

УДК 53.072: 544.171.44

## Влияние высоких температур, возникающих при лазерном воздействии, на изменение строения ОЦК-кристалла в молекулярно-динамической модели\*

А.Н. Гостевская<sup>1</sup>, А.В. Маркидонов<sup>1, 2</sup>, М.Д. Старостенков<sup>3</sup>, В.К. Дробышев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Сибирский государственный индустриальный университет (Новокузнецк, Россия)

<sup>2</sup>Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета (Новокузнецк, Россия)

<sup>3</sup>Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Барнаул, Россия)

## A Molecular Dynamics Model for Studying the Influence of High Temperatures under Laser Irradiation on Changes in a BCC Crystal Structure

A.N. Gostevskaya<sup>1</sup>, A.V. Markidonov<sup>1, 2</sup>, M.D. Starostenkov<sup>3</sup>, V.K. Drobyshev<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Siberian State Industrial University (Novokuznetsk, Russia)

<sup>2</sup>Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute of Kemerovo State University (Novokuznetsk, Russia)

<sup>3</sup>Polzunov Altai State Technical University (Barnaul, Russia)

В данной работе представлены результаты влияния высокотемпературного воздействия на изменение структуры кристаллов ОЦК. Интерес к исследованию обусловлен тем, что процессы, происходящие в поверхностном слое, пребывающем в жидком состоянии, в последующем окажут свое влияние при его кристаллизации и, как следствие, скажутся на различных физических и геометрических характеристиках поверхности материала в целом. Представленная модель дает возможность наблюдать несовершенства структуры, которые представляют собой появление пор на поверхностных слоях металла. 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.

**Ключевые слова:** ОЦК-кристалл, молекулярно-динамическая модель, межфазная граница, пористость.

DOI: 10.14258/izvasu(2023)4-03

The paper discusses the changes in the structures of BCC crystals subjected to high-temperature exposure. The interest in the study is explained by the processes occurring in the liquid surface layer and their subsequent impact on layer crystallization. They will further affect various physical and geometric characteristics of the material surface as a whole. The presented model helps observe the imperfections of the structure caused by the appearance of pores on the surface layers of the metal. The computational cell temperature in the designed model is distributed according to the solution of the linear problem of heat conduction. The model allows for revealing a surface layer continuity violation when the excess free volume localizes in the form of a group of spherical pores. The dimensions of such imperfections, as well as the duration of their existence, differ when modeling different laser radiation energy densities. Further research reveals the conditions for the pores to remain stable throughout the entire simulation time, as well as the relationship between the crystallographic orientation of the “solid-liquid” interphase boundary and the sizes of the formed pores.

**Keywords:** bcc crystal, molecular dynamics model, interphase boundary, porosity.

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

**Введение**

Лазерная абляция, инициируемая ультракороткими лазерными импульсами, открыла новую область изучения, в которой было проведено много исследований из-за особенностей явлений, вызванных высокоэнергетическими импульсами. Облучение лазерными ультракороткими импульсами вызывает неравновесное состояние. К настоящему времени известны специфические явления, наблюдаемые в неравновесном состоянии. Например, облучение сверхкоротким импульсным лазером поверхности твердого тела вызывает сверхбыстрое структурное изменение [1, 2], когерентный фон [3], горячую плазму, заключенную внутри холодного твердого тела, а также испускание атомов / ионов с чрезмерно высокой энергией [4–7].

Лазерное облучение поверхности металла переводит электронную подсистему из основного состояния в возбужденное за счет поглощения одиночных фотонов или фотонов более высокого порядка. Мощные лазерные импульсы воздействуют на материалы, приводя к плавлению и движению расплава при резких градиентах температуры и релаксации давления с дальнейшим отделением материала от поверхности (абляцией), что используется в различных областях.

Лазерная абляция твердых тел используется для прецизионной обработки материалов, увеличения интенсивности спектральных линий в спектроскопии лазерно-индуцированного пробоя [8–10], для исследования динамики факела [11], распределения наночастиц по размерам в вакууме [12, 13] и жидкостях [14, 15], а также модификации оптических свойств [16, 17]. В течение последнего десятилетия численное моделирование лазерной абляции твердых материалов было сосредоточено на понимании механизмов, отвечающих за процесс абляции [18, 19] и динамики облученных лазером наночастиц [20, 21]. Лазерная абляция конденсированных сред приводит к различным фазовым переходам, которые можно рассматривать с помощью различных теоретических методов, включая континуальный, кинетический, молекулярно-динамический (МД) и другие подходы [22, 23].

Целью исследования является моделирование процессов облучения ОЦК-кристалла и выявление особенностей структурных изменений поверхностных слоев кристалла при высокотемпературном воздействии.

**1. Методика исследования**

Исследование влияния лазерной абляции на структуру кристаллов ОЦК с использованием моделиро-

вания молекулярной динамики. Построенная расчетная ячейка представляет собой прямоугольный параллелепипед со сторонами  $20 \cdot a_0 : 100 \cdot a_0 : 12 \cdot a_0$ , где  $a_0$  — параметр решетки, который для железа составляет  $2.866 \text{ \AA}$ . В исследуемой модели было построено 48 000 ед. частиц. Использовались потенциалы, построенные методом погруженного атома, как функция взаимодействий между частицами [24]. Для построения модели и проведения расчетов использовался пакет XMD [25], который предназначен для моделирования молекулярной динамики. Визуализация построенной модели выполнялась с использованием пакета OVITO [26].

Использование модели теплопроводности для представления распространения тепла возможно, когда между электронами и фононами достигается тепловое равновесие. Применяя модель бесконечных твердых тел, можно решить тепловую задачу с помощью интегрального преобразования [27]. Определение температуры по глубине металла можно выполнить как функцию координат (при  $t < \tau$ ) при постоянных физических параметрах, которые рассчитываются по формуле

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

где  $T$  — температура,  $y$  — координата,  $t$  — текущее время,  $A$  — безразмерная величина, показывающая, какую часть излучения в интервале длин волн от  $\lambda$  до  $d\lambda$  на единицу поверхности тела в единицу времени тело поглощает,  $q$  — плотность энергии,  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности,  $a$  — температуропроводность — параметр, характеризующий скорость передачи температуры в материале,  $\tau$  — длительность воздействия.

Для расчета функции  $\text{ierfc}(x)$  используется интегральное уравнение вероятности:

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

При окончании воздействия лазерной абляции, когда текущее время больше длительности воздействия, начинается процесс охлаждения:

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

Для расчета температуры применялись следующие показатели:  $A=0.68$ ;  $q=3.5\text{--}6.0 \text{ МВ/см}^2$ ;  $\lambda=80 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$ ;  $a=2.621 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$ ;  $\tau=10 \text{ пс}$ .

## 2. Результаты и обсуждения

Моделирование кристаллической решетки ОЦК-кристалла проводилось в 2 стадии. Первым этапом проводился нагрев моделируемого металла в течение 10 пс. Дальнейшее моделирование происходило при охлаждении ячейки, которое длилось в течение 20 пс. Изменение температуры получен-

ных моделей представлено на рисунке 1. Как можно видеть на рисунке 1, максимальная температура ОЦК-кристалла достигается при плотности энергии 6,0 МВт/см<sup>2</sup>, из чего можно заключить, что при данном параметре будут наблюдаться существенные изменения в строении кристаллической решетки.

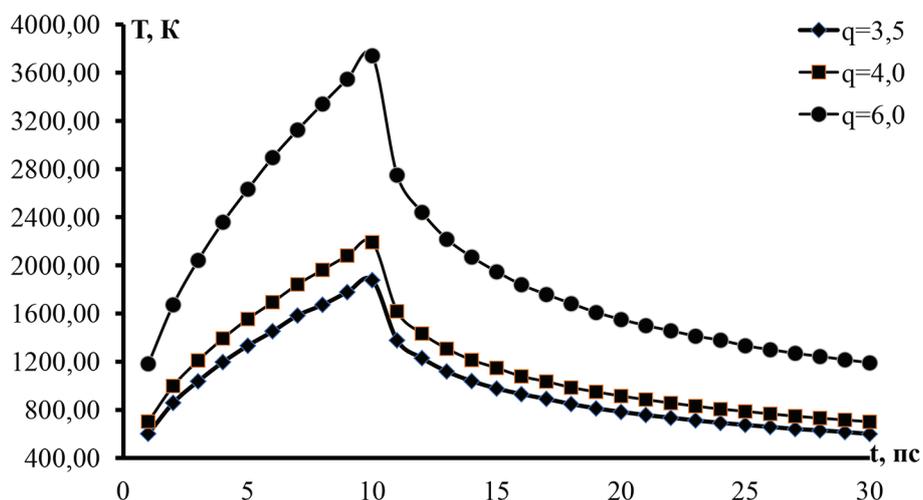


Рис. 1. Динамика температуры при различных плотностях энергии в процессе моделирования

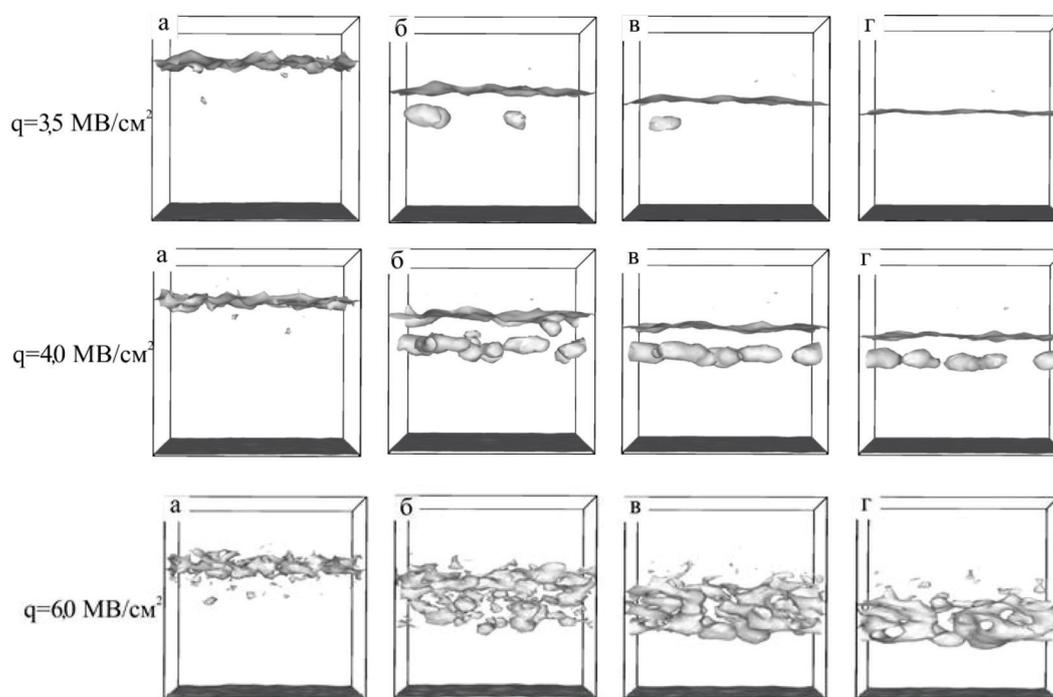


Рис. 2. Результаты моделирования, визуализированные при помощи программы OVITO, через 10 пс (а), 15 пс (б), 20 пс (в) и 25 пс (г)

На рисунке 2 представлены изображения поверхностного слоя ОЦК-кристалла при различных плотностях энергии через каждые 5 пс времени.

Из представленных результатов на рисунке 2 видно, что поры в строении металла наблюдаются при плотности энергии  $q=3.5$  МВт/см<sup>2</sup> и больше. Следует отметить, что поры остаются и после процесса охлаждения металла при  $q=4.0-6.0$  МВт/см<sup>2</sup>.

При расчете и моделировании различных плотностей энергии излучения путем изменения параметра  $q$  в поверхностном слое расчетной ячейки наблю-

даются различные структурные изменения. Оценка таких структурных преобразований производится за счет коэффициента пористости, представляемого как плотность аморфного и кристаллического строения. В нашем случае можно более наглядно увидеть коэффициент пористости, который определяется как доля свободной поверхности, создаваемая свободными поверхностными порами в расчетной ячейке. На рисунке 3 представлен график изменения коэффициента пористости в процессе моделирования при различных значениях плотности энергии.

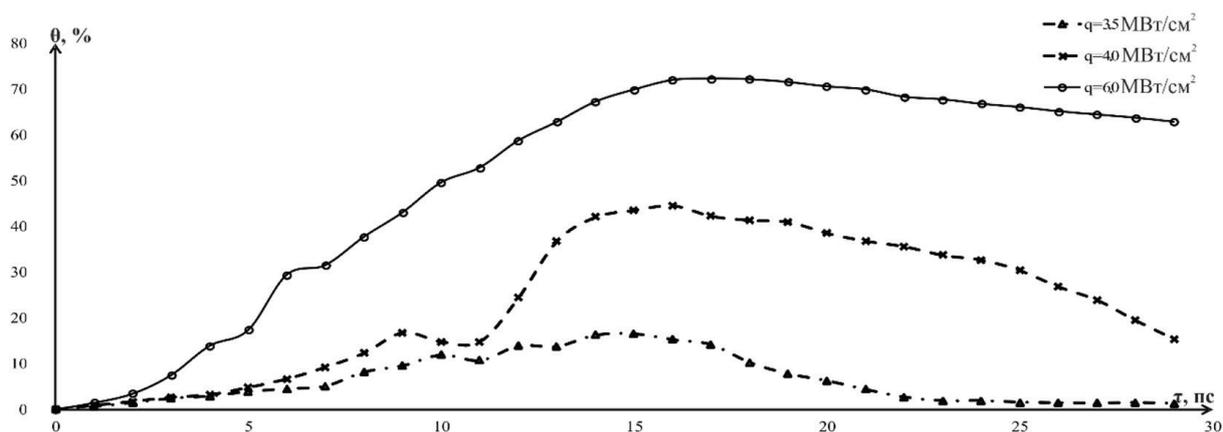


Рис. 3. Динамика температуры при различных плотностях энергии в процессе моделирования

Как следует из графика на рисунке 3, при  $q \approx 3,5$  МВт/см<sup>2</sup> пустоты, формирующиеся в ячейке, в процессе моделирования растворяются. При повышении плотности энергии в аморфной области образуются протяженные пустоты, которые являются стабильными в процессе всего моделирования. Данные пустоты более наглядно можно наблюдать при плотностях

энергии  $q \leq 3,5$  МВт/см<sup>2</sup>. В проведенном исследовании было установлено, что критические значения кристаллической ячейки достигаются из-за неравномерного нагрева.

Анализ полученных результатов показал, что в построенной модели ОЦК-кристалла размеры и время существования пор меняются.

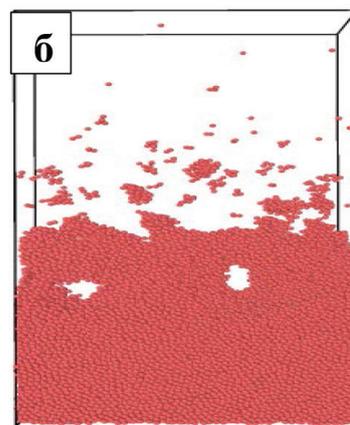
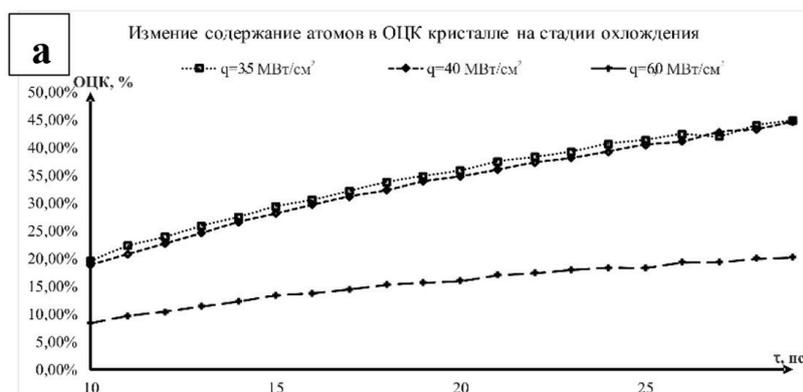


Рис. 4. Изменение содержания атомов в моделируемой объемно-центрированной кубической расчетной ячейке (а); структура ОЦК-кристалла при плотности энергии 6,0 МВт/см<sup>2</sup> (б)

Представленные графики на рисунке 4 показывают, что изменение доли частиц локального окружения ОЦК-кристалла в построенной модели возрастает во время охлаждения. В наибольшей степени влияние границы начинает проявляться в тот момент, когда она в процессе своего смещения на стадии охлаждения расчетной ячейки приближается к пустотам. В соответствии с этим при моделировании межфазной границы формируются наиболее крупные поры, но так как скорость охлаждения различна, то не во всех случаях они растворяются. Как видно из графика, представленного на рисунке 4а, наименьшая доля атомов ОЦК-кристалла наблюдается при плотности энергии 6,0 МВт/см<sup>2</sup>, где поры в структуре не исчезают на протяжении всего времени охлаждения (рис. 4б).

### Заключение

Высокоэнергетическое воздействие на поверхностные слои металлов на сегодняшний день изучаются и исследуются различными методами. Нами было проведено исследование методом молекулярно-динамического моделирования процессов изменения строения поверхностного слоя ОЦК-кристалла в результате воздействия лазерной абляции. В построенных моделях было установлено, что поры образуются в структуре при всех значениях плотности энергии  $q \geq 3,5$  МВт/см<sup>2</sup> и остаются в конце моделирования. Поры можно стабилизировать, увеличив скорость охлаждения моделируемой ячейки.

## Библиографический список

1. Qasemian A., Qanbarian M., Arab B. Molecular dynamics simulation on explosive boiling of thin liquid argon films on cone-shaped Al-Cu-based nanostructures // *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. 2021. Vol. 145. <http://doi.org/10.1007/s10973-020-09748-y>
2. Daraszewicz S.L., Giret Y., Naruse N., Murooka Y., Yang J., Duffy D. M., Shluger A.L., Tanimura K. Structural dynamics of laser-irradiated gold nanofilms // *Physical Review B*. 2013. Vol. 88. 184101. <http://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.184101>
3. Hase M., Miyamoto Y. and Tominaga J. Ultrafast dephasing of coherent optical phonons in atomically controlled GeTe/Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> superlattices // *Physical Review B*. 2009. Vol. 79. 174112. <http://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.174112>
4. Miyasaka Y., Hashida M., Ikuta Y., Otani K., Tokita S. and Sakabe S. Nonthermal emission of energetic ions from a metal surface irradiated by extremely low-fluence femtosecond laser pulses // *Physical Review B*. 2012. Vol. 86. 075431. <http://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.075431>
5. Hashida M., Namba S., Okamuro K., Tokita S. and Sakabe S. Ion emission from a metal surface through a multiphoton process and optical field ionization // *Physical Review B*. 2010. Vol. 81. 115442. Doi: <http://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.115442>
6. Dachraoui H. and Husinsky W. Fast electronic and thermal processes in femtosecond laser ablation of Au // *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 89. 104102. <https://doi.org/10.1063/1.2338540>
7. Dachraoui H., Husinsky W. and Betz G. Ultra-short laser ablation of metals and semiconductors: evidence of ultra-fast Coulomb explosion // *Applied Physics Letters*, A. 2006. Vol. 83. <https://doi.org/10.1007/s00339-006-3499-y>
8. Semerok A. and Dutouquet C. Ultrashort double pulse laser ablation of metals // *Thin Solid Films*. 2004. Vol. 453–454. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2003.11.115>
9. Scuderi D., Albert O., Moreau D., Pronko P.P., Etchepare J. Interaction of a laser-produced plume with a second time delayed femtosecond pulse // *Applied Physics Letters*. 2005. Vol. 86. 071502. <https://doi.org/10.1063/1.1864242>
10. Piñon V., Fotakis C., Nicolas G., Anglos D. Double Pulse Laser-Induced Breakdown Spectroscopy with Femtosecond Laser Pulses. // *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*. 2008. Vol. 63. <https://doi.org/10.1016/j.sab.2008.09.004>
11. Mildner J, Sarpe C., Gotte N., Wollenhaupt M. and Baumert T. Emission signal enhancement of laser ablation of metals (aluminum and titanium) by time delayed femtosecond double pulses from femtoseconds to nanoseconds // *Applied Surface Science*. 2014. Vol. 302. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2013.09.137>
12. Donnelly T., Lunney J.G., Amoroso S., Bruzzese R., Wang X. and Ni X. Double pulse ultrafast laser ablation of nickel in vacuum // *Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 106. 013304. <https://doi.org/10.1063/1.3159010>
13. Noël S., Hermann J. Reducing nanoparticles in metal ablation plumes produced by two delayed short laser pulses // *Applied Physics Letters*. 2009. Vol. 94. 053120. <https://doi.org/10.1063/1.3079404>
14. Локтионов Е.Ю., Овчинников А.В., Протасов Ю.С., Ситников Д.С. Газово-плазменные потоки при фемтосекундной лазерной абляции металлов в вакууме // *Теплофизика высоких температур*. 2014. Vol. 52. № 1. <https://doi.org/10.7868/S004036441401013X>
15. Muto H., Miyajima K. and Mafune F. Mechanism of Laser-Induced Size Reduction of Gold Nanoparticles As Studied by Single and Double Laser Pulse Excitation // *The Journal of Physical Chemistry C*. 2008. Vol. 112. <https://doi.org/10.1021/jp711353m>

16. Карпунин В.Т., Маликов М.М., Бородина Т.И., Вальяно Г.Е., Гололобова О.А., Стриканов Д.А. Образование полых микро- и наноструктур диоксида циркония при лазерной абляции металла в жидкости // High Temp. 2015. Vol. 53. № 1. <https://doi.org/10.7868/S004036441501010X>
17. Rohloff M., Das S.K., Höhm S., Grunwald R., Rosenfeld A., Krüger J., & Bonse J. Formation of laser-induced periodic surface structures on fused silica upon multiple cross-polarized double-femtosecond-laser-pulse irradiation sequences // Journal of Applied Physics. 2011. Vol. 110. 014910. <https://doi.org/10.1063/1.3605513>
18. Cherednikov Y., Inogamov N.A., Urbassek H.M. Influence of defects on extreme ultraviolet laser ablation of LiF // Physical Review B. 2013. Vol. 88. 134109. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.134109>
19. Wu C., Christensen M.S., Savolainen J.M., Balling P., Zhigilei L.V. Generation of subsurface voids and a nanocrystalline surface layer in femtosecond laser irradiation of a single-crystal Ag target // Physical Review B. 2015. Vol. 91., 035413. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.035413>
20. Baffou G., Rigneault H. Femtosecond-pulsed optical heating of gold nanoparticles // Physical Review B. 2011. Vol. 84. 035415. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.035415>
21. Ganeev R.A., Hutchison C., Lopez-Quintas I., McGrath, F., Lei D.Y., Castillejo M., Marangos J.P. Ablation of nanoparticles and efficient harmonic generation using a 1-kHz laser // Physical Review A. 2013. Vol. 88. 033803. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.88.033803>
22. Анисимов С.И., Капелиович Б.Л., Перельман Т.Л. Электронная эмиссия с поверхности металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1974. Vol. 66. № 2.
23. Kaganov M.I., Lifshitz I.M., Tanatarov L.V. The electron-lattice relaxation // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 1956. Vol. 31.
24. Mendeleev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Ackland G.J., Sun D.Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // Philosophical magazine. 2003. Vol. 83. <https://doi.org/10.1080/1478643031001613264>
25. XMD — Molecular Dynamics for Metals and Ceramics // Mode of Access: <http://xmd.sourceforge.net/about.html> 30.12.2022.
26. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2009. Vol. 18. 015012. <http://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>
27. Рыкалкин Н.Н., Углов А.А., Зуев И.В., Кокора А.Н. Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов: справочник. М., 1985