

УДК 548.0:621.375.828

Исследование влияния лазерной абляции на строение ОЦК-кристалла при помощи молекулярно-динамического моделирования*

А.Н. Гостевская¹, А.В. Маркидонов^{1,2}, В.Е. Громов¹, М.Д. Старостенков³, Д.А. Лубяной⁴

¹Сибирский государственный индустриальный университет (Новокузнецк, Россия)

²Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета (Новокузнецк, Россия)

³Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Барнаул, Россия)

⁴Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева (Прокопьевск, Россия)

Study of the Effect of Laser Ablation on the Structure of a BCC Crystal Using Molecular Dynamics Simulation

A.N. Gostevskaya¹, A.V. Markidonov^{1,2}, V.E. Gromov¹, M.D. Starostenkov³, D.A. Lubanoy⁴

¹Siberian State Industrial University (Novokuznetsk, Russia)

²Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute of Kemerovo State University (Novokuznetsk, Russia)

³Polzunov Altai State Technical University (Barnaul, Russia)

⁴Prokopyevsk Branch of T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University (Prokopyevsk, Russia)

Внешнее высокоэнергетическое воздействие на поверхность твердого тела, например, ультракороткими сверхмощными лазерными импульсами может приводить к фазовым переходам, в результате которых структура поверхности претерпевает кардинальные изменения. В представленной работе излагаются результаты молекулярно-динамического моделирования изменения поверхностного слоя расчетной ячейки при кратковременном высокоэнергетическом воздействии. Построенная и описанная в работе модель, температура расчетной ячейки в которой распределяется в соответствии с решением линейной задачи теплопроводности, позволила выявить нарушение сплошности поверхностного слоя, заключающееся в локализации избыточного свободного объема в виде группы сферических пор. Размеры этих несовершенств, а также длительность их существования имеют отличия при моделировании разной плотности энергии лазерного излучения. Дальнейшее исследование позволило выявить условия, при которых поры остаются стабильными на протяжении всего времени моделирования, а также выявить связь между кристаллографической ориентацией межфазной границы «твердое тело — жидкость» и размерами образуемых пор.

An external high-energy impact on the surface of a solid, for example, by ultrashort ultra-high-power laser pulses, can lead to phase transitions, as a result of which the surface structure undergoes cardinal changes. This paper presents the results of molecular dynamics modeling of changes in the surface layer of the computational cell under a short-term high-energy impact. The model constructed and described in the paper, in which the temperature of the computational cell is distributed in accordance with the solution of the linear problem of heat conduction, made it possible to reveal a violation of the continuity of the surface layer, which consists in the localization of excess free volume in the form of a group of spherical pores. The sizes of these imperfections, as well as the duration of their existence, have differences when modeling different energy densities of laser radiation. Further research made it possible to reveal the conditions under which the pores remain stable throughout the entire simulation time, as well as to reveal the relationship between the crystallographic orientation of the "solid — liquid" interface and the sizes of the formed pores.

*Работа выполнена в рамках государственного задания: 0809-2021-0013.

Ключевые слова: кристалл, модель, температура, плавление, пора, поверхность, межфазная граница.

Key words: crystal, model, temperature, melting, pore, surface, interface.

DOI: 10.14258/izvasu(2022)4-02

Введение

Короткоимпульсная лазерная абляция металлических мишеней лежит в основе многих практических приложений, начиная от высокоточной резки и сверления [1–3], заканчивая наноструктурированием поверхности [4–6] и генерацией наночастиц с узким распределением по размерам и хорошо контролируемым композициям [7–10]. Оптимизации параметров лазерной обработки в текущих приложениях и появлению новых методов, основанных на лазерной абляции, способствовали вычислительные усилия, направленные на понимание каскада неравновесных процессов, запускаемых быстрым выделением лазерной энергии и ответственных за выброс материала [11–14]. Большая роль компьютерного моделирования в развитии теоретического понимания лазерно-индуцированных процессов и развитии лазерных приложений определяется сложностью реакции материала на лазерное возбуждение, которая включает в себя переходную модификацию свойств материала при сильном электронном возбуждении, фотомеханические эффекты, обусловленные релаксацией лазерно-индуцированных напряжений, быстрые неравновесные фазовые превращения, происходящие в условиях быстрого ввода лазерной энергии и расширения материала, ионизации и плазмообразования, а также сложные процессы, происходящие в расширяющемся абляционном факеле. Вычислительное описание этого разнообразного диапазона процессов является сложной задачей и требует сочетания различных вычислительных подходов, начиная от расчетов электронной структуры на основе квантовой механики [11–15] и заканчивая классическим моделированием молекулярной динамики [16–18], а также кинетическим и гидродинамическим моделированием на уровне континуума [19–23].

1. Методика исследования

В рамках работы проводилось исследование изменения структуры, которое наблюдается в метал-

лах при влиянии высоких температур при построении моделей методом молекулярной динамики. В ходе проведения исследования была построена расчетная ячейка в виде параллелепипеда прямоугольной формы со сторонами $15a_0 \times 100a_0 \times 10a_0$, где a_0 — это равновесный параметр решетки. Количество частиц, которые были смоделированы, составляют 48 000 ед. В работе для направлений по X и Z применяются периодические граничные условия, для оси Y свободные. Расчетная ячейка подразделялась на слои по оси Y (10 слоев) с определенной температурой, которая уменьшалась при углублении в глубь моделируемого кристалла. Применение модели теплопроводности для представления распространения тепла возможно в период достижения теплового равновесия между электронами и фононами. При применении модели полубесконечного твердого тела возможно получение решения тепловой задачи за счет интегральных преобразований [24]. Определение температуры по глубине металла можно обусловить как функцию координат (при $t < \tau$) при постоянных физических параметрах, которые рассчитываются по формуле:

$$T_c(y, t) = \frac{2Aq}{\lambda} \sqrt{at} \cdot \text{ierfc} \left(\frac{y}{2\sqrt{at}} \right), \tag{1}$$

где A — поглощательная способность, q — плотность энергии, λ — теплопроводность, a — температуропроводность, τ — длительность воздействия.

Функция $\text{ierfc}(x)$, входящая в уравнение (1), выражается через интеграл от функции интеграла вероятности:

$$\text{ierfc}(x) = \int_x^\infty \text{irfc}(x) dx. \tag{2}$$

После завершения влияния лазером ($t > \tau$) идет стадия охлаждения, когда распределение температуры высчитывается как:

$$T_c(y, t) = \frac{2Aq}{\lambda} \left[\sqrt{at} \cdot \text{ierfc} \left(\frac{y}{2\sqrt{at}} \right) - \sqrt{a(t-\tau)} \cdot \text{ierfc} \left(\frac{y}{2\sqrt{a(t-\tau)}} \right) \right]. \tag{3}$$

Температура определялась по параметрам, приведенным в таблице.

Физические параметры, используемые при расчетах

A	$q, \frac{\text{МВт}}{\text{см}^2}$	$\lambda, \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$	$a, \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$	$\tau, \text{с}$
0.68	3.5...6.5	80	$2.621 \cdot 10^{-5}$	$10 \cdot 10^{-12}$

Неравномерный нагрев моделируемого металла может повлиять на образование зоны сжатия около поверхности, которая уходит вглубь, как волны давления, и при достижении ею противоположной границы при использовании свободных граничных условий способствует эжективированию частиц. Для избежания такого явления на участках, находящихся более удаленно от поверхности моделируемого образца, с помощью процесса термостатирования поддерживалась постоянная температура $T=300\text{ K}$ и применялись вязкие граничные условия.

2. Результаты и обсуждения

Моделирование проводилось в два этапа. Первый этап — воздействие на расчетную ячейку путем нагрева моделируемого образца в течение 10 пс моделируемого времени в соответствии с формулой (1). Второй этап — охлаждение модели длительностью 20 пс. Изменение температуры моделируемой кристаллической ячейки решетки представлено на рисунке 1.

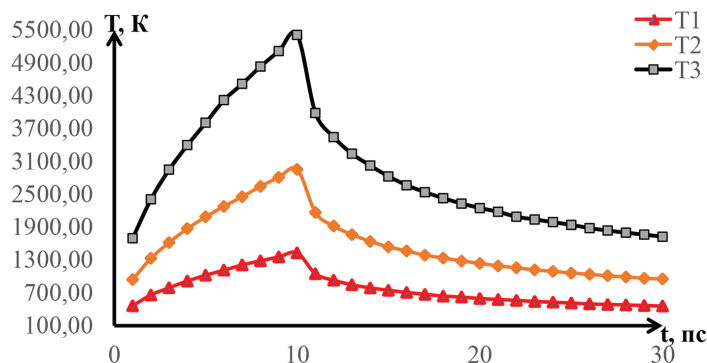


Рис. 1. Изменение температуры моделируемого кристалла в различные промежутки времени

Из графика, приведенного на рисунке 1, можно увидеть, что при достижении температуры плавления металла идет фазовый переход, во время которого происходит образование границы твердой и жидкой фазы при более низких температурах. При дальнейшем повышении температуры происходит отслоение атомов, образуя область частиц испарения. При охлаждении

выявляется зависимость областей разряжения, образованных при нагреве моделируемого металла, представленного на рисунке 2а, слияние частиц и появление пор сферической формы изображены на рисунке 2б, в, г. Более подробно образование пор на наномасштабном уровне под влиянием лазерной абляции на поверхность образцов можно увидеть в работе [25].

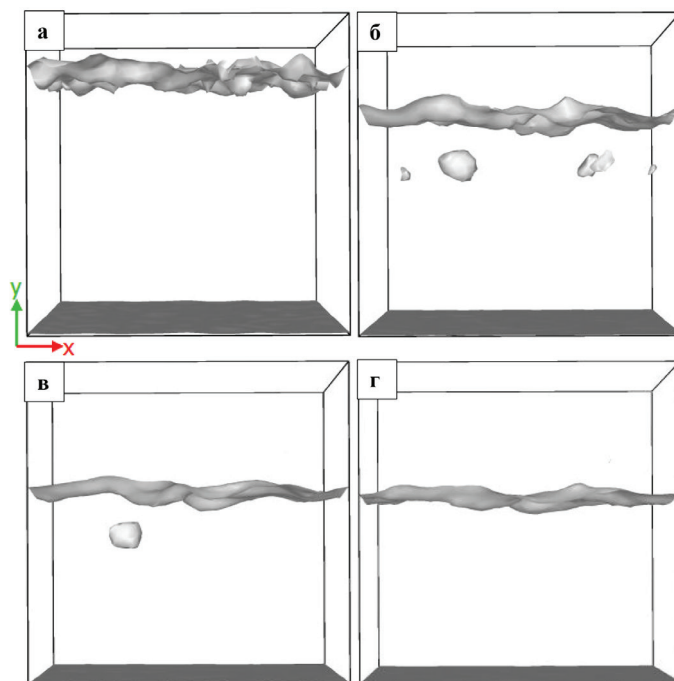


Рис. 2. Изображение поверхностного слоя расчетной ячейки через 10 пс (а), 15 пс (б), 19 пс (в) и 22 пс (г) времени моделирования при плотности энергии лазера $q=3.5\text{ МВт/см}^2$

Для определения пустот и дальнейшего оценивания площади (S) поверхности применялся алгоритм [26], который базируется на основе метода альфа-формы Эдельсбруннера и Мюкке, где геометрические точки связываются поверхностной сеткой. Определение пустот в объеме металла происходит за счет подсчета радиуса виртуальной сферы. Радиус должен превышать расстояние между атомами. В данной работе радиус виртуальной сферы равнялся значению параметра решетки.

Изучение построенной модели и проведенных вычислений позволило наблюдать структурные изменения в поверхностном слое моделируемого образца расчетной ячейки. Для проведения оценки подобных

измерений применяется коэффициент пористости, который высчитывается через плотность кристаллической и аморфной структуры. В случае проведения нашего исследования коэффициент пористости θ вычислялся как доля свободной поверхности, появляющейся за счет пор в свободном поверхностном слое, определяемом в кристаллической решетке. На рисунке 3 можно наблюдать изменения коэффициента пористости со временем.

Из приведенного графика на рисунке 3 видно, что пустоты, образующиеся в расчетной ячейке, растворяются. Более подробное изучение таких дефектов планируется в дальнейших работах.

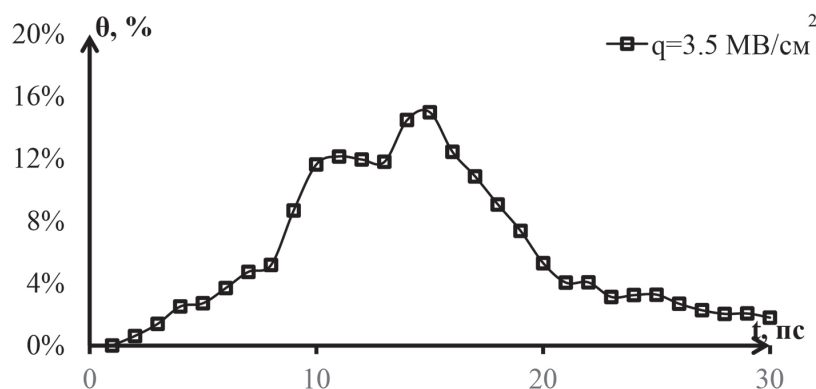


Рис. 3. Изменение коэффициента пористости со временем

Одним из основных источников напряжения металла являться ударная волна [26–28]. В данной работе критическое состояние кристаллической ячейки связано с неравномерным нагревом и образованием особой границы раздела после напряжений с величиной, пропорциональной свободной поверхностной энергии γ . Энергия γ границы раздела кристалл — расплав анизотропна и зависит от ориентации кристаллической решетки твердого тела [29]. Следует отметить, что, исходя из анализа проведенной ав-

торами работы [30], было определено, что для объемно-центрированной кристаллической структуры анизотропия выражается меньше чем в ГЦК.

В данном исследовании было приведено моделирование кристаллической ячейки, в котором присутствуют границы раздела. Установлено, что при таких условиях размер и время существования пор изменяется, хотя температура практически остается неизменной.

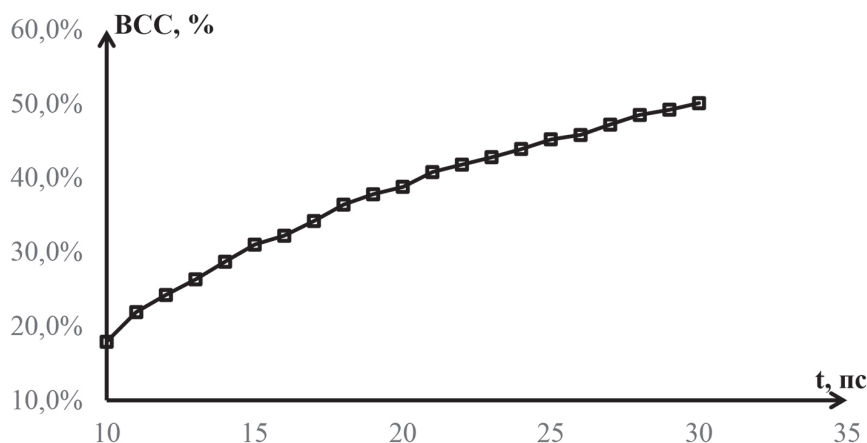


Рис. 4. Изменение доли атомов с локальным ОЦК окружением на стадиях охлаждения моделируемого ОЦК-кристалла

На рисунке 4 приведен график изменения доли атомов в ОЦК-кристалле при омоложении. Было выявлено, что доля атомов металла со строением ОЦК в поверхностных слоях возрастает при построении модели межфазовой границы во время охлаждения. Чтобы провести оценку атомов металла со строением ОЦК, применялся структурный анализ, который состоит в идентификации окружения частиц с применением связей Экланда-Джонса и метода углов [31].

Заключение

Во время исследования при помощи метода молекулярной динамики была построена модель для изучения влияния процесса лазерной абляции на образование пор. Проведенное исследование показало, что в слоях на поверхности по завершении воздействия лазера свободный объем формируется в группе пор, которые растворяются при усадке. Одним из способов стабилизации полученных пор является повышение скорости охлаждения кристаллической ячейки.

Библиографический список

1. Shih C.Y., Wu C., Shugaev M.V., Zhigilei L.V. Atomistic modeling of nanoparticle generation in short pulse laser ablation of thin metal films in water // *Journal of Colloid and Interface Science*. 2017. Vol. 489.
2. Kubecek V., Couderc V., Bourliaguet B., Louradour F., Barthelemy A. 4-W and 23-ps pulses from a lamp-pumped Nd:YAG laser passively mode-locked by polarization switching in a KTP crystal // *Applied Physics B*. 1999. Vol. 69.
3. Lu J., Wu X., Ruan S., Guo D., Du C., Liang X., Wu Z. The Femtosecond Laser Ablation on Ultrafine-Grained Copper // *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2018. Vol. 49.
4. Smirnov N.A., Kudryashov S.I., Danilov P.A., Rudenko A.A., Gakovic B., Milovanović D., Ionin A.A., Nastulyavichus A.A., Umanskaya S.F. Microprocessing of a steel surface by single pulses of variable width // *Laser Physics Letters*. 2019. Vol. 16. № 5. 056002.
5. Abou-Saleh A., Karim E.T., Maurice C., Reynaud S., Pigeon F., Garrelie F., Zhigilei L.V., Colombier J.P. Spallation-induced roughness promoting high spatial frequency nanostructure formation on Cr // *Applied Physics A*. 2018. Vol. 124.
6. Gallais L., Bergeret E., Wang B., Guerin M., Benevent E. Ultrafast laser ablation of metal films on flexible substrates // *Applied Physics A*. 2014. Vol. 115.
7. Bai Q.S., Li Y.H., Shen R.Q., Zhang K., Miao X.X., Zhang F.H. Molecular simulation and ablation property on the laser-induced metal surface // *Proc. SPIE 11063, Pacific Rim Laser Damage 2019: Optical Materials for High-Power Lasers*. 2019. 1106306.
8. Terasawa E., Shibuya T., Satoh D., Moriai Y., Ogawa H., Tanaka M., Kuroda R., Kobayashi Y., Sakaue K., Washio M. Pulse duration dependence of ablation threshold for fused silica in the visible femtosecond regime // *Applied Physics A*. 2020. Vol. 126.
9. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO — the Open Visualization Tool // *Modelling and Simulation Materials Science and Engineering*. 2010. Vol. 18. 015012.
10. Miotello A., Patel N. Nano-cluster Assembled Films, Produced by Pulsed Laser Deposition, for Catalysis and the Photocatalysis // *Springer Series in Materials Science*. 2014. Vol. 191.
11. Рыкалкин Н.Н., Углов А.А., Зуев И.В., Кокора А.Н. Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов: справочник. М. 1985.
12. Petrov Yu. V., Migdal K.P., Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V. Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse // *Applied Physics B*. 2015. Vol. 119.
13. Murzin S.P., Prokofiev A.B., Safin A.I. Study of Cu-Zn alloy objects vibration characteristics during laser-induced nanopores formation // *Procedia Engineering*. 2017. Vol. 176.
14. Grigoriev F.V., Zhupanov V.P., Chesnokov D.A., Sulimov V.B., Tikhonravov A.V. Molecular Dynamics Simulation of Heat Transfer and Stresses in Thin Films Caused by a Short Laser Pulse // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2021. Vol. 42.
15. Karim E.T., Wu Ch., Zhigilei L.V. Molecular Dynamics Simulations of Laser-Materials Interactions: General and Material-Specific Mechanisms of Material Removal and Generation of Crystal Defects. 2014. Vol. 195.
16. Malinskii T.V., Rogalin V.E., Yamshchikov V.A. Plastic deformation of copper and its alloys under the action of nanosecond UV laser pulse // *Physics of Metals and Metallography*. 2022. Vol. 123.
17. Yin F., Ye X., Yao H., Wei P., Wang X., Cong J., Tong Y. Surface forming criteria of Ti-6AL-4V titanium alloy under laser loading // *Applied Sciences*. 2021. Vol. 11. 5406.
18. Roth J., Kraub A., Lotze J., Trebin H.-R. Simulation of laser ablation in aluminum: the effectivity of double pulses // *Applied Physics A*. 2014. Vol. 117.
19. Gurevich E.L., Levy Y., Gurevich S.V., Bulgakova N.M. Role of the temperature dynamics in formation of nanopatterns upon single femtosecond laser pulses on gold // *Physical Review B*. 2017. Vol. 95. № 5. 054305.
20. Povarnitsyn M.E., Levashov P.R. Simulation of multi-pulse laser ablation for laser-induced breakdown spectroscopy applications // *Applied Physics A*. 2019. Vol. 125.
21. Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Khokhlov V.A. Jet formation in spallation of metal film from substrate under

action of femtosecond laser pulse // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2015. Vol. 120.

22. Rebegea S.A., Thomas K., Chawla V., Michler J., Kong M.Ch. Laser ablation of a Cu–Al–Ni combinatorial thin film library: analysis of crater morphology and geometry // Applied Physics A. 2016. Vol. 122.

23. Buelna X., Popov E., Eloranta J. Dynamics of Laser Ablation in Superfluid ^4He // Journal of Low Temperature Physics. 2017. Vol.186.

24. XMD — Molecular Dynamics for Metals and Ceramics. <http://xmd.sourceforge.net/about.html> (дата обращения: 03.05.2022).

25. Ионин А.А., Кудряшов С.И., Самохин А.А. Абляция поверхности материалов под действием ультракоротких лазерных импульсов // Успехи физических наук. 2017. Т. 187. № 2.

26. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д. О возможности гомогенного зарождения поры в зернограничной области под воздействием ударных послекаскадных волн //

Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов. 2016. № 3.

27. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П. Влияние послекаскадных ударных волн на процессы укрупнения вакансионных пор // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т. 9. № 4–2.

28. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Захаров П.В. Рост малых вакансионных скоплений, инициированный послекаскадными ударными волнами // Письма о материалах. 2012. Т. 2. Вып. 2.

29. Morris J.R., Song X. The anisotropic free energy of the Lennard-Jones crystal-melt interface // Journal of Chemical Physics. 2003. Vol. 119. № 7.

30. Sun D.Y., Asta M., Hoyt J.J., Mendeleev M.I., Srolovitz D.J. Crystal-melt interfacial free energies in metals: FCC versus bcc // Physical Review B. 2004. Vol. 69.

31. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // Physical Review B. 2006. Vol. 73. № 5.