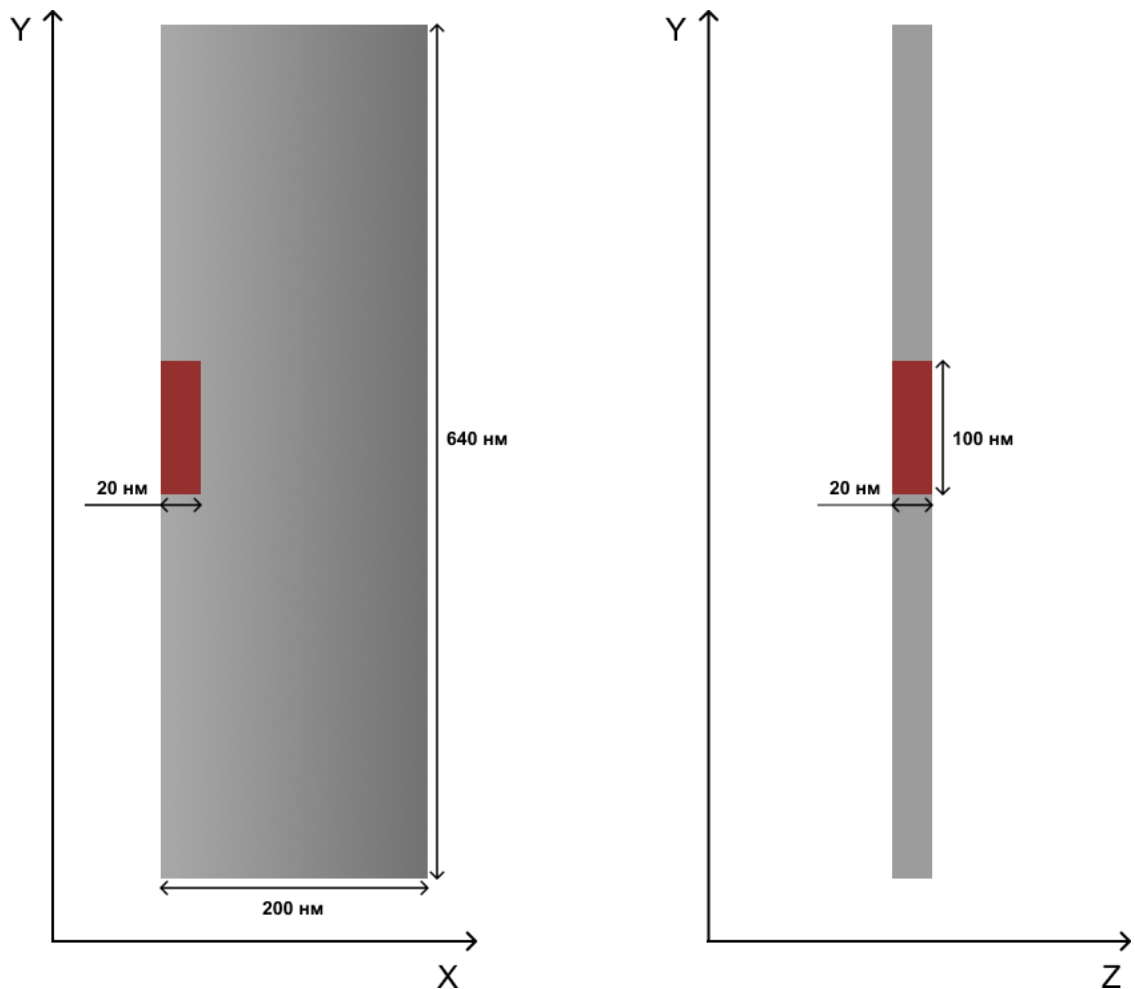


Рисунок 9 — Схематическое изображение моделируемого кристалла.

ся двумерной. Задание малого размера образца в поперечном направлении обусловлено необходимостью уменьшения флуктуаций некоторых физических величин, это является особенностью метода молекулярной динамики. Предполагается, что по оси Z образец имеет периодические граничные условия, что делает его бесконечным в этом направлении. Для того, чтобы вдоль оси Z не было никакого влияния на моделирование, в этом направлении должны отсутствовать какие-либо течения, поэтому образец греется по всей оси. Благодаря этому условию в сочетании с периодическими граничными условиями, можно считать, что наша задача является двумерной.

Направления воздействия ударной волны вдоль всех трех осей выбирались из соображений удобства демонстрации её полной эволюции. Это дает возможность проследить смену режима её перехода из плоского состояния в полусферический. Такая конфигурация кристаллической решетки имеет следующие индексы Миллера: $[1, 1, 1]$, $[-1, 1, 0]$, $[-1, -1, 2]$. Для демонстрации фронта ударной волны разной формы, были рассмотрены ещё две модификации кри-

сталлической решетки. Первая – $[1, 0, 0]$, $[0, 1, 0]$, $[0, 0, 1]$; вторая – $[1, 1, 0]$, $[-1, 1, 0]$, $[0, 0, 1]$. Как выглядят плоскости, очерченные по индексам Миллера, указано в 2.2.2.6.

3.2.2 Молекулярно-динамическое моделирование модификации алюминия лазерной ударной волной при разных температурах образца

В данном разделе дается сравнительный анализ распространения ударной волны в образце алюминия при различных температурах образца.

На рисунке 10 ниже представлено общее давление для всех трех конфигураций. Здесь представлена финальная эволюционная форма ударной волны. Названия конфигурациям даны, исходя из первых индексов плоскостей каждой конфигурации кристаллической решетки.

Здесь хорошо видна зависимость формы ударной волны от направления ударного воздействия. Ориентация (100) имеет ярко выраженную плоскую форму, это происходит из-за того, что воздействие идет строго вдоль оси X. Края волны закругляются, но это закругление не так ясно выражено, как для ориентации (111), где воздействие происходит вдоль всех трёх осей. Такая форма ударной волны (ориентация (111)) наиболее точно описывает задачу в осесимметричной геометрии. Поэтому для дальнейшего рассмотрения выбирается именно эта ориентация.

Температура кристалла не оказывает влияния на форму ударной волны, но она влияет на некоторые физические параметры и величины. Например, в более горячем образце скорость ударного фронта волны будет меньше относительно холодного образца, потому что плотность у горячего вещества меньше. На рисунке 11 представлено сравнение ударно-волнового фронта в горячем, близком к плавлению, (850 K) и холодном, комнатной температуры, (300 K) образцах. За один и тот же промежуток времени в горячем образце волна прошла расстояние меньше, чем в холодном. Это происходит по причине того, что скорость ударной волны в веществе $v = \sqrt{K/\rho}$ зависит от модуля упругости K и плотности ρ . Значение модуля упругости уменьшается быстрее, чем величина плотности материала.

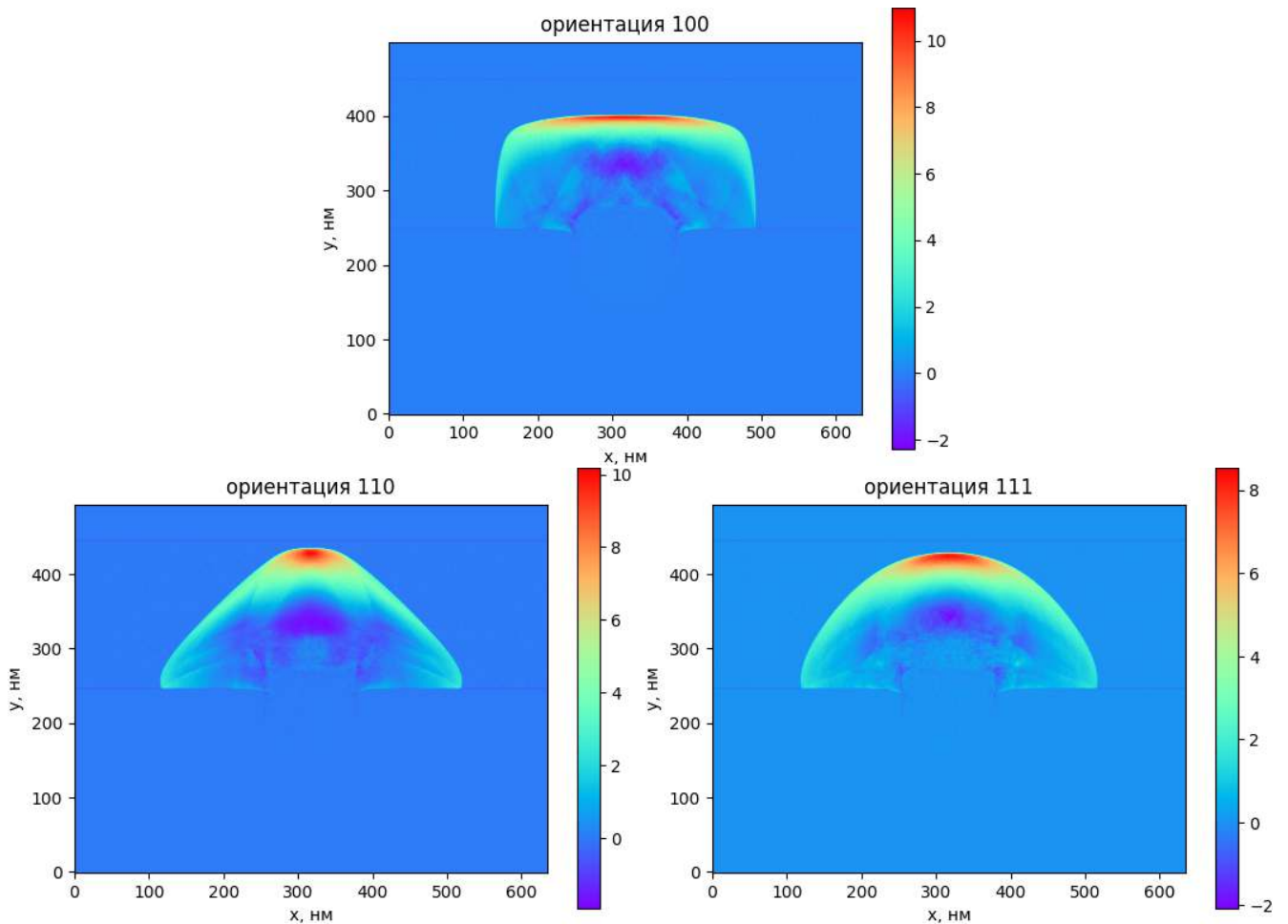


Рисунок 10 — 2D-картинки давления (общего), ориентации (100), (110), (111) в разрезе плоскости XY, момент времени 19,2 пс, температура 300 К. Максимальное давление на фронте ударной волны для каждой конфигурации соответственно – 10,99 ГПа, 10,19 ГПа, 8,54 ГПа.

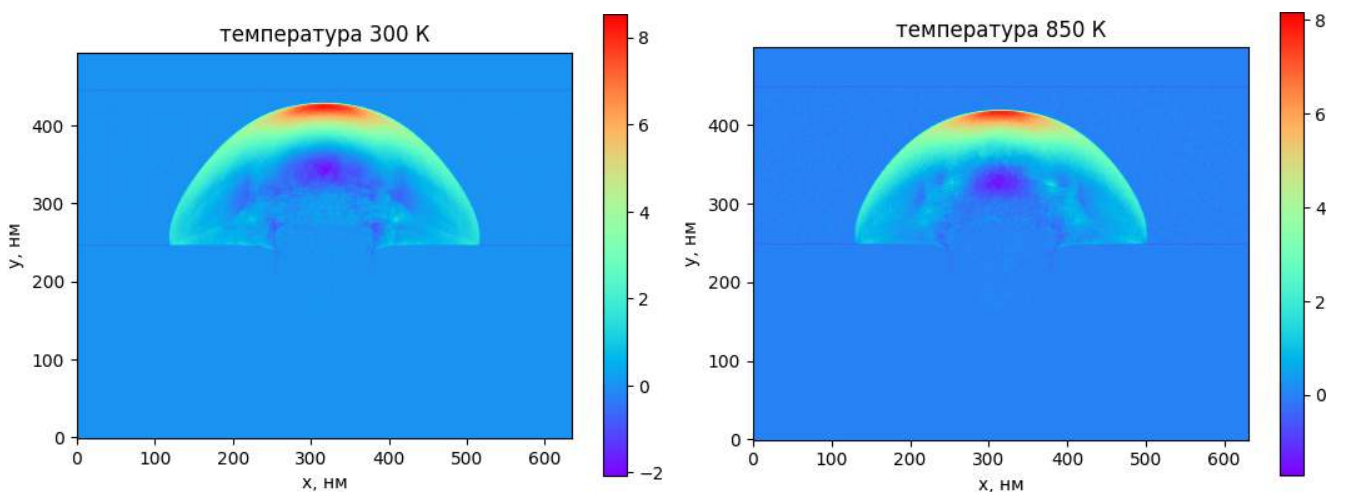


Рисунок 11 — 2D-картинки давления (общего), ориентация (111) в разрезе плоскости XY, момент времени 19,2 пс, температура 300 К (слева) и 850 К (справа). Максимальные давления равны 8,54 ГПа и 8,16 ГПа соответственно.

3.2.3 Молекулярно-динамическое моделирование модификации кристалла алюминия лазерной ударной волной (при температуре образца 850 К)

Лазерное ударное воздействие тесно связано с таким явлением, как лазерное термоупрочнение. Стойкость материала к внешним воздействиям повышается из-за того, что происходит изменение его кристаллической структуры. Ударная волна состоит из двух частей: упругой и пластической. Пластическая часть ответственна за упрочнение облучаемого материала [40]. Предел Гюгонио [201] является пределом упругости данного вещества, ниже которого пластические деформации невозможны. Другими словами, он показывает минимально возможную величину сдвиговых напряжений, без которых вещество не изменит свою структуру и не упрочнится.

Ударная волна, проходя по веществу, затрачивает свою энергию на деформацию кристаллической структуры материала. Если нагреть вещество, то его предел упругости станет меньше, следовательно, зона возможных пластических деформаций будет больше. Определить глубину залегания пластических деформаций можно при помощи локального параметра центральной симметрии [202]:

$$Cs = \sum_{i < j} \left(1 + \left[\frac{r_{ik} - r_{jk}}{c \times r_k} \right]^8 \right)^{-1} \quad (32)$$

где r_{ik} – расстояние между i и k атомами, r_{jk} – расстояние между j и k атомами, r_k – радиус, вокруг которого ищутся пары взаимодействующих друг с другом атомов, c – константа Линдемманна для критерия плавления (численно находится в диапазоне 0,1~0,2) [203]. Этот параметр означает количество симметрично расположенных пар у каждого атома кристаллической решетки в некотором объеме. У пластически недеформированной кристаллической решетки алюминия этот параметр равен 6.

На рисунке 12 представлено распределение пластических деформаций для образца алюминия с температурой 300 К и 850 К, когда пластический фронт окончательно затух, и волна перешла в упругий режим распространения. Целевая температура в пятне нагрева составляет 20000 К, что соответствует значению вложенной энергии в 686 Дж/м² для 300 К и 630,5 Дж/м² для 850 К.

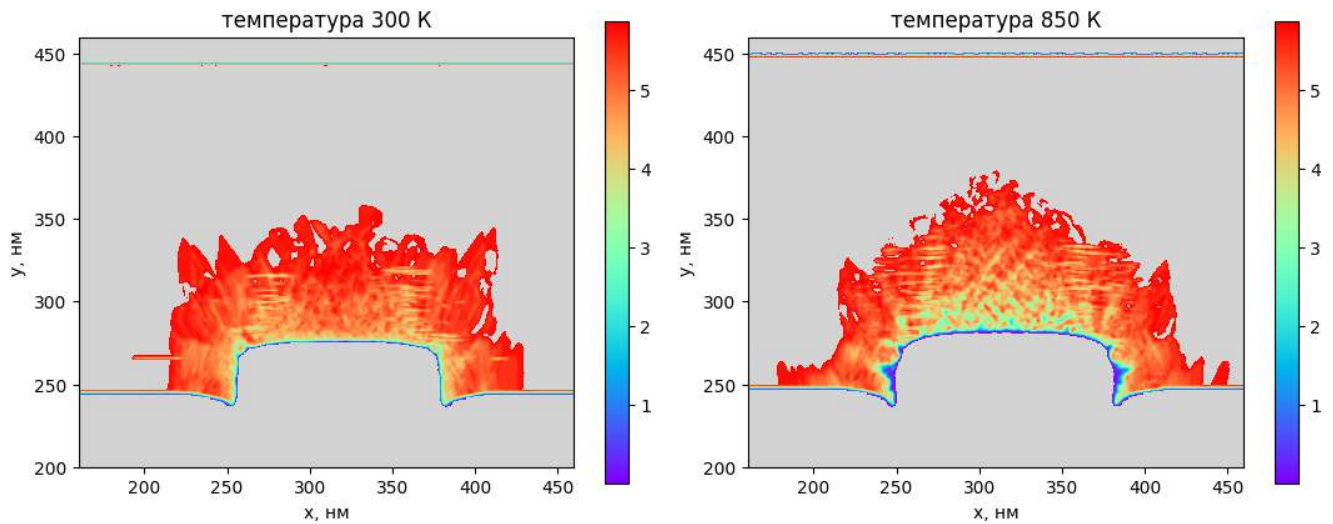


Рисунок 12 — 2D-картинки локального параметра центральной симметрии для ориентации кристалла алюминия (111). Слева температура образца 300 К, справа — 850 К. Серая область — не подвергшаяся воздействию пластической УВ.

На рисунке 12 видно, что у более горячего образца глубина залегания деформаций больше, при условии, что вложенная энергия меньше, чем у холодного. В следующем пункте подробно объясняется, из-за чего так происходит.

3.2.4 Сравнительный анализ влияния различной вложенной энергии на процесс модификации алюминия лазерной ударной волной

Прочность приповерхностного слоя материала тесно связана с глубиной залегания пластически деформированного слоя. Добиться более глубокого залегания можно не только путем нагрева материала до температуры, близкой к температуре плавления, но и с увеличением вложенной энергии в пятне нагрева. Минимальная вложенная энергия, при превышении которой вещество начинает пластически деформироваться, есть важнейшая характеристика лазерного термоупрочнения.

В качестве примера проведем сравнительный анализ двух одинаковых ориентаций кристалла алюминия — (111), но при разной температуре образца — 300 К и 850 К. Для начала покажем, как сильно изменяется максимальная глубина залегания деформаций. Для этого нужно определить значение локального

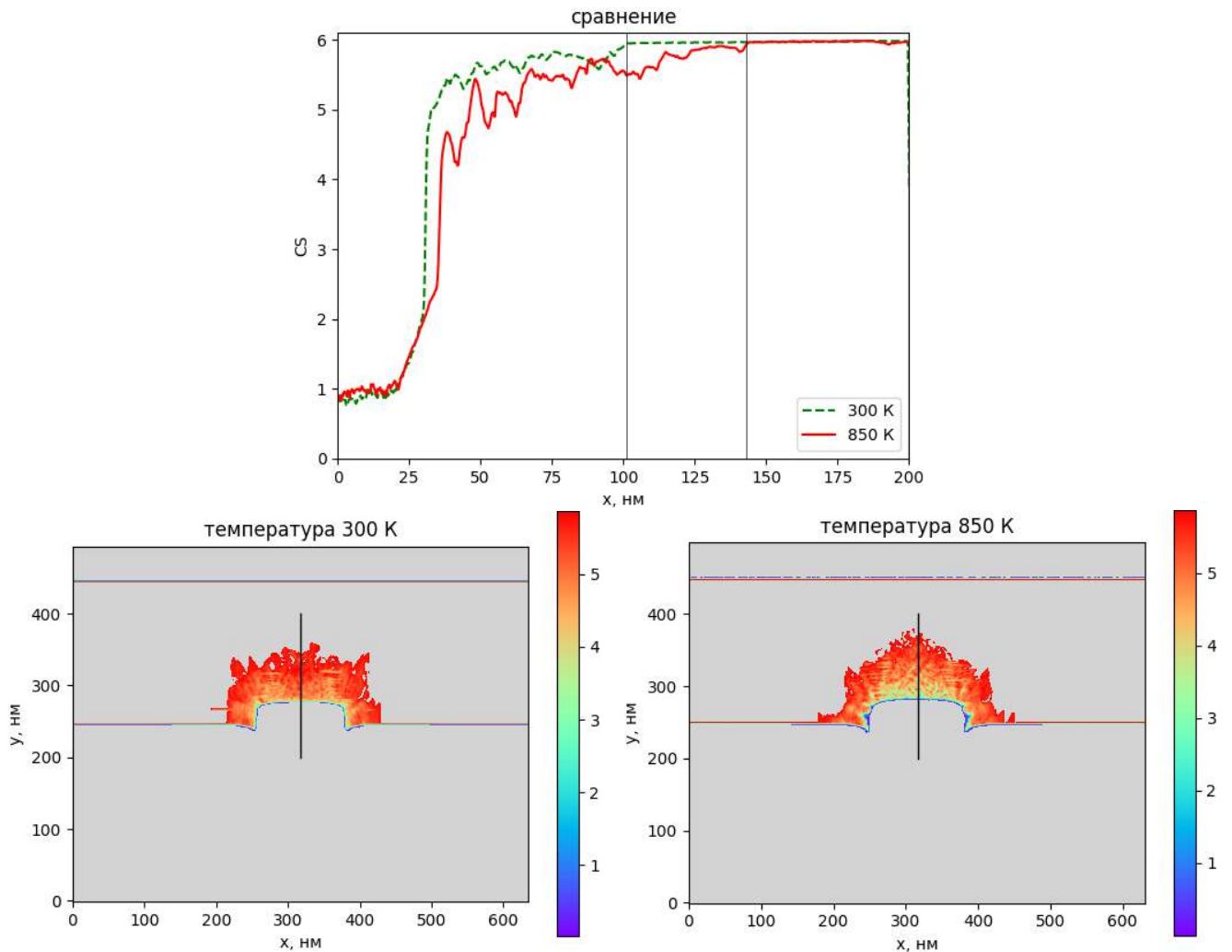


Рисунок 13 — Максимальная глубина залегания пластических деформаций для образца с температурой 300 К и 850 К. Значения глубин равны ~ 100 нм и ~ 143 нм соответственно (данные взяты вдоль черной линии).

порядка центральной симметрии вдоль центральной оси симметрии (черная линия на 2D-картинках на рисунке 13).

На рисунке 13 глубина залегания представлена для вложенной энергии со значением в 686 Дж/м^2 для 300 К и $630,5 \text{ Дж/м}^2$ для 850 К. Разница обусловлена тем, что область пятна нагрева во втором случае имеет более высокую температуру перед началом лазерного воздействия, поэтому, для достижения целевой температуры, необходимо затратить меньшее количество энергии по сравнению с первым случаем. Видно, что глубина залегания отличается почти в полтора раза – около 100 нм для 300 К против 143 нм для 850 К. Теперь определим минимальную вложенную энергию, после которой начинаются пластические деформации для экспериментов с разными температурами. Для этого

необходимо построить зависимость глубины залегания деформаций от значения вложенной энергии.

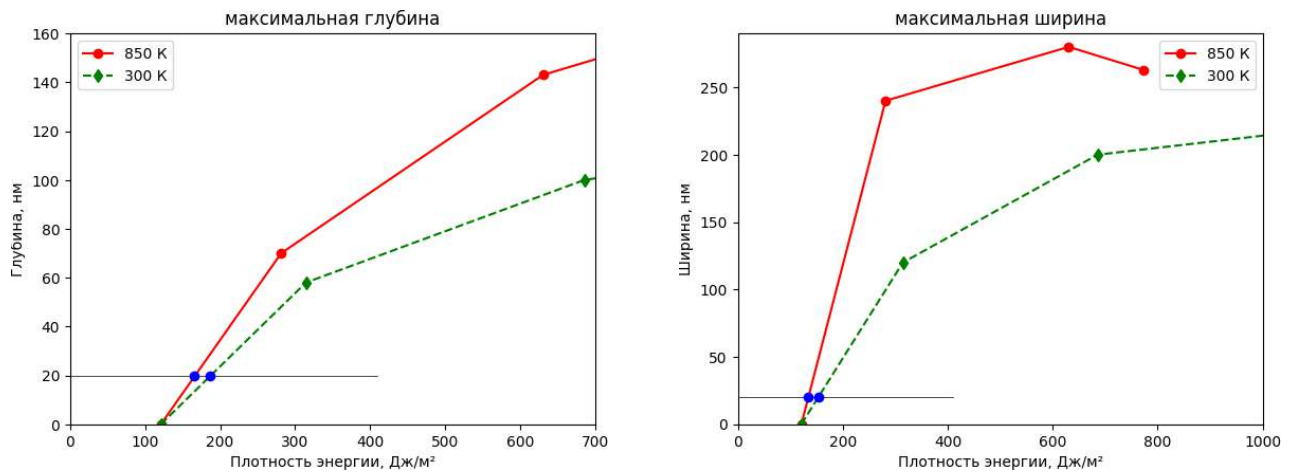


Рисунок 14 — Зависимость максимальных глубины (слева) и ширины (справа) залегания пластических деформаций для образца с температурой 300 К и 850 К.

На рисунке 14 представлено сравнение глубины и ширины залегания пластических деформаций в зависимости от вложенной энергии. На левом графике показаны значения минимальных вложенных энергий для двух случаев (синие точки). Эти точки определяются на пересечении линии 20 нм, так как размер области лазерного воздействия, в которую «вкладывается» энергия, имеет размеры 100 нм в диаметре и 20 нм в глубину. Это означает, что деформации могут начинаться только с глубины в 20 нм. Значения минимальных вложенных энергий, которые получились при этом, равны $188,36 \text{ Дж/м}^2$ и $166,02 \text{ Дж/м}^2$ для 300 К и 850 К соответственно (разница составляет примерно 13%).

Отдельно стоит упомянуть, как выглядит модифицированная структура алюминия после лазерного облучения в реальности. В качестве примера рассмотрим кристалл алюминия марки АД1. Алюминий такой марки обладает высокой чистотой. Размер зерен у такой марки порядка 2 мкм, что отлично подходит под рассматриваемое в работе моделирование.

Лазерное облучение проводилось на установке «Лазерный тераваттный фемтосекундный комплекс» в ОИВТ РАН. Интенсивность импульса составляла $1,25E+14 \text{ Вт/см}^2$, длительность 110 фемтосекунд [204], показано на рисунке 15.

Исследование микроструктуры образца, вырезанного из центра кратера, проводилось просвечивающей электронной микроскопией. В приповерхностном слое толщиной 500 нм наблюдается столбчатая структура, направленная перпендикулярно поверхности. Такая структура характерна для расплава. В



Рисунок 15 — Микроструктура образца, который был вырезан из центра кратера [204].

дополнении к этому, можно видеть малоугловые границы и повышенную плотность дислокаций [204].

3.3 Влияние граничных условий на модификацию алюминия лазерной ударной волной

Правильный выбор граничных условий (ГУ) для моделируемого кристалла является важным пунктом в решении задачи. В моделировании используются поглощающие, периодические и свободные граничные условия. Вдоль осей Y и Z выбраны периодические граничные условия, на левой границе расчетной области стоят поглощающие граничные условия; свободные граничные условия находятся на границе «вещество-вакуум» (рисунок 16).

3.3.1 Молекулярно-динамическое моделирование при поглощающих граничных условиях

Поглощающие граничные условия в этом моделировании установлены в отрицательном направлении оси X . При моделировании фемтосекундного ла-

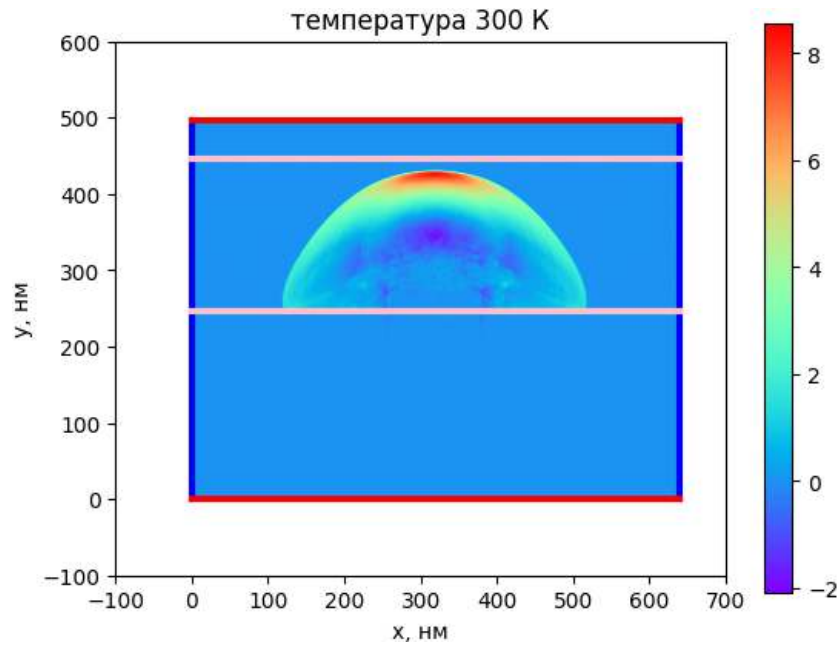


Рисунок 16 — Красные линии – поглощающие ГУ, розовые линии – свободные ГУ, синие линии – периодические ГУ. В качестве примера взята карта 2D-давления для образца 300 К, момент времени 19,2 пс.

зерного воздействия, происходит резкий нагрев вещества за очень короткое время. За время порядка 200 фс алюминий «нагревается» до целевой температуры 20000 К в области лазерного воздействия, что соответствует вложенной энергии 686 Дж/м² (данная конфигурация выбрана в качестве примера). При этом, в области воздействия образуется высокое давление ~ 35 ГПа. Так как предполагается, что наш образец находится в вакууме, то происходит «взрыв» вещества в направлении вакуума. В зависимости от количества вложенной энергии, вещество может вспениться или вылететь в отрицательном направлении оси X в виде плазменного факела.

Зеленый цвет на рисунке 17 означает, что вещество находится в твердом состоянии, оттенки синего – в состоянии жидкости или газа.

Когда вещество движется с большой скоростью по направлению к границе области моделирования, оно может достигнуть этой границы ещё до того, как будет завершено моделирование интересующего процесса. Поэтому, необходимо подобрать правильные граничные условия, при которых эта часть вещества не окажет влияние на моделирование УВ. Наиболее подходящим вариантом граничных условий будут поглощающие. При таких условиях, частицы, достигающие некоторую границу, пересекая её, удаляются из системы.

Если выбирать упругие граничные условия, то частицы, достигнув границы, начнут движение в обратную сторону. Это окажет серьезное влияние при

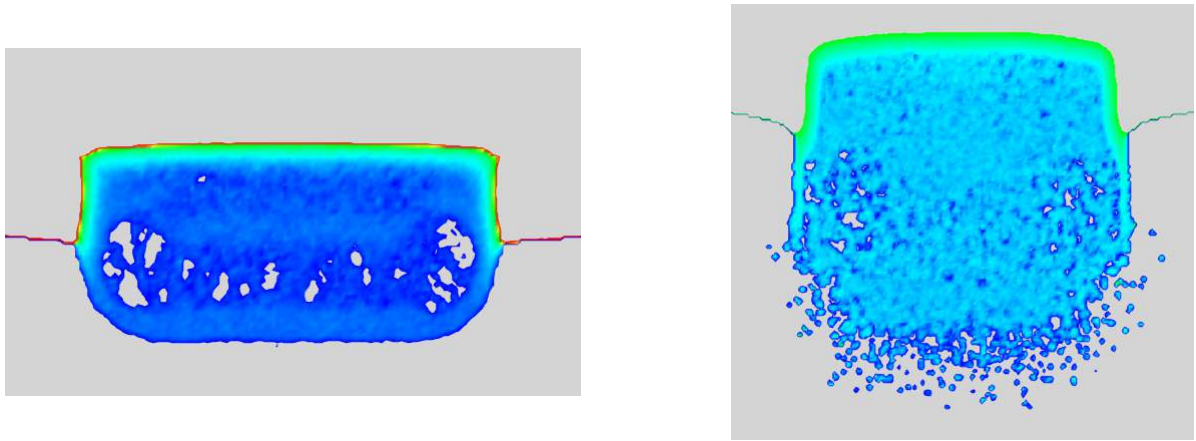


Рисунок 17 — Вспененное вещество (слева) и плазменный факел (справа). 2D-изображение параметра локальной симметрии C_s . У вспененного вещества параметр симметрии в этой области равен $\sim 1-2$. У факела этот параметр находится в диапазоне $0,1-1$.

рассмотрении боковых волн, которые возникают у свободной поверхности, так как частиц много, и они обладают большой энергией.

В случае с периодическими граничными условиями, в которых предполагается, что с рассматриваемой областью граничат идентичные области, может возникнуть следующая ситуация. Атомы, вылетевшие из плазменного факела, придут на свободную границу, противоположную той, где находится пятно нагрева. Эти атомы, передав энергию, могут образовать упругую ударную волну, которая пойдет навстречу исследуемой волне, что окажет сильное влияние на правильность результатов моделирования.

3.3.2 Молекулярно-динамическое моделирование при периодических граничных условиях

Так как метод молекулярной динамики обладает ограничениями в размерах моделируемой области, то для представления того, что моделируется некоторый большой образец, используются периодические граничные условия. В их основе лежит утверждение, что вокруг моделируемой ячейки находятся точно такие же ячейки, и воздействуют они друг на друга одинаково.

Периодические граничные условия используются для двумерного моделирования. Так как в основе молекулярной динамики лежит моделирование

взаимодействия атомов, то нельзя построить образец с единичной толщиной вдоль одной из осей так, чтобы не возникло больших флуктуаций физических величин. Поэтому, как и в описываемом моделировании, задается некоторая толщина по оси Z , такая, чтобы процент флуктуирования составлял не более 1%. Использование периодических граничных условий в данном направлении гарантирует нам, что вдоль этой оси не будет течений и воздействия вдоль этой оси, при условии, что образец полностью нагревается в этом направлении.

Использование периодических граничных условий позволяет избежать влияния на эволюцию ударной волны в случае, когда её боковые части достигают границ расчетной системы в направлении оси Y . В таком случае не происходит отражения от боковых граней кристалла, и, соответственно, зарождения новой ударной волны (рисунок 18).

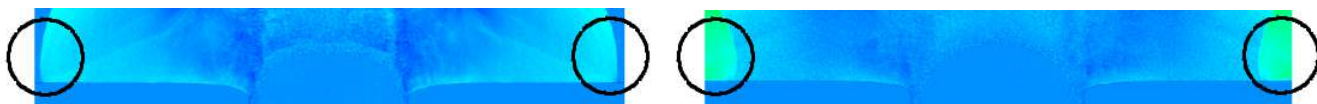


Рисунок 18 — Ударная волна, подходящая к периодической границе (картинка слева) и пересекающая её (картинка справа). Черными кругами отмечено, в какой области происходит срабатывание периодических условий.

Глава 4. Исследование образования полости в кристалле фторида лития под действием жесткого рентгеновского излучения

В этой главе будет рассмотрен процесс образования наноразмерного канала в веществе на примере кристалла фторида лития (LiF), а также продемонстрирован потенциал взаимодействия, впервые апробированный на этой задаче.

4.1 Потенциал взаимодействия для фторида лития

Общее описание формы потенциальной функции, которая используется для расчета фторида лития, описана в пункте 2.2.4.2. В этом разделе представлена окончательная форма потенциала, которая используется для описания взаимодействия атомов друг с другом.

Фторид лития относится к ионным кристаллам. Ионы в ионных кристаллах взаимодействуют посредством дальнodelствующих кулоновских сил, однако благодаря нейтральности суммарного заряда и периодичности кристаллической решетки эффективный межатомный потенциал затухает с расстоянием гораздо быстрее. С использованием суммирования Эвальда его можно представить потенциалом типа Дебая с некоторой длиной экранирования. Чтобы избежать трудоемких вычислений дальнodelствующих кулоновских сил, используется короткодействующий межатомный потенциал, воспроизводящий основные свойства конденсированной фазы фторида лития. К ним относятся равновесная плотность твердого тела при комнатной температуре, холодная кривая, температура плавления, а также плотности твердой и жидкой фаз в точке плавления [137].

Парный потенциал типа Дебая для взаимодействия между ионами с электрическими зарядами $q_{i,j} = \pm 1$ может быть записан в виде:

$$U_{ij}(r) = \left[\frac{q_i q_j e^2}{4\pi\epsilon r} \exp\left(-\frac{r}{d}\right) + \frac{a_4}{r^4} + \frac{a_6}{r^6} + \frac{a_8}{r^8} \right] f(r, r_c),$$

$$f(r, r_c) = \frac{2 \left[1 - \left(\frac{r}{r_c} \right)^4 \right]^4}{1 + \left[1 - \left(\frac{r}{r_c} \right)^4 \right]^4}, \quad (33)$$

где r – межатомное расстояние, кулоновская постоянная $e^2/(4\pi\epsilon) = 138,935457645199$ кДж·нм, d – подобранная длина экранировки Дебая, а a_4, a_6, a_8 – подгоночные параметры для дополнительных членов более высокого порядка энергии. Благодаря сглаживающей функции $f(r, r_c)$ потенциал плавно приближается к нулю, когда расстояние между атомами становится равным $r_c = 0,875$ нм. Параметры потенциала были подобраны по известной холодной кривой в широком диапазоне сжатия и растяжения с использованием метода согласования напряжений [139]. На рисунке 19 показаны экспериментальные значения давления при сжатии [205] и данные, рассчитанные при помощи теории функционала плотности (DFT) [206] при растяжении твердого фторида лития, а также давления, полученные с помощью подобранного потенциала, параметры которого приведены в таблице 1. Длина экранировки Дебая d была определена совместно с другими параметрами в процессе подгонки.

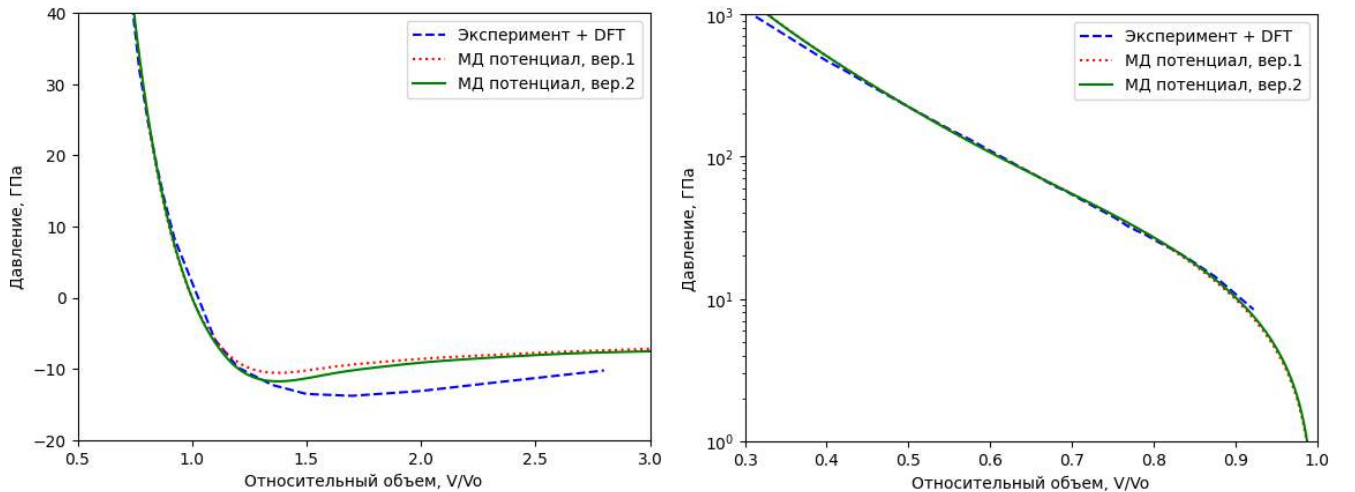


Рисунок 19 — Холодная кривая для фторида лития. Справа представлены большие сжатия.

Чтобы избежать трудоемкого расчета экспоненты в потенциале вида 33, потенциальная функция аппроксимируется рациональной функцией:

$$U_{ij}(r) = \left[\frac{q_i q_j e^2}{4\pi\epsilon r} \cdot \frac{1}{1 + \frac{d}{r} \left(b_1 + b_2 \left(\frac{d}{r} \right)^2 \right)} + \frac{a_4}{r^4} + \frac{a_6}{r^6} + \frac{a_8}{r^8} \right] f(r, r_c). \quad (34)$$

Подгоночные параметры b_1 и b_2 в рациональной функции, которая представляет экранирование Дебая, представлены в таблице 1. Остальные параметры потенциала, представленного в виде (34) такие же, как и в форме (33).

На рисунке 19 изображены холодные кривые, полученные с использованием обеих форм потенциалов, их вид идентичен друг другу. Вириалы межатомных сил, изображенные на рисунке 20, тоже имеют практически один и тот же вид. Как видно из рисунка 19, потенциал ведет себя физически верно, как в области растяжения (левый график, часть с отрицательным давлением), так и в области сжатия (правый график). Эти графики являются разными частями холодной кривой, которая разделена для наглядности.

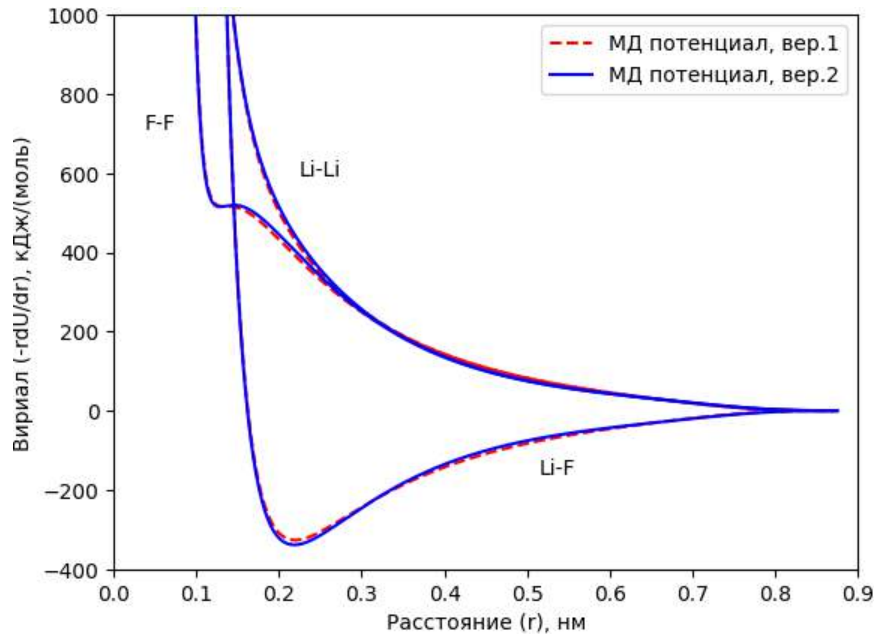


Рисунок 20 — Потенциальное взаимодействие для пар атомов F-F, Li-Li и Li-F.

Обе формы потенциала воспроизводят экспериментально наблюдаемую разницу в 25% между плотностями жидкого и твердого фторида лития в точке плавления. Эта особенность важна для процесса кавитации растянутой метастабильной жидкости при быстром охлаждении, как будет показано далее. Потенциал вида (33) температуру плавления 910 К, что существенно ниже температуры $T_m = 990$ К, полученной для потенциала вида (34). Поскольку

значение, полученное с формой потенциальной функции (34), ближе к экспериментальной температуре плавления фторида лития, которая равна $T_m = 1118$ К, то для расчетов использовалась эта версия потенциала.

Таблица 1 — Коэффициенты для модифицированного потенциала Букингема.

Пары атомов Коэффициенты	F-F	Li-F	Li-Li
$a_4[\text{кДж/моль} \cdot \text{нм}^4]$	-2.89488E-02	1.09777E-02	-3.38356E-02
$a_6[\text{кДж/моль} \cdot \text{нм}^6]$	-2.08844E-04	1.91661E-03	7.55017E-04
$a_8[\text{кДж/моль} \cdot \text{нм}^8]$	2.62536E-06	3.49017E-12	2.67985E-10
b_1	1.15		
b_2	0.569		
$d[1/\text{нм}]$	4.96167		
$r_c[\text{\AA}]$	0.875		

4.2 Эксперимент с образованием полости

В качестве экспериментов, на которые опирается моделирование, были выбраны эксперименты, проведенные на EuXFEL (Европейская рентгеновская лазерная установка на свободных электронах). Воздействие импульсного рентгеновского излучения на твердотельные материалы создает высокую плотность поглощенной энергии, которая приводит к течению вещества, абляции, кавитации и отколу [142; 207; 208].

На рисунке 21 показаны результаты сканирующей электронной микроскопии, которые позволили получить изображения образованной полости. При воздействии излучения произошло вдавливание вещества в радиальном направлении. Материал начинает повреждаться тогда, когда происходит превышение порога по плотности энергии на единицу объема за единичный импульс [208].

Условия эксперимента были следующие. Был взят кристалл фторида лития диаметром 20 мм и толщиной 2 мм. Образец был установлен в точку с наибольшей фокусировкой луча и облучался единичным импульсом. Энергия импульса, который представлял из себя пучок фотонов, имел энергию 9 кэВ,

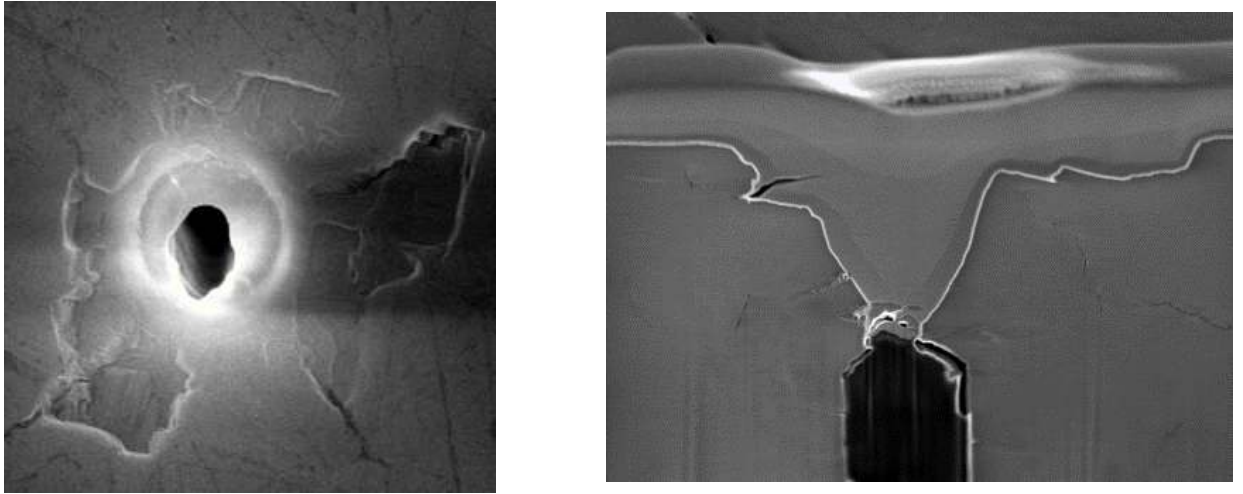


Рисунок 21 — Изображения поверхности образца и выреза вдоль оси полости, образованной рентгеновским пучком во фториде лития. Левое изображение получено при помощи сканирующего электронного микроскопа. Правое изображение было получено при сочетании электронной микроскопии и фокусированного ионного пучка [137].

длина волны $\lambda = 0.138$ нм. Импульс длился 20 фс и был сфокусирован в пятне размером $0.41 \mu m$ [137].

После облучения и релаксации, кристаллическая структура образца была сильно нарушена. Образовался кратер $\sim 2-3 \mu m$, за ним, в глубину, следует слой вещества $\sim 7-10 \mu m$, который образовался при кристаллизации материала в процессе релаксации. Сама полость имеет длину $\sim 1000 \mu m$ и диаметр $\sim 0.5-1 \mu m$. Видно, что отношение длины кратера к его радиусу составляет величину порядка 1000. Сам размер канала является слишком большим для прямого атомистического моделирования из-за ограниченности вычислительных ресурсов. Поэтому моделирование было разбито на два этапа – как происходит образование полости в плоскости, перпендикулярной лучу нагрева, и как происходит тот же самый процесс в конце полости [137].

4.3 Образование полости в плоскости, перпендикулярной лучу нагрева

В данном разделе будет рассмотрен первый этап моделирования на примере образца цилиндрической геометрии.

4.3.1 Постановка задачи

Канал, который образовался при облучении кристалла LiF, в масштабах молекулярной динамики можно считать бесконечно длинным вдоль направления распространения пучка фотонов. Для исследования процессов, происходящих в направлении, перпендикулярном направлению облучения, моделируется образец цилиндрической формы (рисунок 22). Он имеет радиус 300 нм (плоскость XY, перпендикулярно направлению облучения) и толщину 8 нм (ось Z, вдоль направления луча).

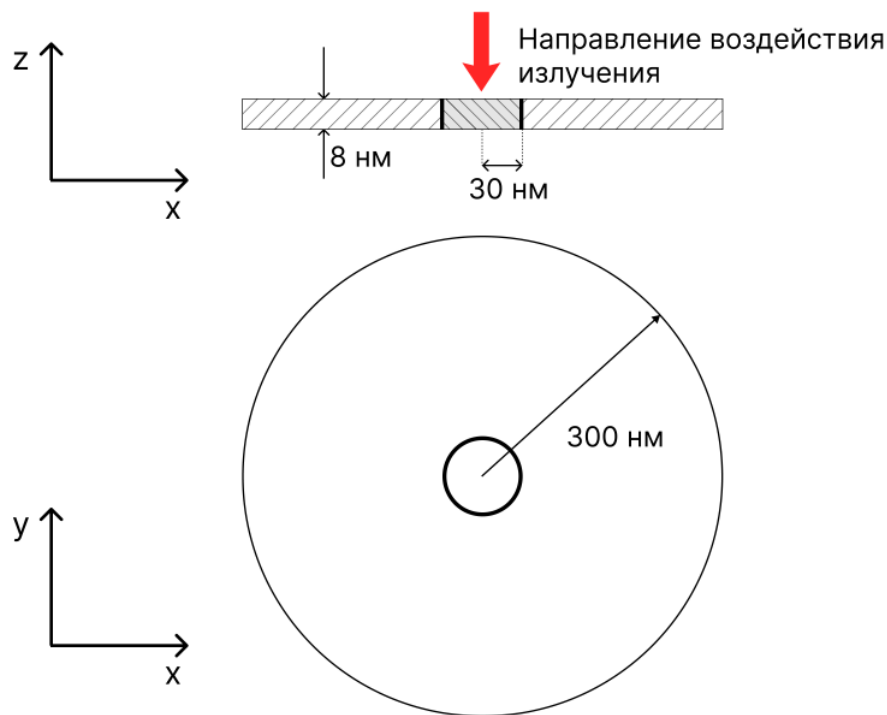


Рисунок 22 — Схематическое изображение выреза образца.

Физически моделирование можно считать двумерным, так как у нас отсутствуют течения вдоль оси Z. Нагрев моделировался при помощи термостата Ланжевена, радиус пятна нагрева составляет 30 нм, распределение температуры по Гауссу. Материал расплавился до радиуса 23 нм.

На рисунке 23 изображено начальное состояние системы после завершения нагрева. Максимальная температура равна примерно 30 кК, давление около 90 ГПа, эти величины достигаются на центральной оси. Данное состояние соответствует величине вложенной энергии 26,96 ГДж/м³. Происходит образование сильной ударной волны, которая уходит вглубь вещества.

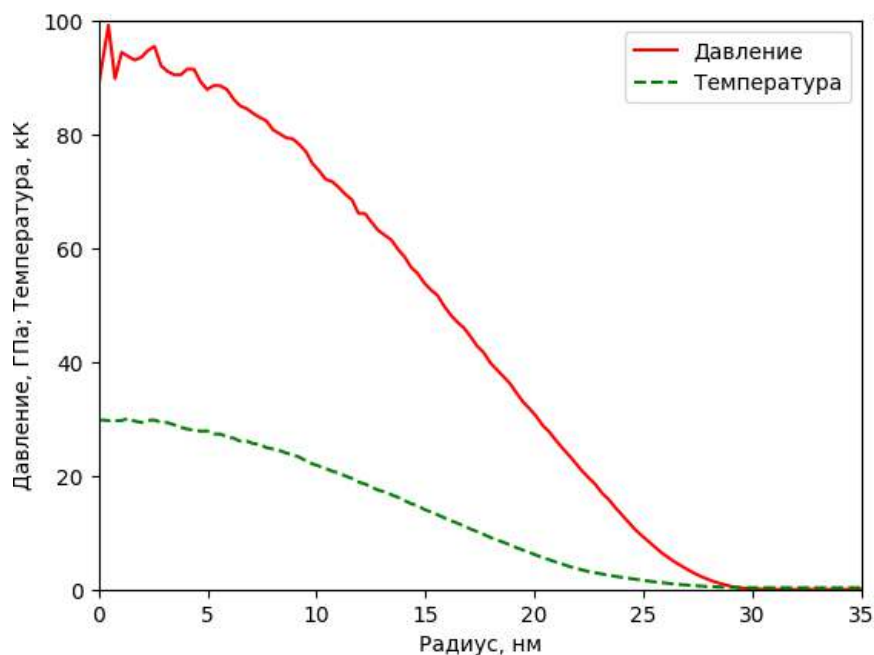


Рисунок 23 — Начальное состояние системы.

4.3.2 Результаты моделирования процесса образования полости в перпендикулярной плоскости

Высокое давление в центральной горячей зоне создает расходящуюся цилиндрическую ударную волну и сходящуюся волну разрежения, что в совокупности вызывает радиальное течение материала, приводящее к снижению давления и температуры внутри вещества. Через некоторое время расходящаяся ударная волна разделяется на быструю упругую ударную волну (предвестник) и медленную пластическую ударную волну. Окружающий холодный кристалл повреждается этой пластической ударной волной до тех пор, пока она достаточно не ослабнет. После прохождения достаточного расстояния от центральной оси расходящаяся ударная волна затухает и становится чисто упругой. Затем необратимое повреждение прекращается, и холодное твердое тело начинает упруго сопротивляться радиальному истечению материала из канала.

Вскоре скорость течения снижается до нуля, и остаточное давление в горячей жидкости внутри канала приходит в механическое равновесие с усиливающимся упругим напряжением в окружающем холодном твердом теле. Таким образом, цилиндрическая полость все еще не формируется в канале, заполненном горячей жидкостью с плотностью в 2-3 раза меньше, чем в твердом состоянии. На этом этапе акустическая стадия трансформации материала за-

канчивается и начинается длительная стадия охлаждения жидкости в канале, приводящая к кристаллизации расплава.

На момент времени 36 пикосекунд ударная волна достигает края кристалла. На рисунке 24 ясно видно анизотропное воздействие материала. Из-за кубической кристаллической решетки формируются четыре угловых сектора повреждения вокруг радиальных трещин, что видно на рисунке 24а. Тонкие красные полосы – повреждения кристаллита, которые вызывают сдвиговые напряжения, изображенные на рисунке 24б. На рисунке 25 изображены значения величин, срез берется параллельно оси абсцисс (горизонтальное направление на рисунке 24), исходя из центра пятна нагрева.

Процесс образования полости занимает очень много времени. За это время ударная волна, отраженная от свободной границы, дойдет до центра образца и окажет сильное влияние на процесс образования полости. Чтобы этого избежать, проводится обрезка образца. Обрезается образец в той точке радиуса, в которой радиальные напряжения и скорость близки к нулевым значениям, и не наблюдается градиента этих величин. Соблюдение таких условий необходимо для того, чтобы после обрезания не образовался скачок давления, который будет направлен вглубь материала.

На рисунке 26 показано, как меняло свою форму область пятна нагрева в процессе эволюции системы. Изначально граница области, из которой потом образовалась полость, находится на отметке 30 нанометров – это граница пятна нагрева. Тепло от пятна передается прилегающему материалу, плавя его. Радиус расплава достигает своего пика на момент времени 60 пикосекунд, после чего начинается кристаллизация с последующем уменьшением жидкой фазы. Весь процесс образования полости занимает большое время с точки зрения моделирования. Поэтому для ускорения расчёта, применялся термостат для охлаждения системы. Конечный радиус полости составляет около 25 нанометров, что на 16% меньше, чем пятно нагрева.

На рисунке 27 изображена полость в кристалле фторида лития, которая полностью сформировалась. Видно, что сила сдвиговых напряжений оказалась достаточной для того, чтобы разорвать образец вдоль повреждений, который образовались в самом начале моделирования.

4.4 Образование полости в плоскости, расположенной вдоль луча нагрева

В этом разделе будет описан второй этап моделирования процесса образования полости. Рассмотрим этот процесс вдоль канала, который образуется вследствие резкого нагрева вещества.

4.4.1 Постановка задачи

В этой части моделирования исследуются процессы, происходящие на поздней стадии эволюции образования полости. Моделируется одномерное течение в плоскости, расположенной вдоль направления пучка фотонов. Канал имеет форму цилиндра диаметром 20 нм (плоскость YZ , свободные граничные условия), длину 1000 нм (ось X , периодические граничные условия) и жесткие стенки (рисунок 28).

В данном моделировании представляет интерес процесс кристаллизации вещества вдоль канала при наличии градиента температуры, а не эволюция ударно-волнового воздействия. Так как с увеличением глубины прохождения излучения уменьшается количество вложенной энергии в вещество, то и температура канала по всей длине будет отличаться.

Процесс моделирования проводился следующим образом. После создания длинного кристалла происходило его плавление. Для этого к системе применялся термостат Ланжевена, с помощью которого задается градиент температуры. В нижней точке канала температура, до которой нагревается образец через некоторое время, равна 1300 К, в верхней – 1500 К. Границы вдоль оси X периодические, но их влиянием на систему можно пренебречь, так как интересующие нас процессы происходят в средней области кристалла. По всему цилиндру было установлено давление около 1,5 ГПа (рисунок 30), что близко к значению, сохранившемуся после остановки движения материала в МД-моделировании ранней стадии эволюции.

После того, как образец расплавился, градиент температуры, который задает термостат, меняется. В верхней точке канала температура теперь задается

равной 400 К, а в нижней точке канала – 900 К, характерное время охлаждения составляет 200 пс. Таким образом, мы моделируем отдачу тепла из канала в остальной объем вещества, который происходит при реальном процессе кристаллизации. Так как температура в верхней части канала ниже, чем в нижней, то кристаллизация начинается там раньше.

4.4.2 Результаты моделирования процесса образования полости в перпендикулярной плоскости

На глубине процесс образования полости происходит медленнее. Это обуславливается медленной потерей тепла из горячего расплава, заполняющего цилиндрический канал, в окружающий холодный кристалл. На поздней стадии давление в канале снижается из-за охлаждения расплава, но радиус канала остается практически неизменным, поскольку упругие напряжения, возникшие в окружающем твердом материале, препятствуют его сужению. Это означает, что давление в расплаве может стать отрицательным ещё до его затвердевания, что создает условия для кавитации, приводящей к образованию полостей внутри канала.

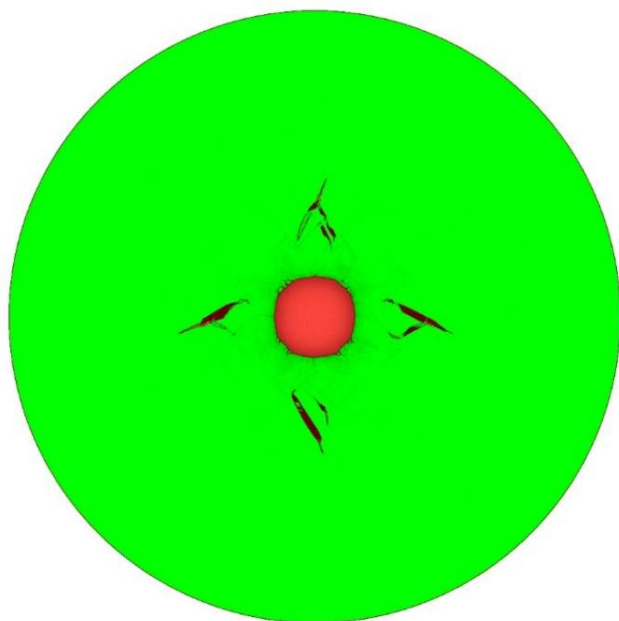
На рисунке 29 продемонстрирован весь процесс кристаллизации и кавитации в цилиндрическом канале с фиксированными твердыми стенками, через которые теплоотвод происходит одновременно по всей длине канала. Здесь левая часть соотносится с верхней частью на рисунке 28, а правая с нижней.

Механизм образования полости заключается в следующем. Расплав имеет продольный градиент температуры вследствие неоднородности прогрева. Из-за этого градиента (примерно 0,5 градуса на нанометр) первым начинает процесс кристаллизации левая часть канала (рисунок 29). Скорость движения фронта кристаллизации контролируется степенью переохлаждения расплава и, в принципе, может превышать скорость звука, если теплоотвод к стенкам канала происходит достаточно быстро. Однако скорость охлаждения в данном случае мала, поэтому процесс кристаллизации протекает со скоростью ниже скорости звука. Температура опускается ниже точки плавления при движении слева направо, а давление равномерно падает, достигая порога кавитации на горячей стороне (рисунок 30).

Кавитация начинается, когда отрицательное давление в расплаве опускается ниже предела прочности жидкости на разрыв. Эта прочность уменьшается с ростом температуры, поэтому кавитация распространяется справа налево по каналу в направлении к фронту кристаллизации. Первый разрыв вещества происходит в районе 1 наносекунды. Расплав рвется с образованием пустого пространства. При дальнейшей эволюции процесса кристаллизации разрыв только увеличивается. Продолжается это до тех пор, пока вся жидкая фаза между пустотой и твердой фазой не станет кристаллом. Когда встречается фронт кристаллизации с фронтом кавитации, происходит образования дна полости, которое имеет плоскую форму.

Следует отметить, что в моделировании кавитация начинается с независимого зарождения нескольких малых полостей на ограниченном участке, однако вскоре они сливаются в единый пузырь диаметром, соответствующим диаметру канала (20 нм). В экспериментальных условиях диаметр составляет около 600 нм, и кавитация может приводить к образованию похожего на пену материала, который распадается с образованием капель. В конечном итоге такие капли достигают холодных стенок полости и затвердевают, как это наблюдалось в работе [77]. Однако, такое реализуется только в случае, если стенки уже находятся в твердом состоянии, то есть при достаточно высокой скорости охлаждения расплава в канале. Иначе стенки должны оставаться гладкими.

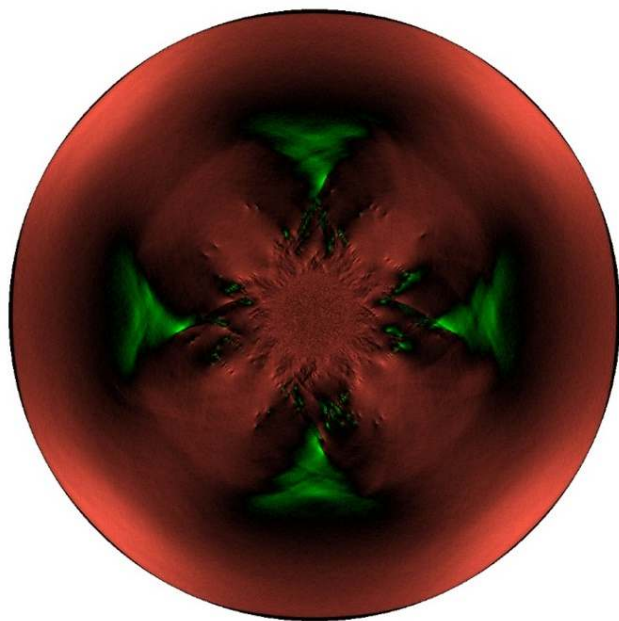
Таким образом, полость не образуется мгновенно. В основе процесса её образования лежит кавитация и дальнейшее расширение образовавшегося пузырька. Развитие прекращается тогда, когда происходит встреча с фронтом кристаллизации и образуется дно полости. Ниже основного дна образуются нанополости между твердыми зёрнами (рисунок 30). Это происходит в результате быстрой гомогенной кристаллизации, что обусловлено значительно более низкой плотностью расплавленного фторида лития по сравнению с твердым (на 25%).



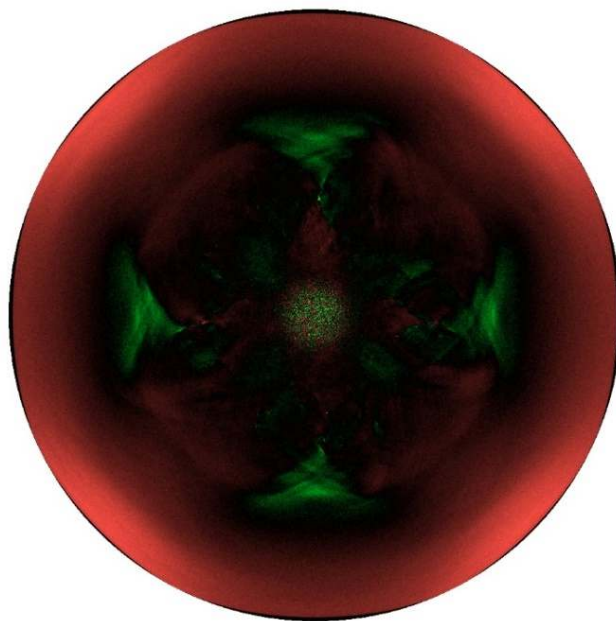
а) Центральная симметрия



б) Сдвиговые напряжения



в) Радиальное напряжение



г) Радиальная скорость

Рисунок 24 — Ударная волна достигла края кристалла, время – 36 пикосекунд. Цилиндр 24а - параметр центральной симметрии (зеленое – кристалл, красное – неупорядоченная структура); цилиндр 24б - сдвиговые напряжения, повреждающие кристалл (более светлый цвет - более высокие значения); цилиндр 24в - радиальное напряжение (зеленый цвет - отрицательные значения напряжения); цилиндр 24г - радиальная скорость, уносящая вещество от центра (зеленый цвет означает направление скорости к центру). Наблюдаемая крестообразная структура является следствием анизотропии решетки монокристалла фторида лития и действия ударной волны.

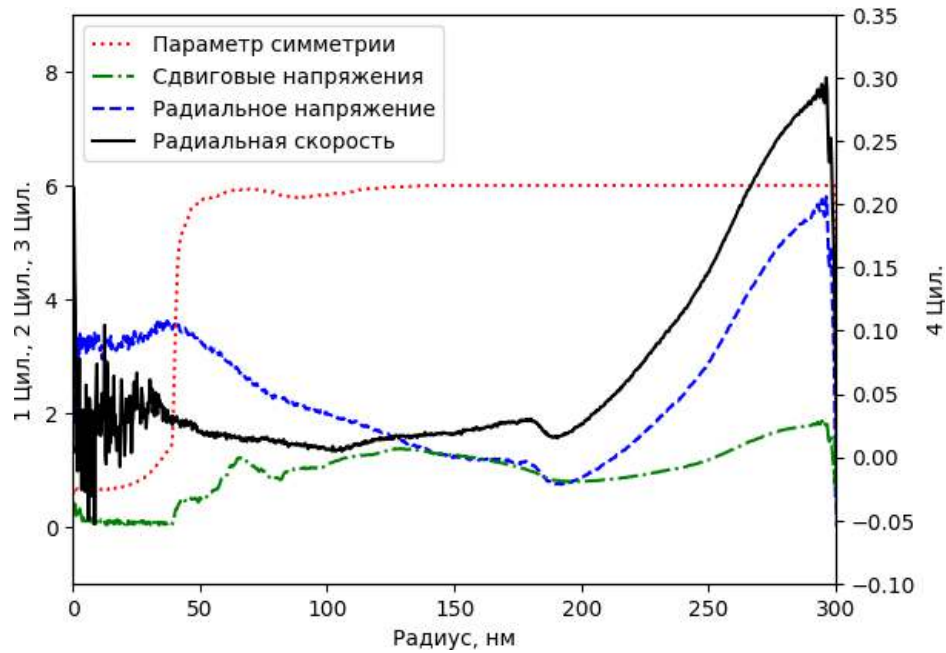


Рисунок 25 — Срезы цилиндров, изображенные на рисунке 24. Параметр симметрии (1 Цил.) не имеет размерности, сдвиговые напряжения (2 Цил.) и радиальное напряжение (3 Цил.) – ГПа, радиальная скорость (4 Цил.) – км/с.

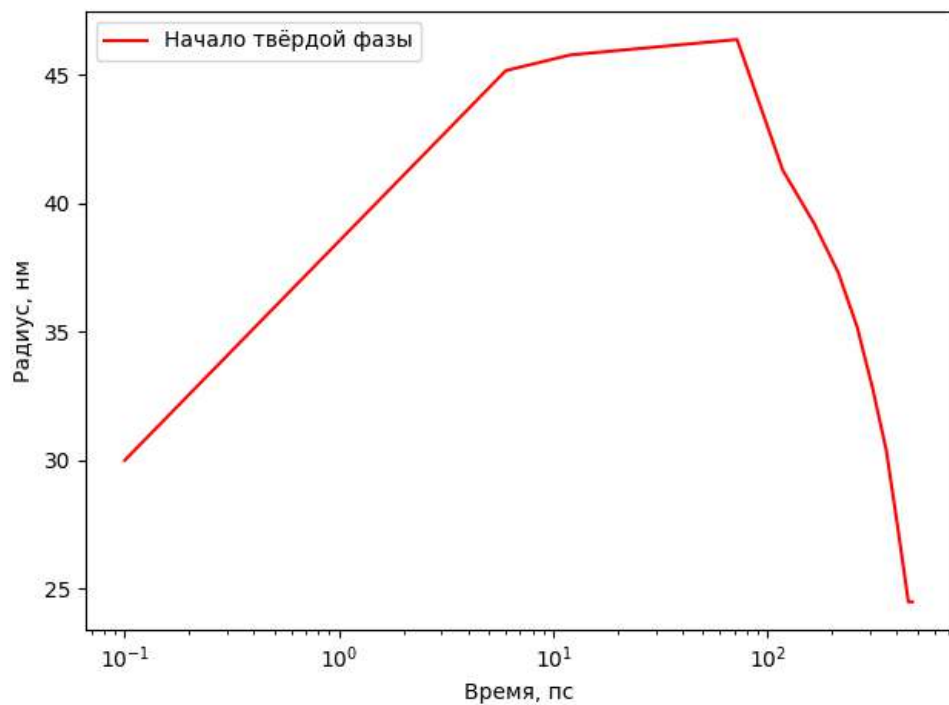


Рисунок 26 — Радиус начала твердой фазы относительно центра образца. 30 нм – граница пятна нагрева в начальный момент времени.

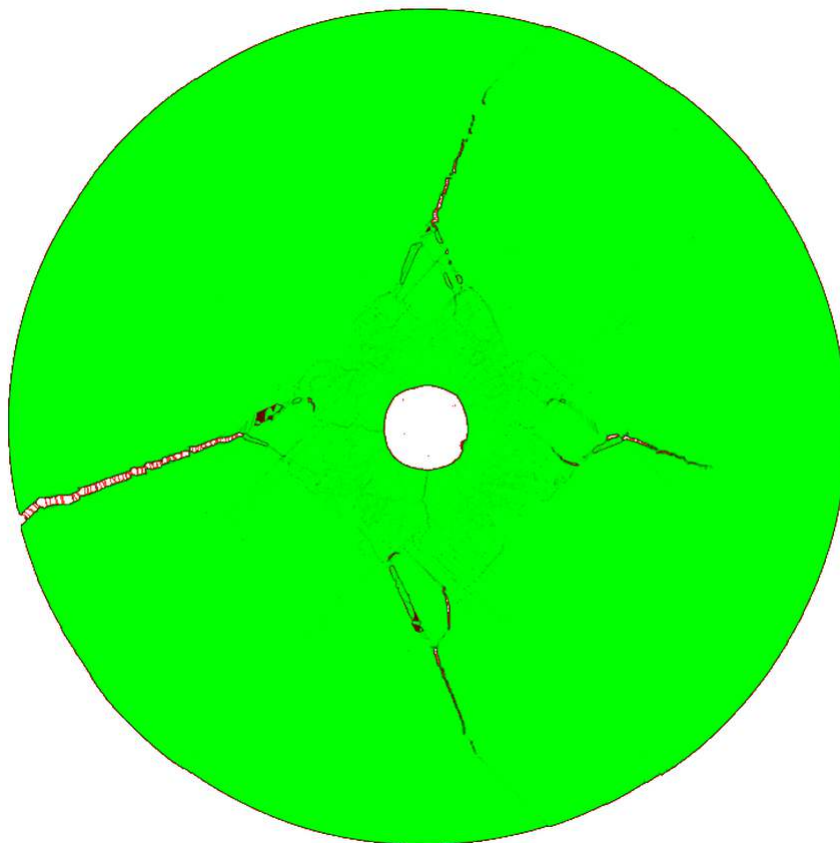


Рисунок 27 — Конечная картина образования полости, 2D-изображение параметра центральной симметрии. Наблюдаемая крестообразная структура является следствием анизотропного воздействия ударной волны.

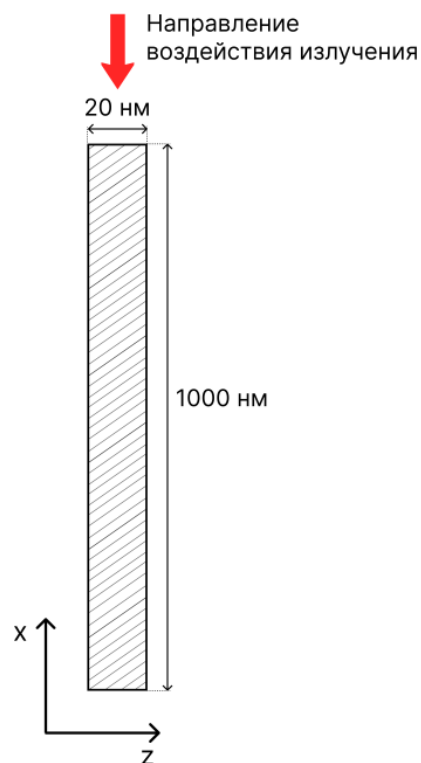


Рисунок 28 — Схематическое изображение канала.

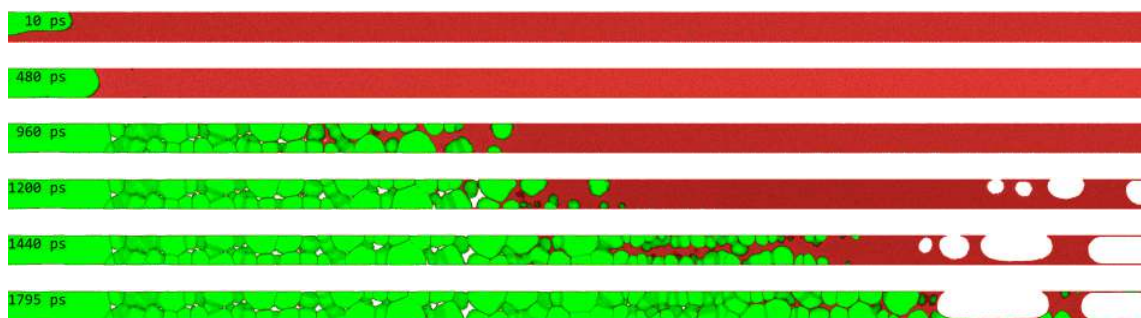


Рисунок 29 — Процесс кристаллизации и образования полости. Вырезанная часть канала длиной 280 нм.

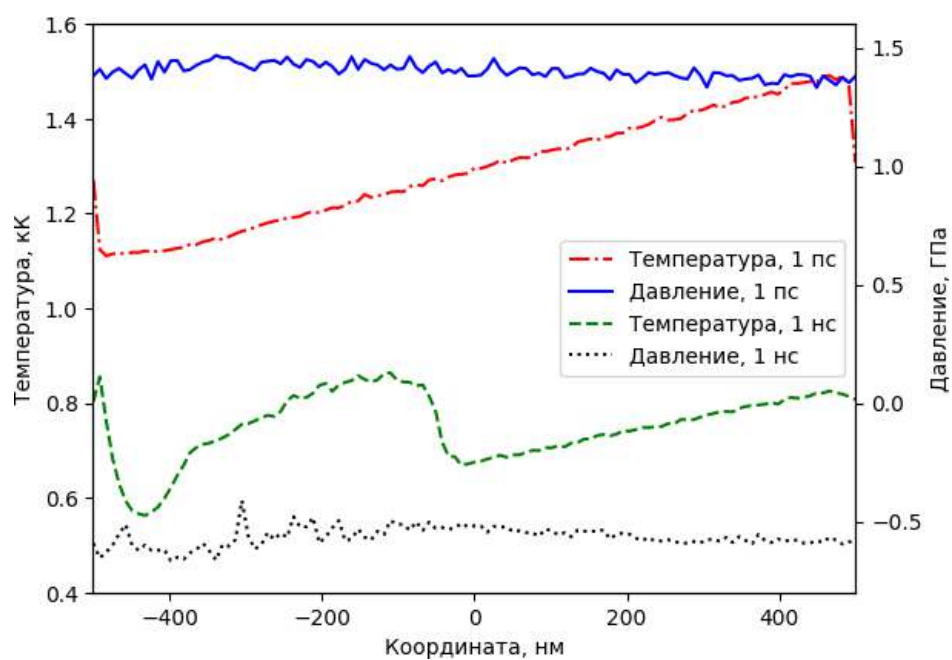


Рисунок 30 — Процесс кристаллизации.

Глава 5. Пластическое термоциклирование поликристалла меди лазерными импульсами

Мощные лазерные комплексы, способные излучать сильные наносекундные импульсы с частотой повторения до 50 кГц, нашли своё применение во многих областях промышленности. Такие комплексы применяют в резке, пайке, сварке металлов [209; 210], наноструктурировании [211], лазерном термоупрочнении [212]. Данные технологические применения основаны на абляционных явлениях, возникающих при облучении металла [94; 95].

Однако, есть не менее интересные явления, происходящие в твердой фазе при температурах, близких к температуре плавления. В этом случае вещество всё ещё находится в твердом состоянии, когда температура тонкого приповерхностного слоя приближается к температуре плавления. В этом слое происходят термомеханические явления, которые приводят к пластической деформации кристаллической структуры [96].

Для получения таких эффектов, исследуемое вещество периодически нагревают и охлаждают. В этой главе будет рассмотрено, какие процессы происходят при подобном воздействии на примере поликристалла меди.

5.1 Оптикопластический эффект

5.1.1 Проявление оптикопластического эффекта в эксперименте

Оптикопластический эффект был обнаружен при исследовании воздействия мощного наносекундного УФ лазера на поверхность меди [102—106]. Этот эффект проявляется при воздействии излучения с интенсивностью ниже порога оптического пробоя. В данной работе рассматривается случай, когда плотность энергии равна 0.6 Дж/см² [113; 213]. Результатом проявления эффекта являются высокотемпературные пластические деформации в приповерхностном слое. Такая устойчивость меди находит своё применение в цельнометаллических зеркалах, которые используются в лазерах большой мощности [112].

Во время работы таких лазеров зеркала подвергаются предельной нагрузке. Значение энергии при этом не выше порога оптического пробоя. Из-за того, что нагрузка является циклической, через некоторое время поверхность меди покрывается следами пластической деформации. Такие следы ухудшают оптические качества меди.

Проявление оптикопластического эффекта заключается в следующем. В зоне, находившейся под воздействием лазерного излучения, наблюдается неравномерное изменение высоты поверхности. Образуется некоторый перепад высот, в несколько раз больший, чем изначальная шероховатость образца. Происходит это по причине активизации дефектов кристаллической структуры, которая вызывается интенсивным лазерным излучением, воздействующем циклически. Причем максимальный перепад высот образуется не сразу, происходит его накопление.

5.1.2 Проявление оптикопластического эффекта в эксперименте

В качестве экспериментального материала выступила бескислородная медь с ГЦК решеткой. Образцы были подготовлены так же, как и в работах [102—106], методика и режимы воздействия были такими же. Облучение проводилось лазером Nd:YAG (355 нм, 10 нс) при частоте повторения импульсов 10 Гц. В результате была получена серия пятен при различной плотности энергии (от 0,6 до 2,9 Дж/см²). Для исследования был выбран режим с плотностью энергии 0,6 Дж/см² [113; 213].

Каждый последующий импульс воздействовал на поверхность, которая полностью остыла после предыдущего воздействия. Отчетливо наблюдалось, как лазерное пятно постепенно преобразуется в зависимости от числа импульсов и плотности их энергии. При увеличении количества импульсов и их энергии пятно становилось всё более похожим на классический лазерный кратер. Образец, радиусом 20 мм и толщиной 10 мм, имеет на поверхности серию пятен размером ~180 мкм. Их отличие друг от друга заключается в количестве импульсов, воздействовавших на них [113; 213].

Для исследования структуры приповерхностного слоя был вырезан образец из места, которое подвергалось воздействию лазерного излучения. Образец

представляет из себя тонкую фольгу, вырезанную перпендикулярно к поверхности при помощи метода ионного утонения сфокусированным ионным пучком в колонне растрового электронно-ионного микроскопа [214].

В результате, было обнаружено, что на поверхности образца (при многократном облучении лазерными импульсами) образуются выступы и впадины на границах зерен (рисунок 31). Перепад высот этих выступов и впадин может достигать 1000 нм. Зеленый прямоугольник на рисунке 31 означает место выреза фольги. Её общий вид представлен на рисунке 32, где ясно виден выступ на поверхности и граница между зернами.

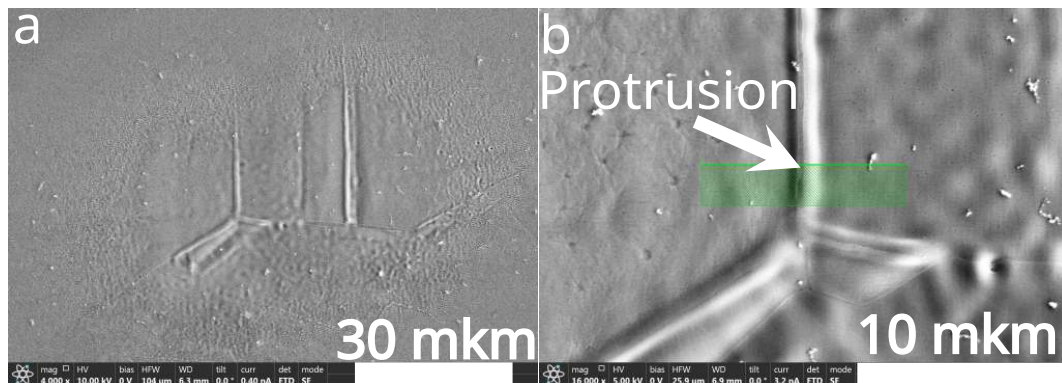


Рисунок 31 — а - лазерный кратер с выступами и впадинами, плотность энергии составляет $0,6 \text{ Дж/см}^2$, серия из 15 импульсов; б - в увеличенном масштабе, зеленый прямоугольник означает область выреза фольги, чья структура демонстрируется на рисунке 32.

5.2 Молекулярно-динамическое моделирование оптикопластического эффекта у поликристалла меди

5.2.1 Постановка задачи

Эксперимент показал, что высота выступов на поверхности меди увеличивается с ростом количества импульсов. Предположительно, такой эффект проявляется из-за циклического нагрева и остывания приповерхностного слоя меди. Такой процесс ещё называется термоциклированием. На материал воздействует лазерный импульс, который приводит к повышению температуры

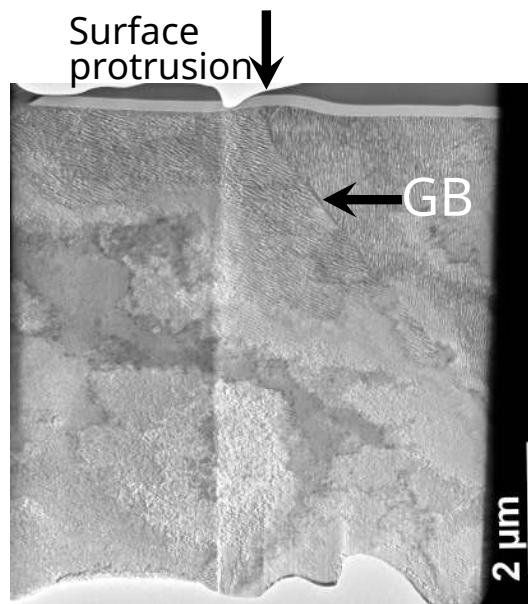


Рисунок 32 — Общий вид фольги с выступом и границей между зернами (обозначена буквами "GB"), плотность энергии составляет $0,6 \text{ Дж/см}^2$, серия из 15 импульсов.

поверхности от комнатной (около 300 K) до $0,9T_m$, где T_m есть температура плавления. Остальной же материал остается в холодном состоянии.

Для проведения моделирования был создан поликристалл меди с размерами $L_x = 46 \text{ нм}$, $L_y = 40,7 \text{ нм}$, $L_z = 100,1 \text{ нм}$. Граничные условия вдоль осей X и Y периодические, по оси Z свободные. Всего в кристалле 16 зерен ячеистой структуры в сечении XY , перпендикулярной по отношению к оси Z . Количество атомов в моделируемой системе составляет 15771035, в среднем на каждое зерно 1 миллион атомов. Ориентация зерен задавалась случайным образом через поворот относительно осей расчетной области.

5.2.2 Первичная подготовка поликристалла перед облучением

После создания кристалла был проведен отжиг. Отжиг и последующие лазерные воздействия моделировались с использованием термостата Ланжевена. Образец нагревался до температуры $T = 1200 \text{ K}$, эта температура держалась около 1 нс , а затем кристалл охлаждался до температуры 300 K . Этот процесс был необходим для релаксации исходной атомной конфигурации, которая была неравновесной сразу после создания поликристалла. Когда отжиг был

завершен, в кристаллической структуре возникли дислокации и межзеренные границы изменили своё начальное положение. В ходе отжига на поверхности кристалла образовался перепад высот примерно 1 нм. Ячеистая структура до и после отжига представлена на рисунке 33.

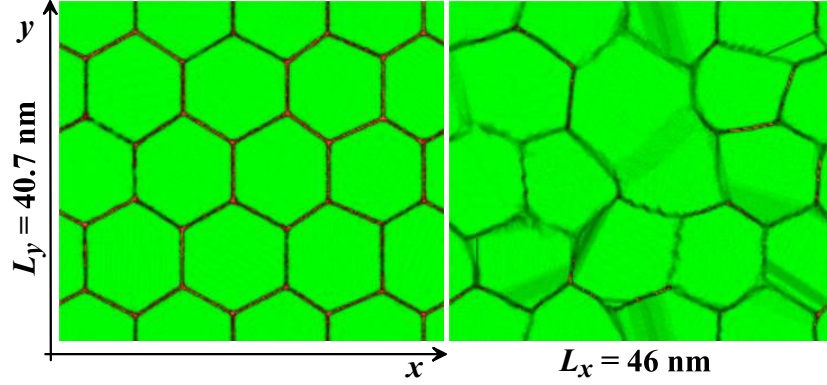


Рисунок 33 — Ячеистая структура до (слева) и после (справа) отжига. Параметр центральной симметрии решетки без дефектов представлен зеленым цветом; черный/красный цвет представляет межзеренные границы, в которых общий порядок нарушен.

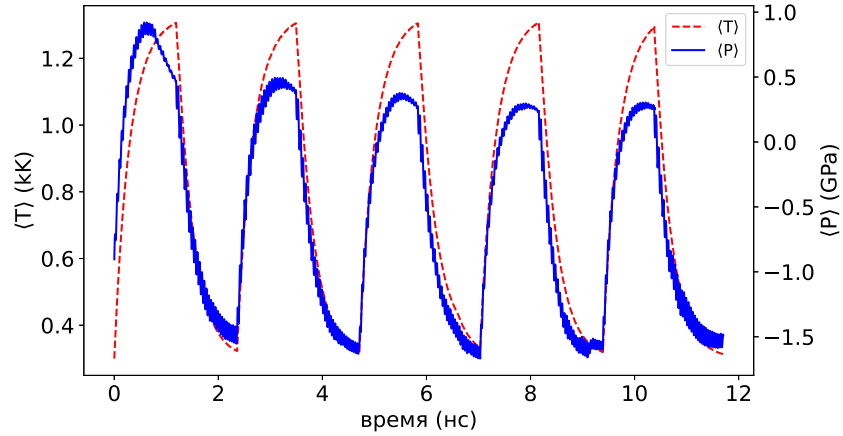


Рисунок 34 — Эволюция $\langle P \rangle$ и $\langle T \rangle$, усредненных по образцу. Термостат Ланжевена применяется вдоль осей X и Y. Тепловое расширение вдоль оси Z происходит свободно, а продольные напряжения вдоль этой оси равны 0.

5.2.3 Эволюция приповерхностного слоя

После такой подготовки образец подвергался термоциклированию. Моделировалось воздействие, подобно импульсному лазерному нагреву, с последу-

ющим полным охлаждением до комнатной температуры. За начало расчета принимается момент, когда был завершен процесс отжига. Всего было смоделировано 5 импульсов. Образец 5 раз нагревался до температуры $T \sim 1300$ К и 5 раз охлаждался до температуры $T \sim 300$ К. Нагрев занимал примерно 1,2 нс, столько же затрачивалось времени на остывание. На рисунке 34 демонстрируется, как менялись давление и температура в процессе термоциклирования.

Так как по оси Z граничные условия свободные, то вдоль этой оси среднее напряжение было в районе нуля ($\langle P_{zz} \rangle \sim 0$). Напряжения вдоль осей X и Y следовали за температурой, так как граничные условия вдоль этих осей периодические.

Сдвиговое напряжение в течение процесса термоциклирования менялось значительно. Это вызывало перестройку кристаллической решетки и способствовало созданию перепада высот поверхности. На рисунке 35 можно наблюдать, как менялась кристаллическая структура на примере параметра центральной симметрии. Его величина значительно меньше на стыке границ зерен, чем у недеформированного материала. В этих местах кристаллическая решетка наиболее подвержена перестроению. Движение границ становится быстрее при приближении к температуре плавления. При перестройке некоторые зерна увеличиваются в размерах, другие же, напротив, уменьшаются и/или исчезают. В результате моделирования осталось 3 крупных и 7 малых зерна после 5 импульсов (в начале было 16 зерен).

Для моделируемого поликристалла из 16 зерен оказалось достаточным 5 импульсов, чтобы перепад высот вышел на некоторый уровень и перестал увеличиваться. Но в эксперименте такой эффект не наблюдается, так как реальный кристалл состоит из намного большего количества зерен. В эксперименте рост продолжался и после 30 импульсов.

Рост высот и углублений низин, из которых получается перепад высот, наблюдался лишь в некоторых частях моделируемого кристалла. На рисунке 36 показана динамика этого процесса на момент завершения остывания после импульса. Растут и опускаются одни и те же области кристалла. Лучше всего перепад высот виден на рисунке 37. Здесь брались вертикальные сечения вдоль прямой, проходящей через максимум и минимум высоты поверхности. На рисунке 38 показана динамика роста перепада высот. График начинается с точки, равной 10 Å, что является шероховатостью после отжига. В эксперименте начальная шероховатость составляла 15-20 нм [113; 213].

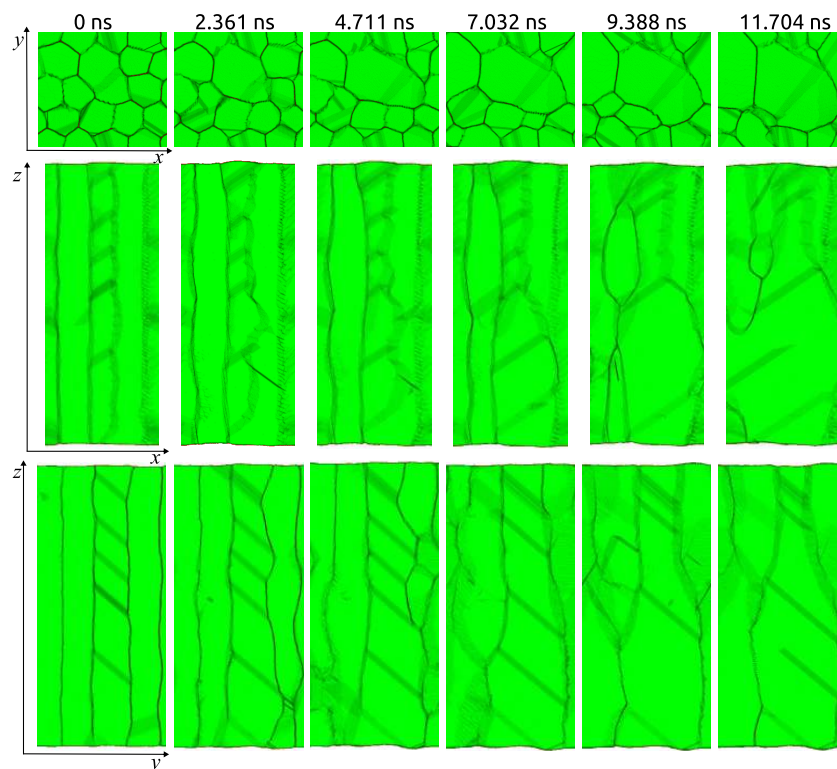


Рисунок 35 — Эволюция параметра центральной симметрии у моделируемого поликристалла меди. Здесь представлены 2D-карты параметра после каждого цикла нагрева-охлаждения. Исходная структура образца сильно нарушается к концу моделирования.

5.2.4 Динамика сдвиговых напряжений в поликристалле меди

Поверхность, которая подвергается воздействию лазерного излучения, испытывает на себе действие сдвиговых напряжений. Эти напряжения возникают вследствие теплового одноосного сжатия или расширения при охлаждении или нагреве вещества. При превышении предела текучести происходит сбрасывание напряжений. Этот предел зависит от ориентации зерен, а также от плотности дислокаций (которые могут быть накоплены в процессе термоциклирования). Сброс напряжений происходит в виде пластических деформаций в кристалле. Этот сброс затрагивает и близлежащие зерна, так как от пластически деформируемого зерна идёт сдвиговая волна. Из-за того, что зерна по-разному реагируют на такое пластическое воздействие, и происходит накопление перепада высот.

Образец деформируется только вдоль оси Z . Вдоль остальных осей расширения не происходит, так как кристалл находится в периодических граничных

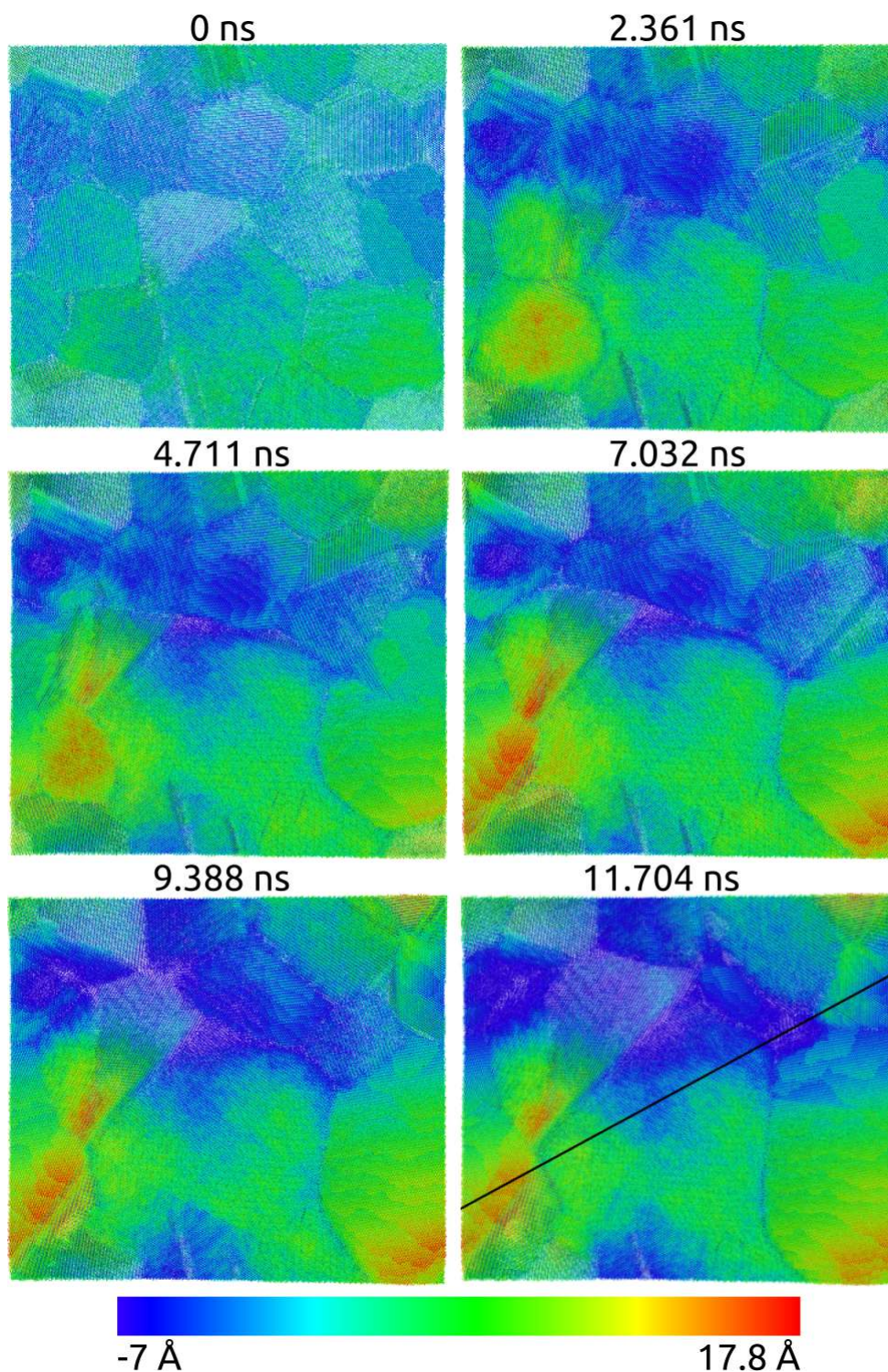


Рисунок 36 — Эволюция процесса накопления перепада высот. Момент времени $t = 0$ показывает поверхность перед первым импульсом (после отжига). Следующие изображения показывают поверхность после полного охлаждения. На последней картинке изображена линия, вдоль которой брался разрез на рисунке 37.

условиях, поэтому невозможно изменение размеров кристалла в этих направлениях. Такая постановка имитирует одноосное тепловое расширение в пятне,

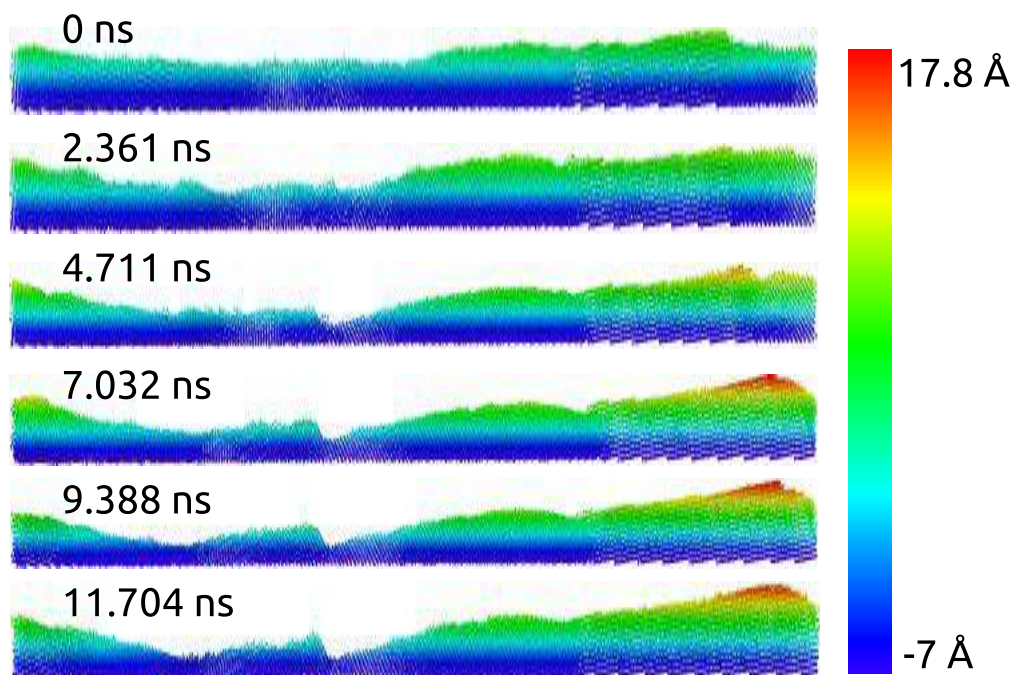


Рисунок 37 — Рельеф свободной поверхности в сечении, взят по черной линии на рисунке 36. Цветная линия есть иллюстрация высоты относительно нулевого уровня.

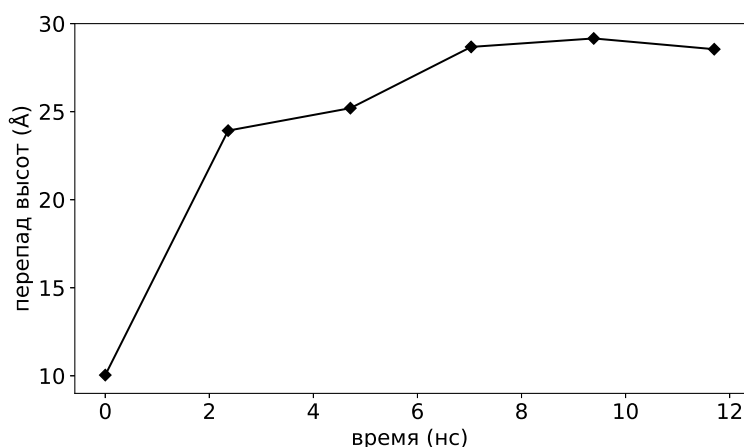


Рисунок 38 — Накопление перепада высот. Высота измерялась после охлаждения образца.

нагреваемым лазером. Толщина этого пятна намного меньше его радиуса. На рисунке 39 демонстрируются сдвиговые напряжения в образце после завершения нагрева или остывания. Сдвиговые напряжения в холодном кристаллите оказываются больше, чем в горячем, потому что для пластической деформации горячего вещества надо приложить меньше усилий. На рисунке 40 продемонстрированы значения компонент тензора напряжений вдоль каждой из осей. Проводилось усреднение значений из центральной области кристалла в координатах от -10 нм до 10 нм.

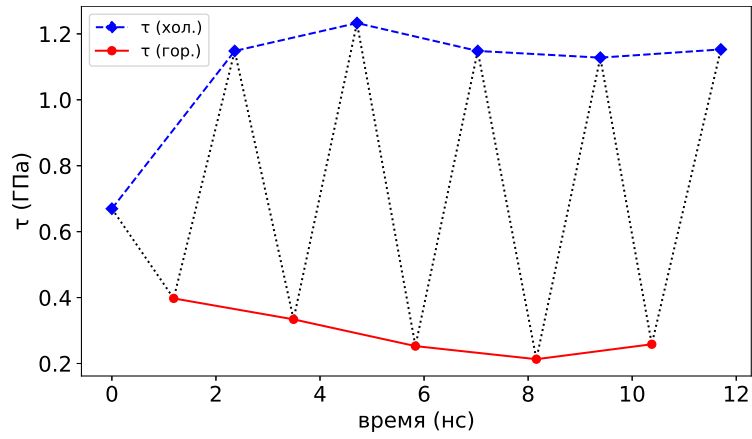


Рисунок 39 — Эквивалентное сдвиговое напряжение $\sigma_e/2$. Значение усредняется в центральной области образца $-10 < X < 10$ нм. Красная линия означает образец после нагрева, синяя - после охлаждения. Штриховой линией показана последовательность процессов.

Величина перепада высот, как и величины напряжений, через некоторое время выходят на постоянный уровень. Это означает, что после определенного цикла нагрева-остывания зерна кристалла перестают реагировать пластически на воздействие сдвиговых напряжений. В нашем моделировании поликристалл перестает реагировать после 3 циклов термоциклирования. Сдвиговых напряжений, которые возникают при последующих циклах термоциклирования, оказывается недостаточно для пластических деформаций. Их максимальная амплитуда достигает $\sim 0,2 - 0,3$ ГПа в горячем состоянии, как видно на рисунке 39. Но такого значения сдвиговых напряжений оказывается достаточным для изменения положения границ зерен. На рисунке 41 продемонстрировано распределение остаточных напряжений относительно расположения зерен. Темно-зеленый цвет на рисунке 41С означает величину $\sim 0,1$ ГПа, такое значение имеют межзеренные границы и большая часть мест прохождения дислокаций (толстые светло-серые полосы на рисунке 41А). На рисунке 41В показана ориентация зерен относительно друг друга. Все атомы каждого зерна повернуты на определенный угол, который меняется при прохождении дислокации через кристалл. Светло-зеленый цвет на рисунке 41С имеет значение $\sim 0,5$ ГПа. Такую величину сдвиговых напряжений имеет большая часть зерен, поэтому при последующих циклах термоциклирования максимальной амплитуды напряжений в горячем состоянии оказывается недостаточной для явных пластических деформаций.

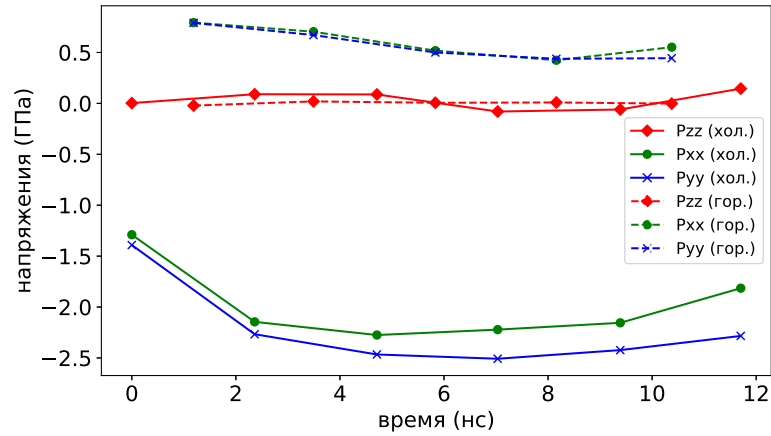


Рисунок 40 — Изменение значений компонентов тензора напряжений в центральной области образца, средние значения. Штриховые линии относятся к моменту времени после нагрева, сплошные линии - после охлаждения. Из-за периодических ГУ напряжения вдоль осей X и Y отличны от нуля. Вдоль оси Z напряжения нулевые, так как ГУ вдоль этой границы свободные.

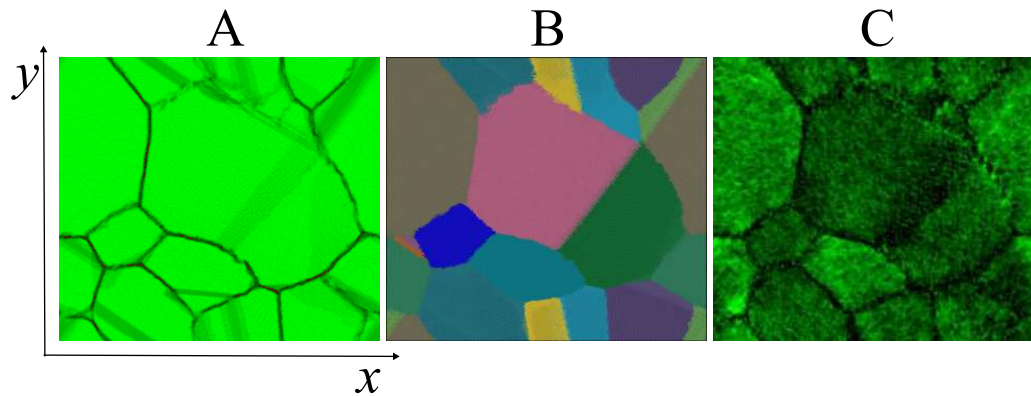


Рисунок 41 — Центральное поперечное сечение холодного образца на момент времени 9,388 нс (после 4 импульса и охлаждения). А) параметр центральной симметрии, В) раскраска зерен с различной ориентацией, С) распределение остаточного эквивалентного напряжения, минимальное $\sigma_e = 0,1$ ГПа напряжение в темно-зеленых зернах, максимальное $\sigma_e = 0,5$ ГПа в светло-зеленых.

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. Было проведено большое количество численных расчетов методом классической молекулярной динамики, которые позволили детально рассмотреть разные процессы, происходящие при воздействии короткими и ультракороткими лазерными импульсами на конденсированные среды: формирование ударных волн и пластических деформаций в алюминии при ультракоротком лазерном воздействии, образование нанопоры и наноканала в кристалле фторида лития под действием лазерного излучения в рентгеновском диапазоне энергий, перестройку зеренной структуры и накопление пластических деформаций в поликристалле меди при термоциклировании лазерными импульсами.
2. Было проведено численное исследование воздействия ультракороткого лазерного импульса на алюминий методом молекулярной динамики. Показано, что форма ударной волны зависит от выбранной геометрии (плоская или осесимметричная), причем переход между ними завершается при прохождении волной расстояния, сравнимого с диаметром пятна нагрева. Установлено, что температура образца влияет на скорость ударного фронта и глубину пластических деформаций: при 850 К глубина деформаций достигает 143 нм против 100 нм при 300 К, несмотря на меньшую вложенную энергию, так как более горячий материал легче подвержен пластическим деформациям. Определены минимальные энергии для начала пластических деформаций: 188,36 Дж/м² (300 К) и 166,02 Дж/м² (850 К). Результаты согласуются с экспериментальными данными, демонстрируя образование дислокаций и модифицированной структуры в приповерхностном слое алюминия. Полученные результаты важны для разработки методов лазерного термоупрочнения материалов.
3. Было проведено исследование образования нанопоры в кристалле фторида лития под действием жесткого рентгеновского излучения. На основе модифицированного потенциала Букингема выполнено моделирование двухэтапного процесса: в перпендикулярной плоскости ударная волна создает анизотропные повреждения, приводящие к фор-

мированию поры, а вдоль направления излучения кавитация в расплаве и последующая кристаллизация формируют протяженный наноканал. Результаты согласуются с экспериментальными данными EuXFEL и подтверждают возможность управления наноструктурированием материалов с помощью сверхкоротких рентгеновских импульсов.

4. Проведено исследование термоциклирования поликристалла меди под действием лазерных импульсов наносекундной длительности. Экспериментально выявлен оптикопластический эффект, проявляющийся в образовании выступов и впадин на поверхности. Методом молекулярно-динамического моделирования установлено, что циклический нагрев и охлаждение приводят к перестройке зеренной структуры, накоплению сдвиговых напряжений и пластическим деформациям, которые стабилизируются после нескольких циклов нагрева/охлаждения в расчете, но в эксперименте продолжаются и через несколько десятков циклов. Полученные результаты имеют важное значение для понимания поведения меди в условиях многократного лазерного воздействия, в частности, при создании устойчивых оптических элементов и управлении технологическими процессами, например, диффузионной сваркой.

Таким образом, были продемонстрированы различные моделирования для различных веществ в конденсированном состоянии. Все проделанные расчеты имеют связь с экспериментами и с реальными технологическими приложениями.

Список литературы

1. A new dynamical domain decomposition method for parallel molecular dynamics simulation [Текст] / V. Zhakhovsky [et al.] // IEEE Proc 5th Int Symp Clust Comput Grid (CCGrid 2005). Vol. 2. — 06/2005. — P. 848—854.
2. Vorobyev, A. Y. Femtosecond laser nanostructuring of metals [Текст] / A. Y. Vorobyev, C. Guo // Opt. Express. — 2006. — Vol. 14, no. 6. — P. 2164—2169.
3. Vorobyev, A. Y. Colorizing metals with femtosecond laser pulses [Текст] / A. Y. Vorobyev, C. Guo // Appl. Phys. Lett. — 2008. — Vol. 92. — P. 041914.
4. Zhakhovskii, V. V. New mechanism of the formation of the nanorelief on a surface irradiated by a femtosecond laser pulse [Текст] / V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, K. Nishihara // JETP Lett. — 2008. — Vol. 87. — P. 423—427.
5. Ultrafast lasers and solids in highly excited states: results of hydrodynamics and molecular dynamics simulations [Текст] / N. A. Inogamov [et al.] // J. Phys.: Conf. Ser. Vol. 510. — IOP Publishing. 2014. — 012041[1—15].
6. Surface nanodeformations caused by ultrashort laser pulse [Текст] / N. A. Inogamov [et al.] // Eng. Fail. Anal. — 2015. — Vol. 47. — P. 328—337.
7. Experimental and theoretical investigation of periodic nanostructuring of Au with ultrashort UV laser pulses near the damage threshold [Текст] / D. S. Ivanov [et al.] // Phys. Rev. Appl. — 2015. — Vol. 4. — P. 064006.
8. Laser-induced formation of holograms for generation of plasmons [Текст] / A. I. Ignatov [et al.] // J. Phys.: Conf. Ser. Vol. 1147. — IOP Publishing. 2019. — P. 012068.
9. Single-shot femtosecond laser ablation of gold surface in air and isopropyl alcohol [Текст] / S. I. Kudryashov [et al.] // Appl. Phys. Lett. — 2018. — Vol. 112, no. 20. — P. 203101.
10. Femtosecond laser-induced periodic surface structures [Текст] / J. Bonse [et al.] // J. Laser Appl. — 2012. — Vol. 24, no. 4. — P. 042006.

11. In situ x-ray imaging of defect and molten pool dynamics in laser additive manufacturing [TekCT] / C. L. A. Leung [et al.] // Nat. Commun. — 2018. — Vol. 9. — P. 1355.
12. *Bertoli, U. S.* Stability of cellular microstructure in laser powder bed fusion of 316l stainless steel [TekCT] / U. S. Bertoli, B. E. MacDonald, J. M. Schoenung // Mater. Sci. Eng.: A. — 2019. — Vol. 739. — P. 109—117.
13. *Kabashin, A. V.* Synthesis of colloidal nanoparticles during femtosecond laser ablation of gold in water [TekCT] / A. V. Kabashin, M. Meunier // J. Appl. Phys. — 2003. — Vol. 94, no. 12. — P. 7941—7943.
14. Generation of Al nanoparticles via ablation of bulk Al in liquids with short laser pulses [TekCT] / E. Stratakis [et al.] // Opt. Express. — 2009. — Vol. 17, no. 15. — P. 12650—12659.
15. On-line characterization of gold nanoparticles generated by laser ablation in liquids [TekCT] / M. Maciulevicius [et al.] // Phys. Procedia. Vol. 41. — Elsevier. 2013. — P. 531—538.
16. *Povarnitsyn, M. E.* Hydrodynamic modeling of femtosecond laser ablation of metallic targets in vacuum and in liquid [TekCT] / M. E. Povarnitsyn, T. Itina // Appl. Phys. A. — 2014. — Vol. 117, no. 1. — P. 175—178.
17. *Zhang, D.* Laser synthesis and processing of colloids: Fundamentals and applications [TekCT] / D. Zhang, B. Gokce, S. Barcikowski // Chem. Rev. — 2017. — Vol. 117, no. 5. — P. 3990—4103.
18. External field-assisted laser ablation in liquid: An efficient strategy for nanocrystal synthesis and nanostructure assembly [TekCT] / J. Xiao [et al.] // Prog. Mater Sci. — 2017. — Vol. 87. — P. 140—220.
19. Laser-induced microplasma as a tool for microstructuring transparent media [TekCT] / V. P. Veiko [et al.] // Quantum Electron. — 2017. — Vol. 47, no. 9. — P. 842—848.
20. Laser alloying of co nanorods and al nanoparticles in a liquid [TekCT] / E. V. Barmina [et al.] // ChemPhysChem. — 2017. — Vol. 18, no. 9. — P. 1069—1073.
21. Laser-driven hydrothermal process studied with excimer laser pulses [TekCT] / R. Mariella [et al.] // J. Appl. Phys. — 2017. — Vol. 122, no. 7. — P. 075104.

22. Formation of alloy nanoparticles by laser ablation of au/fe multilayer films in liquid environment [Текст] / V. Amendola [et al.] // J. Colloid Interface Sci. — 2017. — Vol. 489. — P. 18—27.
23. *Inogamov, N. A.* Dynamics of gold ablation into water [Текст] / N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskii, V. A. Khokhlov // J. Exp. Theor. Phys. — 2018. — Vol. 127, no. 1. — P. 79—106.
24. First-principles modeling of laser-matter interaction and plasma dynamics in nanosecond pulsed laser shock processing [Текст] / Z. Zhang [et al.] // J. Appl. Phys. — 2018. — Vol. 123, no. 5. — P. 054901.
25. Two mechanisms of nanoparticle generation in picosecond laser ablation in liquids: the origin of the bimodal size distribution [Текст] / C.-Y. Shih [et al.] // Nanoscale. — 2018. — Vol. 10. — P. 6900—6910.
26. Hydrodynamic phenomena induced by laser ablation of metal into liquid [Текст] / Y. Petrov [et al.] // Appl. Surf. Sci. — 2019. — Vol. 492. — P. 285—297.
27. Nanosecond-laser generation of nanoparticles in liquids: From ablation through bubble dynamics to nanoparticle yield [Текст] / S. I. Kudryashov [et al.] // Materials. — 2019. — Vol. 12. — P. 562.
28. *Liao, Y.* Warm laser shock peening and related laser processing technique [Текст] / Y. Liao, C. Ye, G. Cheng // Opt. Laser Technol. — 2016. — Vol. 78. — P. 15—24.
29. Plasma generated during underwater pulsed laser processing [Текст] / J. Hoffman [и др.] // Applied Surface Science. — 2017. — ЯНВ. — Т. 417.
30. *Walsh, N.* Optical diagnostics of laser-produced aluminium plasmas under water [Текст] / N. Walsh, J. Costello, T. Kelly // Appl. Phys. B. — 2017. — Vol. 123. — P. 179.
31. *Kim, J.* Effects of simulation parameters on residual stresses for laser shock peening finite element analysis [Текст] / J. Kim, Y. Kim, J. Kim // J. Mech. Sci. Technol. — 2013. — Vol. 27, no. 1. — P. 2025—2034.
32. *Langer, K.* Finite element analysis of laser peening of thin aluminum structures [Текст] / K. Langer, T. J. Spradlin, M. E. Fitzpatrick // Metals. — 2020. — Vol. 10, no. 1.

33. Introduction to Laser Peening [Текст]. — <https://www.lsptechnologies.com/wp-content/uploads/2019/03/Intro-to-Laser-Peening-Webinar.pdf>.
34. Formation of high-density dislocations and hardening in femtosecond-laser-shocked silicon [Текст] / M. Tsujino [et al.] // Appl. Phys. Express. — 2012. — Vol. 5, no. 2. — P. 022703.
35. Multiple-shocks induced nanocrystallization in iron [Текст] / T. Matsuda [et al.] // Appl. Phys. Lett. — 2014. — Vol. 105, no. 2. — P. 021902.
36. Femtosecond laser peening of 2024 aluminum alloy without a sacrificial overlay under atmospheric conditions [Текст] / T. Sano [et al.] // J. Laser Appl. — 2017. — Vol. 29, no. 1. — P. 012005.
37. Improvement of corrosion resistance of AA2024-T3 using femtosecond laser peening without protective and confining medium [Текст] / U. Trdan [et al.] // Corros. Sci. — 2018. — Vol. 143. — P. 46—55.
38. Femtosecond laser peening of friction stir welded 7075-T73 aluminum alloys [Текст] / T. Kawashima [et al.] // J. Mater. Process. Technol. — 2018. — Vol. 262. — P. 111—122.
39. *Гуляев, А. И.* Металловедение [Текст] : учебник для студентов / А. И. Гуляев. — 6-е изд., перераб. и доп. — М. : Металлургия, 1986. — С. 541.
40. Attenuation and inflection of initially planar shock wave generated by femtosecond laser pulse [Текст] / V. Shepelev [et al.] // Optics and Laser Technology. — 2022. — Vol. 152. — P. 108100.
41. *Zel'dovich, Y. B.* Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena [Текст] / Y. B. Zel'dovich, Y. P. Raizer. — Massachusetts, 2012.
42. *Caldirola, P.* PHYSICS OF HIGH-ENERGY DENSITY. Proceedings of the International School of Physics, Enrico Fermi, Varenna, Italy, 14th–26th July 1969. Course XLVIII. [Текст] / P. Caldirola, H. E. Knoepfel //. — 1971.
43. *Graham, R. A.* Solids under high-pressure shock compression: mechanics, physics, and chemistry [Текст] / R. A. Graham. — NY : Springer New York, 1993.
44. High pressure shock compression of solids [Текст] / ed. by J. R. Asay, M. Shahinpoor. — NY : Springer New York, 1993.

45. Behavior of aluminum near an ultimate theoretical strength in experiments with femtosecond laser pulses [Текст] / S. I. Ashitkov [et al.] // JETP Lett. — 2010. — Vol. 92, no. 8. — P. 516—520.
46. *Zhakhovskii, V.* Elastic-plastic phenomena in ultrashort shock waves [Текст] / V. Zhakhovskii, N. Inogamov // JETP Lett. — 2010. — Vol. 92, no. 8. — P. 521—526.
47. The elastic-plastic response of aluminum films to ultrafast laser-generated shocks [Текст] / V. H. Whitley [et al.] // J. Appl. Phys. — 2011. — Vol. 109. — P. 013505.
48. Two-zone elastic-plastic single shock waves in solids [Текст] / V. V. Zhakhovsky [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2011. — Vol. 107, no. 13. — P. 135502.
49. Invariance of the dissipative action at ultrahigh strain rates above the strong shock threshold [Текст] / J. C. Crowhurst [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2011. — Vol. 107. — P. 144302.
50. Ultrashort shock waves in nickel induced by femtosecond laser pulses [Текст] / B. J. Demaske [et al.] // Phys. Rev. B. — 2013. — Vol. 87, no. 5. — P. 054109.
51. Picosecond-nanosecond laser flash, formation of powerful elastic waves in crystals, and shock peening [Текст] / N. Inogamov [et al.] // Proc. of the 32nd International Symposium on Shock Waves (ISSW32). — ISSW32. 2019. — P. 3077—3106.
52. High-energy-density physics and laser technologies [Текст] / S. I. Anisimov [et al.] // J. Exp. Theor. Phys. — 2019. — Vol. 129, no. 4. — P. 757—782.
53. *Whitesides, G. M.* The origins and the future of microfluidics [Текст] / G. M. Whitesides // Nature. — 2006. — Vol. 442. — P. 368—373.
54. *Sima, F.* Ultrafast laser manufacturing of nanofluidic systems [Текст] / F. Sima, K. Sugioka // Nanophotonics. — 2021. — Vol. 10. — P. 2389—2406.
55. Micromachining a Miniaturized Capillary Electrophoresis-Based Chemical Analysis System on a Chip [Текст] / D. J. Harrison [et al.] // Science. — 1993. — Vol. 261. — P. 895—897.

56. Cell culture monitoring for drug screening and cancer research: a transparent, microfluidic, multi-sensor microsystem [Текст] / A. Weltin [et al.] // Lab Chip. — 2014. — Vol. 14. — P. 138—146.
57. *Salafi, T.* Advancements in microfluidics for nanoparticle separation [Текст] / T. Salafi, K. Zeming, Y. Zhang // Lab Chip. — 2017. — Vol. 17. — P. 11—33.
58. Progress in Microfluidics-Based Exosome Separation and Detection Technologies for Diagnostic Applications [Текст] / S. Lin [et al.] // Small. — 2020. — Vol. 16.
59. *Picot-Clément, J.* Laser technologies for micro and nanofluidics systems [Текст] / J. Picot-Clément // Photonics Views. — 2023. — Vol. 20. — P. 24—27.
60. *Kavokine, N.* Fluids at the Nanoscale: From Continuum to Subcontinuum Transport [Текст] / N. Kavokine, R. R. Netz, L. Bocquet // Annu. Rev. Fluid Mech. — 2021. — Vol. 53. — P. 377—410.
61. *Bocquet, L.* Nanofluidics coming of age [Текст] / L. Bocquet // Nat. Mater. — 2020. — Vol. 19. — P. 254—256.
62. *Xia, D.* Fabrication of Nanofluidic Biochips with Nanochannels for Applications in DNA Analysis [Текст] / D. Xia, J. Yan, S. Hou // Small. — 2012. — Vol. 8. — P. 2787—2801.
63. *Niu, M.* Emerging Abnormal Phenomena in Confined Nanofluidics [Текст] / M. Niu, F. Chen, J. Feng // Solid State Nanopores. Nanostructure Science and Technology / ed. by J. Leburton. — Springer, Cham, 2023. — P. 35—94.
64. *Sparreboom, W.* Principles and applications of nanofluidic transport [Текст] / W. Sparreboom, A. van den Berg, J. C. T. Eijkel // Nat. Nanotechnol. — 2009. — Vol. 4. — P. 713—720.
65. Nanofluidics in chemical analysis [Текст] / A. Piruska [et al.] // Chem. Soc. Rev. — 2010. — Vol. 39. — P. 1060—1072.
66. *Keller, U.* Recent developments in compact ultrafast lasers [Текст] / U. Keller // Nature. — 2003. — Vol. 424. — P. 831—838.

67. *Sugioka, K.* Ultrafast lasers—reliable tools for advanced materials processing [Текст] / K. Sugioka, Y. Cheng // Light Sci. Appl. — 2014. — Vol. 3. — e149.
68. *Stoian, R.* Volume photoinscription of glasses: three-dimensional micro- and nanostructuring with ultrashort laser pulses [Текст] / R. Stoian // Appl. Phys. A. — 2020. — Vol. 126. — P. 438.
69. Ultrafast laser processing of materials: From science to industry [Текст] / M. Malinauskas [et al.] // Light Sci. Appl. — 2016. — Vol. 5. — e16133.
70. Evolution in lithography techniques: Microlithography to nanolithography [Текст] / E. Sharma [et al.] // Nanomaterials. — 2022. — Vol. 12. — P. 2754.
71. Femtosecond laser processing as a versatile tool for advanced solid state lighting sources: From efficacy enhancement to colour temperature control [Текст] / L. Kuna [et al.] // Appl. Surf. Sci. — 2012. — Vol. 258. — P. 9213—9217.
72. Experimental study of ejecta from shock melted lead [Текст] / Y. Chen [и др.] // Journal of Applied Physics. — 2012. — Т. 111, № 5. — C. 053509.
73. Femtosecond laser hybrid processing strategy of transparent hard and brittle materials [Текст] / J. W. Tan [et al.] // Front. Chem. — 2022. — Vol. 10. — P. 1082738.
74. Ultrafast laser welding of ceramics [Текст] / E. H. Penilla [et al.] // Science. — 2019. — Vol. 365. — P. 803—808.
75. High aspect ratio nanochannel machining using single shot femtosecond Bessel beams [Текст] / M. K. Bhuyan [et al.] // Appl. Phys. Lett. — 2010. — Vol. 97. — P. 081102.
76. *Durnin, J.* Diffraction-free beams [Текст] / J. Durnin, J. J. Miceli, J. H. Eberly // Phys. Rev. Lett. — 1987. — Vol. 58. — P. 1499—1501.
77. High aspect ratio micro-explosions in the bulk of sapphire generated by femtosecond Bessel beams [Текст] / L. Rapp [et al.] // Sci. Rep. — 2016. — Vol. 6. — P. 34286.

78. Formation of nanochannels in sapphire with ultrashort Bessel pulses [TekCT] / S. Lavin-Varela [et al.] // Opt. Express. — 2022. — Vol. 30. — P. 6016—6036.
79. Laser-Induced Microexplosion Confined in the Bulk of a Sapphire Crystal: Evidence of Multimegabar Pressures [TekCT] / S. Juodkazis [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2006. — Vol. 96. — P. 166101.
80. Laser-matter interaction in the bulk of a transparent solid: Confined microexplosion and void formation [TekCT] / E. G. Gamaly [et al.] // Phys. Rev. B. — 2006. — Vol. 73. — P. 214101.
81. *Juha, L.* Irreversible Changes in Materials Exposed to Intense EUV Radiation [TekCT] / L. Juha // Phot. Sources Lithogr. Metrol. — 2023. — P. 603—626.
82. Direct LiF imaging diagnostics on refractive X-ray focusing at the EuXFEL High Energy Density instrument [TekCT] / S. Makarov [et al.] // J. Synchrotron Radiat. — 2023. — Vol. 30. — P. 208—216.
83. Generation of 10^{20} W/cm² hard X-ray laser pulses with two-stage reflective focusing system [TekCT] / H. Mimura [et al.] // Nat. Commun. — 2014. — Vol. 5. — P. 3539.
84. Nanofocusing Optics for an X-Ray Free-Electron Laser Generating an Extreme Intensity of 100 EW/cm² Using Total Reflection Mirrors [TekCT] / H. Yumoto [et al.] // Appl. Sci. — 2020. — Vol. 10. — P. 2611.
85. Using Diffuse Scattering to Observe X-Ray-Driven Nonthermal Melting [TekCT] / N. J. Hartley [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2021. — Vol. 126. — P. 015703.
86. Extreme focusing of hard X-ray free-electron laser pulses enables 7 nm focus width and 10^{22} W cm² intensity [TekCT] / J. Yamada [et al.] // Nat. Photonics. — 2024. — Vol. 18. — P. 685—690.
87. Petawatt and exawatt class lasers worldwide [TekCT] / C. N. Danson [et al.] // High Power Laser Sci. Eng. — 2019. — Vol. 7. — e54.
88. Soft X-ray diffraction patterns measured by a LiF detector with sub-micrometre resolution and an ultimate dynamic range [TekCT] / S. Makarov [et al.] // J. Synchrotron Radiat. — 2020. — Vol. 27. — P. 625—632.

89. Micron-scale phenomena observed in a turbulent laser-produced plasma [Текст] / G. Rigon [et al.] // Nat. Commun. — 2021. — Vol. 12. — P. 2679.
90. Direct imaging of shock wave splitting in diamond at Mbar pressure [Текст] / S. Makarov [et al.] // Matter Radiat. Extrem. — 2023. — Vol. 8. — P. 066601.
91. Evidence of superdense aluminium synthesized by ultrafast microexplosion [Текст] / A. Vailionis [et al.] // Nat. Commun. — 2011. — Vol. 2. — P. 445.
92. *Рогалин, В.* Создание мощных технологических наносекундных частотно-импульсных твердотельных лазеров: проблемы и решения [Текст] / В. Рогалин, К. Крымский // Радиотехника и электроника. — 2023. — Т. 68, № 12. — С. 1236—1246.
93. Micro/nanoengineering of functionalized metal surfaces based on short/ultra-short-pulsed lasers: a review [Текст] / K. Yu [et al.] // Journal of Materials Science. — 2024. — Vol. 59, no. 5. — P. 1819—1866.
94. Лазерная абляция: физические представления и приложения (обзор) [Текст] / Н. А. Иногамов [и др.] // Теплофизика высоких температур. — 2020. — Т. 58, № 4. — С. 689—706.
95. Действие излучения большой мощности на металлы [Текст] / С. И. Анисимов [и др.]. — Москва : Наука, 1970.
96. *Мирзоев, Ф.* Распространение нелинейных продольных волн в твердом теле с учетом взаимодействия полей деформации и концентрации дефектов [Текст] / Ф. Мирзоев // Журнал технической физики. — 2002. — Т. 72, № 10. — С. 53—57.
97. *Васильев, С. В.* Изменения кристаллической структуры металлов под воздействием лазерного излучения [Текст] / С. В. Васильев, А. Ю. Иванов, В. А. Лиопо // ИФЖ. — 2007. — Т. 80, № 5. — С. 12—18.
98. *Vegel, K.* Application of electron and optical microscopy in studying laser-irradiated metal surfaces [Текст] / K. Vogel, P. J. Beckland // Appl. Phys. — 1965. — Vol. 36. — P. 3697—3701.
99. *Лариков, Л. Н.* Массоперенос в металлах при импульсном нагружении [Текст] / Л. Н. Лариков, В. Ф. Мазанко, В. М. Фальченко // Физика и химия обработки материалов. — 1983. — Т. 6. — С. 144—145.

100. Изменение структуры сплава меди-хром под воздействием импульса СО₂ лазера [Текст] / Р. Е. Ровинский [и др.] // Физика и химия обработки материалов. — 1980. — Т. 3. — С. 7—11.
101. *Liedl, G.* Features of changes in the nanostructure and colorizing of copper during scanning with a femtosecond laser beam [Текст] / G. Liedl, R. Pospichal, S. Murzin // Comput. Opt. — 2017. — Vol. 41, no. 4. — P. 504—509.
102. Пластическая деформация меди в результате воздействия мощного ультрафиолетового наносекундного лазерного импульса [Текст] / Т. В. Малинский [и др.] // Письма в ЖТФ. — 2020. — Т. 46, № 16. — С. 51—54.
103. Modification of the surface of copper and its alloys due to impact to nanosecond ultraviolet laser pulses [Текст] / Y. V. Khomich [et al.] // Acta Astronautica. — 2022. — Vol. 194. — P. 434—441.
104. *Малинский, Т. В.* Предпороговые эффекты при воздействии ультрафиолетовых лазерных импульсов на медь и ее сплавы [Текст] / Т. В. Малинский, В. Е. Рогалин // Журнал технической физики. — 2022. — Т. 92, № 2. — С. 268—273.
105. *Малинский, Т. В.* Пластическая деформация меди и ее сплавов при воздействии наносекундным ультрафиолетовым лазерным импульсом [Текст] / Т. В. Малинский, В. Е. Рогалин, В. А. Ямщиков // Физика металлов и металловедение. — 2022. — Т. 123, № 2. — С. 192—199.
106. Особенности поведения точечных дефектов при оптикопластическом эффекте в меди [Текст] / Т. В. Малинский [и др.] // Физика металлов и металловедение. — 2023. — Т. 124, № 7. — С. 653—659.
107. *Спицын, В. И.* Электропластическая деформация металлов [Текст] / В. И. Спицын, О. А. Троицкий. — Москва : Наука, 1985.
108. *Карась, В. И.* Неравновесная кинетика электрон-фононной подсистемы кристалла при действии переменных электрических и магнитных полей как основа электро- и магнитопластического эффектов [Текст] / В. И. Карась, В. И. Соколенко // УФН. — 2018. — Т. 188, № 11. — С. 1156—1177.

109. *Неклюдов, И. М.* Влияние магнитных полей на сопротивление пластической деформации кристаллических тел [Текст] / И. М. Неклюдов, Я. Д. Стародубов, В. И. Соколенко // УФЖ. — 2005. — Т. 50, № 8. — А113—А121.
110. *Тяпунина, Х. А.* Действие ультразвука на кристаллы с дефектами [Текст] / Х. А. Тяпунина, Е. К. Наими, Г. М. Зиненкова. — Москва : Московский государственный университет, 1999.
111. *Островская, Г. В.* Лазерная искра в газах [Текст] / Г. В. Островская, А. Н. Зайдель // Успехи физических наук. — 1973. — Т. 111, № 4. — С. 579—615.
112. *Каплунов, И. А.* Оптические свойства металлических зеркал для СО₂ лазеров [Текст] / И. А. Каплунов, В. Е. Рогалин // Известия Ростовского Сочинского государственного университета. — 2013. — Т. 4—2 (28). — С. 120—127.
113. Эволюция микроструктуры приповерхностного слоя меди при термоциклировании лазерными импульсами наносекундной длительности [Текст] / И. В. Неласов [и др.] // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2025. — Т. 167, № 6. — С. 782—797.
114. *Rapaport, D. C.* The Art of Molecular Dynamics Simulation [Текст] / D. C. Rapaport. — Cambridge : Cambridge University Press, 2004. — P. 549.
115. *Niklasson, A. M. N.* Fast method for quantum mechanical molecular dynamics [Текст] / A. M. N. Niklasson, M. J. Cawkwell // Physical Review B. — 2012. — Vol. 86, no. 17. — P. 174308.
116. *Warshel, A.* Theoretical studies of enzymic reactions: Dielectric, electrostatic and steric stabilization of the carbonium ion in the reaction of lysozyme [Текст] / A. Warshel, M. Levitt // Journal of Molecular Biology. — 1976. — Vol. 103, no. 2. — P. 227—249.
117. *Кривцов, А. М.* Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов [Текст] / А. М. Кривцов. — СПб. : Издательство Политехнического университета, 2009. — С. 126.
118. *Ландау, Л.* Механика [Текст] / Л. Ландау, Е. Лифшиц. — М. : Наука, 1965.

119. *Голдстейн, Г.* Классическая механика [Текст] / Г. Голдстейн. — М. : Наука, 1975.
120. *Журавлев, В. Ф.* Основы теоретической механики [Текст] / В. Ф. Журавлев. — М. : Наука, 1997.
121. *Арнольд, В. И.* Математические методы классической механики [Текст] / В. И. Арнольд. — М. : Ленанд, 2017.
122. *Lewis, H.* The Liouville theorem and accurate plasma simulation [Текст] / H. Lewis, D. Barnes, K. Melendes // J. Comput. Phys. — 1987. — Vol. 69, no. 2. — P. 267—282.
123. *Omelyan, I. P.* Symplectic analytically integrable decomposition algorithms: classification, derivation, and application to molecular dynamics, quantum and celestial mechanics simulations [Текст] / I. P. Omelyan, I. M. Mryglod, R. Folk // Comput. Phys. Comm. — 2003. — Vol. 151. — P. 272—314.
124. *Суриус, Ю. Б.* О каноничности отображений, порождаемых методами Рунге — Кутты при интегрировании систем $x'' = -dU/dx$ [Текст] / Ю. Б. Суриус // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 1989. — Т. 29, № 2. — С. 202—211.
125. *Киселев, С. П.* Метод молекулярной динамики в механике деформированного твердого тела [Текст] / С. П. Киселев // Прикл. мех. техн. физ. — 2014. — Т. 55, № 3. — С. 113—139.
126. *Trotter, H. F.* On the product of semi-groups of operators [Текст] / H. F. Trotter // Proc. Amer. Math. Soc. — 1959. — Vol. 10, no. 4. — P. 545—551.
127. *Рихтмайер, Р.* Принципы современной математической физики [Текст]. Т. 2 / Р. Рихтмайер. — М. : Мир, 1982.
128. *Allen, M. P.* Computer simulation of liquids [Текст] / M. P. Allen, D. J. Tildesley. — Oxford : Oxford Univ. Press, 1987.
129. Наука гидродинамика: от древних цивилизаций до наших дней [Текст] / О. Ю. Семенов [и др.] // Техника. Технологии. Инженерия. — 2016. — 1 (1). — С. 1—5.
130. *Gaydukov, R.* Double-Deck Structure in a Fluid Flow Induced by a Uniformly Rotating Disk with Small Irregularities: the Nonsymmetric Case [Текст] / R. Gaydukov // Russ. J. Math. Phys. — 2024. — Vol. 31. — P. 209—217.

131. *Кравченко, И. В.* Методика изучения гидродинамики жидкости [Текст] / И. В. Кравченко // Достижения науки и образования. — 2018. — 2 (24).
132. *Норман, Г. Э.* Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики [Текст] / Г. Э. Норман, В. В. Стегайлов // Матем. моделирование. — 2012. — Т. 24, № 6. — С. 3—44.
133. Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия лизинового дендримера и пептидов Семакс [Текст] / Е. В. Попова [и др.] // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. — 2016. — Т. 16, № 4. — С. 716—724.
134. Laser Shock Wave: The Plasticity and Thickness of the Residual Deformation Layer and the Transition from the Elastoplastic to Elastic Propagation Mode [Текст] / N. Inogamov [et al.] // JETP Letters. — 2022. — Vol. 115. — P. 71—78.
135. *V. V. Shepelev N. A. Inogamov, S. V. F.* The role of geometry in the generation of a shock wave by a femtosecond laser pulse [Текст] / S. V. F. V. V. Shepelev N. A. Inogamov // Journal of Physics: Conference Series. — 2021. — Vol. 1787, no. 1. — P. 012023.
136. *Аксенова, Е. В.* Вычислительные методы исследования молекулярной динамики [Текст] / Е. В. Аксенова, М. С. Кшевецкий //. — 2009.
137. Formation of high-aspect-ratio nanocavity in LiF crystal using a femtosecond of x-ray FEL pulse [Текст] / S. S. Makarov [et al.]. — 2024. — arXiv: [2409.03625](https://arxiv.org/abs/2409.03625) [[physics.plasm-ph](https://arxiv.org/abs/2409.03625)]. — URL: <https://arxiv.org/abs/2409.03625>.
138. *Шилов, М. А.* Компьютерное моделирование молекулярных систем методом молекулярной динамики [Текст] / М. А. Шилов, В. В. Веселов. — Иваново : ИГТА, 2010. — С. 168.
139. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials [Текст] / V. V. Zhakhovskii [et al.] // Applied Surface Science. — 2009. — Vol. 255, no. 24. — P. 9592.
140. Shock-induced melting and crystallization in titanium irradiated by ultrashort laser pulse [Текст] / V. Zhakhovsky [et al.] // Physics of Fluids. — 2023. — Vol. 35. — P. 096104.

141. Молекулярно-динамическое моделирование модификации алюминия лазерной ударной волной [Текст] / Е. А. Перов [и др.] // Математическое моделирование и численные методы. — 2023. — № 4. — С. 74—92.
142. *Perov, E. A.* Formation of cylindrical cavity in lithium fluoride irradiated by x-ray pulse [Текст] / Е. А. Perov, V. V. Zhakhovsky, A. N. Doludenko // XXXIX Fortov International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS 2024). — Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia, 03/2024.
143. Determination of the Most Important Parameters of a Metal Irradiated by an Ultrashort Laser Pulse [Текст] / N. Inogamov [et al.] // JETP Letters. — 2023. — Vol. 117. — P. 104—110.
144. *Киттель, Ч.* Введение в физику твердого тела [Текст] / Ч. Киттель ; под ред. А. . Гусев ; пер. А. А. Гусев, А. В. Пахнев. — М. : Наука, 1978. — С. 791.
145. Molecular dynamics with coupling to an external bath [Текст] / H. J. C. Berendsen [et al.] // J. Chem. Phys. — 1984. — Vol. 81, no. 8. — P. 3684—3690.
146. *Hoover, W. G.* Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions [Текст] / W. G. Hoover // Phys. Rev. A. — 1985. — Vol. 31, no. 3. — P. 1695—1697.
147. *Nose, S.* A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble [Текст] / S. Nose // Mol. Phys. — 1984. — Vol. 52. — P. 255—268.
148. *Nose, S.* A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods [Текст] / S. Nose // J. Chem. Phys. — 1984. — Vol. 81, no. 1. — P. 511—519.
149. *Nose, S.* Constant-temperature molecular dynamics [Текст] / S. Nose // J.Phys.: Condens.Matter. — 1990. — Vol. 2. — SA115—SA119.
150. *Хеерман, Д.* Методы компьютерного эксперимента в компьютерной физике [Текст] / Д. Хеерман. — М. : Наука, 1990. — С. 176.
151. *Jones, J. E.* On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas [Текст] / J. E. Jones // Proc. R. Soc. Lond. A. — 1924. — Vol. 106, no. 738. — P. 463—477.

152. *Morse, P. M.* Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels [Текст] / P. M. Morse // Physical Review. — 1929. — Vol. 34, no. 1. — P. 57—64.
153. *Stockmayer, W. H.* Second Virial Coefficients of Polar Gases [Текст] / W. H. Stockmayer // J. Chem. Phys. — 1941. — Vol. 9, no. 5. — P. 398—402.
154. *Daw, M. S.* Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals [Текст] / M. S. Daw, M. I. Baskes // Physical Review B. — 1984. — Vol. 29, no. 12. — P. 6443—6453.
155. *Хартри, Д.* Расчеты атомных структур [Текст] / Д. Хартри. — М. : Изд-во Иностранной литературы, 1960. — С. 272.
156. *Baskes, M. I.* Application of the Embedded-Atom Method to Covalent Materials: A Semiempirical Potential for Silicon [Текст] / M. I. Baskes // Physical Review Letters. — 1987. — Vol. 59, no. 23. — P. 2666—2669.
157. Molecular dynamics simulation and visualization of melting aluminum crystal in shock wave [Текст] / S. Gubin [et al.] // Scientific Visualization. — 2014. — Vol. 6. — P. 14—23.
158. *Фёдоров, А. В.* Молекулярно-динамическое моделирование плавления наночастиц алюминия методом внедренного атома [Текст] / А. В. Фёдоров, А. В. Шульгин // Физика горения и взрыва. — 2015. — Т. 51, № 3. — С. 55—59.
159. *Фёдоров, А. В.* Молекулярно-динамическое и феноменологическое моделирование нагрева нанобъекта алюминия [Текст] / А. В. Фёдоров, А. В. Шульгин // Физика горения и взрыва. — 2016. — Т. 52, № 3. — С. 45—50.
160. *Мурин, А. В.* Молекулярно-динамическое моделирование локальной кластерной структуры алюминия в жидком и переохлажденном состоянии [Текст] / А. В. Мурин, И. Н. Шабанова // Химическая физика и мезоскопия. — 2015. — № 4.
161. *Колотова, Л. Н.* Молекулярно-динамическое моделирование стеклования переохлажденного расплава алюминия [Текст] / Л. Н. Колотова, Г. Э. Норман, В. В. Писарев // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. — 2013. — Т. 14, № 2.

162. *Мурин, А. В.* Моделирование локальной кластерной структуры двухкомпонентной системы AlNi в жидком и переохлажденном состоянии [Текст] / А. В. Мурин, И. Н. Шабанова // Химическая физика и мезоскопия. — 2016. — № 4.
163. *Рогачев, С. А.* Молекулярно-динамическое моделирование процесса твердофазного горения в системе Ti-Al [Текст] / С. А. Рогачев // Труды ежегодной научной конференции ИСМАН. — 2019.
164. *Корнич, Г. В.* Молекулярно-динамическое моделирование образования дефектов в кристалле алюминия при бомбардировке ионами низких энергий [Текст] / Г. В. Корнич, Г. Бетц, А. И. Бажин // ФТТ. — 2001. — Т. 43, № 1. — С. 30.
165. *Mishin, Y.* Atomistic modeling of interfaces and their impact on microstructure and properties [Текст] / Y. Mishin, M. Asta, J. Li // Acta Materialia. — 2010. — Vol. 58. — P. 1117—1151.
166. *Mirwald, P. W.* The melting curve of gold, silver and copper to 60-kbar pressure: a reinvestigation [Текст] / P. W. Mirwald, G. C. Kennedy // J. Geophys. Res. — 1979. — Vol. 84. — P. 6750.
167. Melting of copper and nickel at high pressure; the role of d-electrons [Текст] / S. Japel [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2005. — Vol. 95. — P. 167801.
168. Melting curve of copper measured to 16 GPa using a multi-anvil press [Текст] / H. Brand [et al.] // High Pressure Res. — 2006. — Vol. 26. — P. 185.
169. Quasi ab initio molecular dynamic study of Cu melting [Текст] / A. B. Belonoshko [et al.] // Phys. Rev. B. — 2000. — Vol. 61. — P. 3838.
170. Modified Z method to calculate melting curve by molecular dynamics [Текст] / S. Wang [et al.] // J. Chem. Phys. — 2013. — Vol. 138. — P. 134101.
171. Melting of copper under high pressures by molecular dynamics simulation [Текст] / Y. N. Wu [et al.] // Chem. Phys. Lett. — 2011. — Vol. 515. — P. 217—220.
172. Ab initio melting curve of copper by the phase coexistence approach [Текст] / L. Vocadlo [et al.] // J. Chem. Phys. — 2004. — Vol. 120. — P. 2872.

173. *Schiøtz, J.* A maximum in the strength of nanocrystalline copper [Текст] / J. Schiøtz, K. W. Jacobsen // Science. — 2003. — Vol. 301. — P. 1357—1359.
174. *Куксин, А. Ю.* Атомистическое моделирование пластичности и разрушения нанокристаллической меди при высокоскоростном растяжении [Текст] / А. Ю. Куксин, В. В. Стегайлов, А. В. Янилкин // Физика твердого тела. — 2008. — Т. 50, № 11. — С. 1984—1990.
175. Simulation of a nonequilibrium phase transition initiated by volumetric heat source using a molecular dynamic method [Текст] / S. Y. Korostelev [et al.] // AIP Conference Proceedings. Vol. 1783. — 2016. — P. 020104-1—020104-4.
176. *Хомич, В. Ю.* Механизмы и модели прямого лазерного наноструктурирования материалов [Текст] / В. Ю. Хомич, В. А. Шмаков // Успехи физических наук. — 2015. — Т. 185, № 5. — С. 489—499.
177. Способ сварки деталей из жаропрочных сплавов на никелевой основе с использованием лазерного излучения [Текст] : 2752822 С1 / Т. В. Малинский [и др.]. — Заявл. 2021.
178. *Хомич, В. Ю.* Исследование термической обработки поверхностей металлов и керамик наносекундными импульсами лазерного ультрафиолетового излучения для диффузионной сварки [Текст] / Хомич В. Ю. — Санкт-Петербург, 2021. — Дис... канд. техн. наук: 2.6.1 (05.16.01), 139 л.
179. *Zhakhovsky, V.* EAM potential for Copper in a wide range of compressions and temperatures [Текст] / V. Zhakhovsky. — 04.2025.
180. *Zhukhovitskii, D.* Thermodynamics and the structure of clusters in the dense Au vapor from molecular dynamics simulation: Supplementary Material [Текст] / D. Zhukhovitskii, V. Zhakhovsky. — 08.2020.
181. *Yanik, E. G.* Numerical Recipes in FORTRAN—The Art of Scientific Computing 2nd Ed. (W. H. Press, W. T. Vetterling, S. A. Teukolsky and B. P. Flannery) [Текст] / E. G. Yanik // SIAM Review. — 1994. — Vol. 36, no. 1. — P. 149—150.
182. *Nelder, J. A.* A Simplex Method for Function Minimization [Текст] / J. A. Nelder, R. Mead // The Computer Journal. — 1965. — Jan. — Vol. 7, no. 4. — P. 308—313. — URL: <https://doi.org/10.1093/comjnl/7.4.308>.

183. *Buckingham, R. A.* The Classical Equation of State of Gaseous Helium, Neon and Argon [Текст] / R. A. Buckingham // Proceedings of the Royal Society A. — 1938. — Vol. 168. — P. 264—283.
184. *Schropp, A.* Imaging Shock Waves in Diamond with Both High Temporal and Spatial Resolution at an XFEL [Текст] / A. Schropp, R. Hoppe, V. e. a. Meier // Sci Rep. — 2015. — Vol. 5. — P. 11089. — URL: <https://doi.org/10.1038/srep11089>.
185. Использование системы высокого разрешения VISAR для регистрации быстропротекающих процессов на ударно-волновых фронтах [Текст] / М. В. Банников [и др.] // Вестник российских университетов. Математика. — 2010. — 3—1н.
186. Dynamic fracture kinetics, influence of temperature and microstructure in the atomistic model of aluminum [Текст] / A. Kuksin [et al.] // International Journal of Fracture. — 2010. — Vol. 162, no. 1/2. — P. 127—136.
187. *Stegailov, V. V.* Structural transformations in single-crystal iron during shock-wave compression and tension: molecular dynamics simulation [Текст] / V. V. Stegailov, A. V. Yanilkin // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2007. — Vol. 104, no. 6. — P. 928—935.
188. Influence of grain boundary properties on spall strength: Grain boundary energy and excess volumes [Текст] / S. J. Fensin [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2012. — Vol. 112, no. 8. — P. 083529.
189. Atomic scale studies of spall behavior in nanocrystalline Cu [Текст] / A. M. Dongare [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2010. — Vol. 108, no. 11. — P. 113518.
190. Shock-induced consolidation and spallation of Cu nanopowders [Текст] / L. Huang [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2012. — Vol. 111, no. 1. — P. 113508.
191. *Krasnikov, V. S.* Plasticity driven growth of nanovoids and strength of aluminum at high rate tension: Molecular dynamics simulations and continuum modeling [Текст] / V. S. Krasnikov, A. E. Mayer // International Journal of Plasticity. — 2015. — Vol. 74. — P. 75—91.

192. Dislocation evolution and peak spall strengths in single crystal and nanocrystalline Cu [Текст] / K. Mackenchery [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2016. — Vol. 119, no. 4. — P. 044301.
193. Atomistic simulations of shock-induced microjet from a grooved aluminium surface [Текст] / J. L. Shao [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2013. — Vol. 113, no. 15. — P. 153501.
194. Ejecta production from shocked Pb surface via molecular dynamics [Текст] / G. Ren [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2014. — Vol. 116, no. 13. — P. 133507.
195. *Dyachkov, S. A.* Shock-produced ejecta from tin: Comparative study by molecular dynamics and smoothed particle hydrodynamics methods [Текст] / S. A. Dyachkov, A. N. Parshikov, V. V. Zhakhovsky // Journal of Physics: Conference Series. Vol. 653. — 2015. — P. 012043.
196. *Ионин, А. А.* Абляция поверхности материалов под действием ультракоротких лазерных импульсов [Текст] / А. А. Ионин, С. И. Кудряшов, А. А. Самохин // УФН. — 2017. — Т. 187. — С. 159—172.
197. Определение важнейших параметров металла, облученного ультракоротким лазерным импульсом [Текст] / Н. А. Иногамов [и др.] // Письма в ЖЭТФ. — 2023. — Т. 117, № 2. — С. 107—114.
198. Упругопластические и полиморфные превращения в пленках железа при нагрузке ультракороткими лазерными ударными волнами [Текст] / С. А. Мурзов [и др.] // ЖЭТФ. — 2022. — Т. 161, № 3. — С. 315—330.
199. *Anisimov, S. I.* Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses [Текст] / S. I. Anisimov, B. L. Kapeliovich, T. L. Perelman // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 1974.
200. J. Appl. Phys. [Текст] / E. Cuenca [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2020. — Vol. 128, no. 24. — P. 244903.
201. Ударно-волновые явления в конденсированных средах [Текст] / Г. И. Канель [и др.]. — М. : Янус-К, 1996. — С. 408.
202. *Kelchner, C. L.* Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation [Текст] / C. L. Kelchner, S. J. Plimpton, J. C. Hamilton // Physical Review B. — 1998. — Vol. 58. — P. 11085.

203. *Уббеллоде, А. Р.* Расплавленное состояние вещества / Пер. с англ. [Текст] / А. Р. Уббеллоде. — М. : Metallurgy, 1982. — С. 376.
204. Экспериментальное и теоретическое исследование модификации структуры алюминия воздействием лазерного импульса фемтосекундной длительности [Текст] / Е. А. Перов [и др.] // Сборник XIII Международной конференции "Фазовые превращения и прочность кристаллов"(ФППК-2024), памяти академика Г.В. Курдюмова. — г. Черноголовка, Россия, 2024. — С. 103. — 28 октября – 1 ноября 2024 г.
205. Compression of lithium fluoride to 92 GPa [Текст] / Н. Dong [et al.] // High Pressure Research. — 2014. — Vol. 34. — P. 39—48.
206. *Smirnov, N. A.* Ab initio calculations of the thermodynamic properties of LiF crystal [Текст] / N. A. Smirnov // Physical Review B. — 2011. — Vol. 83. — P. 014109.
207. *Жаховский, В. В.* Формирование цилиндрической полости в кристалле LiF рентгеновским импульсом [Текст] / В. В. Жаховский, С. А. Григорьев, Е. А. Перов // XXIII Всероссийская конференция "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений". — пос. Вишневка, пансионат МГУ "Буревестник", 09.2024.
208. Damage threshold of LiF crystal irradiated by femtosecond hard XFEL pulse sequence [Текст] / S. Makarov [et al.] // Optics Express. — 2023. — Vol. 31.
209. *Ya., P. V.* Laser technologies of materials processing: modern problems of fundamental research and applied developments [Текст] / P. V. Ya. — Moscow : Physmatlit, 2009.
210. *Grigoryants, A. G.* Laser Precision Microprocessing of Materials [Текст] / A. G. Grigoryants, M. A. Kazaryan, N. A. Lyabin. — Boca Raton : CRC Press, 2019.
211. *Khomich, V. Y.* Mechanisms of direct laser nanostructuring of materials [Текст] / V. Y. Khomich, V. A. Shmakov // Physics-Uspekhi. — 2015. — May. — Vol. 58, no. 5. — P. 455.
212. *Novikov, I.* International experience in research and application of the technological process of laser shockpeening of metals (review) [Текст] / I. Novikov, Y. Nozhnitsky, S. Shibaev // Aviation Engines. — 2022. — Vol. 2(15). — P. 59—82.

- 213. Relief formation on copper polycrystal by laser thermal cycling [Текст] / E. A. Perov [et al.] // Proceedings of the International Conference on Intense Electron and Ion Fluxes and Their Applications (IIEFM). — 2025.
- 214. Evaluation of top, angle, and side cleaned FIB samples for TEM analysis [Текст] / E. Montoya [и др.] // Microscopy Research and Technique. — 2007. — Т. 70, № 12. — С. 1060—1071.