УДК 538.911

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В ОЦК-КРИСТАЛЛЕ НА НАНОУРОВНЕ ПРИ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ

А. Н. Гостевская[1], А. В. Маркидонов[2]

[1]**Сибирский государственный индустриальный университет** (654007, Россия, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

[2]**Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета** (654041, Россия, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Циолковского, 23)

Аннотация. При высокотемпературном воздействии происходит изменение структуры металлов и их сплавов. Исследоване влияния высоких температур на изменение строения структуры твердого тела имеет ряд недостатков (изменение свойств и строения материалов). Изучено строения металлов на наноуровне с применением реальных экспериментов затруднительно из-за размеров частиц. Методами компьютерного моделирования изучено воздействие высоких температур на атомные механизмы изменения ОЦК-кристалла. Проведение исследования методом компьютерного моделирования является наиболее рациональным. Проведено атомистическое моделирование абляции структуры, происходящей при облучении материалов фемто- и пикосекудными лазерными импульсами. Для исследования был выбран метод молекулярной динамики. Изучено влияние процесса лазерной абляции на изменение внутреннего строения материалов при помощи компьютерного моделирования (метод молекулярной динамики). Построена модель молекулярной динамики, позволяющая изучить процесс абляции. Оценена доля «выброшенных» частиц в результате нагрева. Определено, что в процессе нагрева и охлаждения системы распределение таких частиц близко к распределению Гаусса.

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование, модель, ОЦК-кристалл, температура, поверхность

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания № 0809-2021-0013.

Для цитиррования: Гостевская А.Н., Маркидонов А.В. Молекулярно-динамическое моделирование структурных изменений в ОЦК-кристалле на наноуровне при лазерной абляции // Вестник Сибирского государственного индустриального университета. 2022. № 2 (40). С. 3 – 9.

MOLECULAR DYNAMIC MODELING STRUCTURAL CHANGES IN THE BCC CRYSTAL AT THE NANOSCALE DURING LASER ABLATION

A. N. Gostevskaya[1], A.V. Markidonov[2]

[1]**Siberian State Industrial University** (42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass 654007, Russian Federation)

[2]**Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute of Kemerovo State University** (654041, Russia, Kemerovo region – Kuzbass, Novokuznetsk, Tsiolkovsky str., 23)

Abstract. When exposed to high temperature, the structure of metals and their alloys changes. The study of the effect of high temperatures on changes in the structure of the structure of a solid has a number of disadvantages (changes in the properties and structure of materials). The study of the structure of metals at the nanoscale using real experiments is difficult because of the particle sizes. The use of computer modeling methods to study and study the effects of high temperatures on the atomic mechanisms of BCC crystal changes allows us to investigate problems that are difficult to solve experimentally. Conducting research by computer modeling is the most rational. Atomistic modeling of structure ablations occurring during irradiation of materials by femto- and picosecond laser pulses has been carried out. The method of molecular dynamics was chosen as the research method. Using a computer model, the influence of the laser ablation process on the change in the internal structure of materials was studied using computer modeling (molecular dynamics method). A model of molecular dynamics is constructed, which allows to study the process of ablation. The proportion of ejected particles as a result of heating is estimated. It is determined that during the heating and cooling of the system, the distribution of such particles is close to normal.

Keywords: molecular dynamic modeling, model, BCC crystal, temperature, surface

Financing. The work was carried out within the framework of the state task No. 0809-2021-0013.

For citation: Gostevskaya A.N., Markidonov A.V. Molecular dynamic modeling of structural changes in a BCC crystal at the nanoscale with laser ablation. *Bulletin of SibSIU*. 2022, no. 2 (40), pp. 3 – 9. (In Russ.).

Введение

Лазерная абляция имеет много потенциальных технических применений в микрообработке и создании поверхностных наноструктур [1 – 3]. Механизм лазерной абляции металлов остается неясным. На это указывают противоречивость экспериментальных данных. Отсутствует согласованность между экспериментальными и теоретическими данными.

В результате воздействия на металл ультракороткими сверхмощными лазерными импульсами создаются уникальные физические условия (высокая скорость нагрева материала, выделение энергии лазерного излучения). Конденсированная среда нагревается до температур, которые превышают равновесное значение, как температуры плавления, так и температуры испарения. Длительность воздействия лазерных импульсов (пикосекундных) сопоставима со временем термических разделений химических соединений и фазовыми превращениями в материале. При этом тепловое воздействие вне зоны обработки минимально. Процессы неравновесного нагрева вещества при лазерном воздействии представляют практический интерес и служат объектом различных экспериментальных и теоретических исследований [4 – 6].

Облучение материала высокомощными лазерными импульсами может приводить к отрыву вещества от поверхности (абляции), что находит свое применение в различных областях. Явление лазерной абляции успешно изучается с помощью метода молекулярной динамики [7 – 9], который предполагает целый ряд допущений. Например, в рамках классической молекулярной динамики необходимо рассматривать временные интервалы, соответствующие характеристическому времени электронно-фононной релаксации.

В настоящей работе изучали структурные изменения, происходящие в материале при высокотемпературном воздействии в рамках молекулярно-динамического моделирования.

Методы и принципы исследования

Расчетная ячейка имела вид прямоугольного параллелепипеда размером (15×100×10) a_0 (a_0 – равновесный параметр решетки). Общее число моделируемых частиц 30 000. Вдоль осей X и Z применяли периодические граничные условия, а вдоль оси Y – свободные, имитирующие поверхность кристалла. Ячейку разбивали на десять слоев вдоль оси Y, в каждом из которых задавалось определенное значение температуры, убывающее по мере удаления от поверхности. При установлении теплового равновесия между электронами и фононами для описания распространения тепла можно применять модель теплопроводности. При использовании модели полубесконечного твердого тела аналитически точное решение тепловой задачи можно получить путем интегральных преобразований [10]. Для выполнения расчетов использовали пакет XMD. Визуализацию результатов моделирования осуществляли при помощи программ RasMol. При этом, если интенсивность источника не зависит от времени, а физические параметры постоянны и не зависят от температуры (линейная задача теплопроводности), то распределение температуры по глубине образца на стадии нагрева определяется как функция координат при $t < \tau$:

$$Th(y,t) = \frac{2Aq}{\lambda}\sqrt{at}\ ierfc\left(\frac{y}{2\sqrt{at}}\right), \qquad (1)$$

где y – координата; A – поглощательная способность; q – плотность энергии; λ – теплопроводность; a – коэффициент температуропроводности; τ – длительность воздействия.

Функция $ierfc(x)$, входящая в уравнении (1), представляет собой интеграл от функции интеграла вероятности:

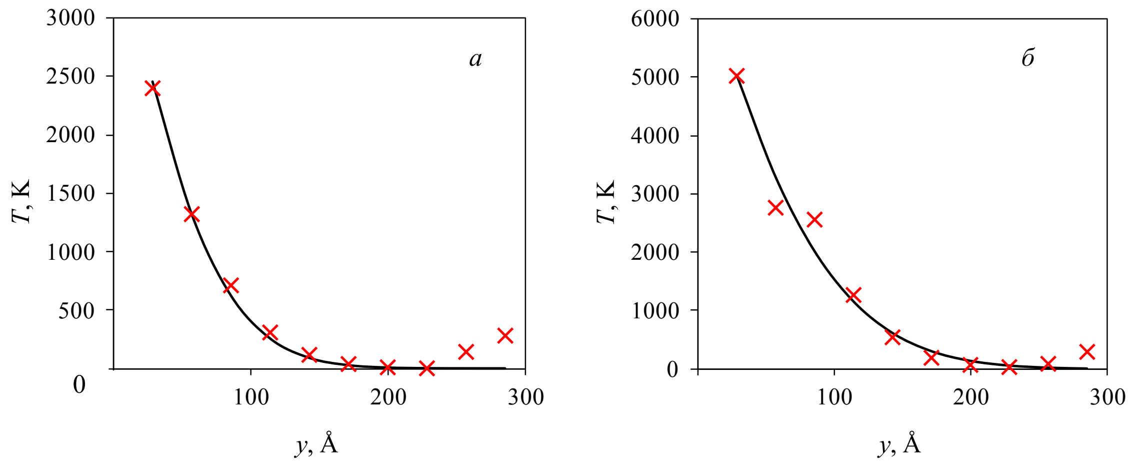

Рис. 1. Расчетное изменение температуры по мере удаления от поверхности кристалла (сплошная линия) и средние значения температуры выделенных слоев расчетной ячейки (×) через 1 пс (*а*) и 12 пс (*б*) модельного времени (q = 5 МВт/см^2)
Fig. 1. The calculated temperature change as it moves away from the crystal surface (solid line) and the averaged temperature values of the selected layers of the calculated cell (×) after 1 (*a*) and 12 (*б*) ps of the model time (q = 5 MW/cm^2)

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

После окончания лазерного воздействия ($t > \tau$) наступает стадия охлаждения. Распределение температуры определяется по следующему уравнению:

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

Для вычисления температуры использовали следующие параметры: A = 0,68; q = 3,5 ÷ 6,5 МВт/см^2; λ = 80 Вт/(м·К); $a = 2{,}621 \cdot 10^{-5}$ м^2/с; $\tau = 10 \cdot 10^{-12}$ с.

Неравномерный нагрев моделируемого образца может привести к формированию вблизи поверхности области сжатия, распространяющейся вглубь в виде волны давления, при достижении ею противоположной границы при использовании свободных граничных условий может способствовать эжектированию частиц. Чтобы избежать это, в наиболее удаленном от моделируемой поверхности слое, используя процедуру термостатирования, поддерживали постоянную температуру (300 К), а также накладывали вязкие граничные условия.

Основные результаты

На рис. 1 представлены теоретические кривые распределения температуры по образцу вдоль оси Y, полученные по уравнениям (1), (2), средние значения температуры выделенных слоев расчетной ячейки.

Температура наиболее удаленных от поверхности слоев не соответствует расчетным значениям. Это обусловлено использованием процедуры термостатирования.

Длительность нагрева расчетной ячейки составляет 10 пс, после чего температура начинает понижаться. На рис. 2 представлено изменение средней температуры расчетной ячейки в процессе моделирования.

После того как локальная температура расчетной ячейки начинает превышать температуру плавления, происходит фазовый переход, сопровождающийся распространением по ячейке границы жидкой фазы. Дальнейшее повышение температуры приводит к отрыву частиц и удалению их из основной системы. Пороговая температура поверхностного слоя, при которой происходит отрыв частиц, составляет примерно 4200 К. Изменение структуры расчетной ячейки представлено на рис. 3.

На рис. 4 представлено распределение частиц вблизи поверхности моделируемого образца в различные моменты времени. Частицы, которые располагались за пределами начальных границ расчетной ячейки, считали пребывающими в газообразном состоянии. В момент времени 5 пс доля таких частиц составляет 3,31 %, а к моменту окончания нагрева – 4,91 %. На стадии охлаждения доля частиц, находящихся за пределами начальных границ расчетной ячейки, убывает не значительно, но в рассматриваемом случае они образуют агломерации вблизи поверхности.

Увеличение плотности энергии (в рамках построенной модели равносильно увеличению температуры расчетной ячейки) приводит к отрыву от поверхности большего числа частиц по сравнению с предыдущим экспериментом (рис. 5).

На рис. 6 изображено распределения плотности частиц приповерхностных слоев. При q = 6,5 МВт/см^2

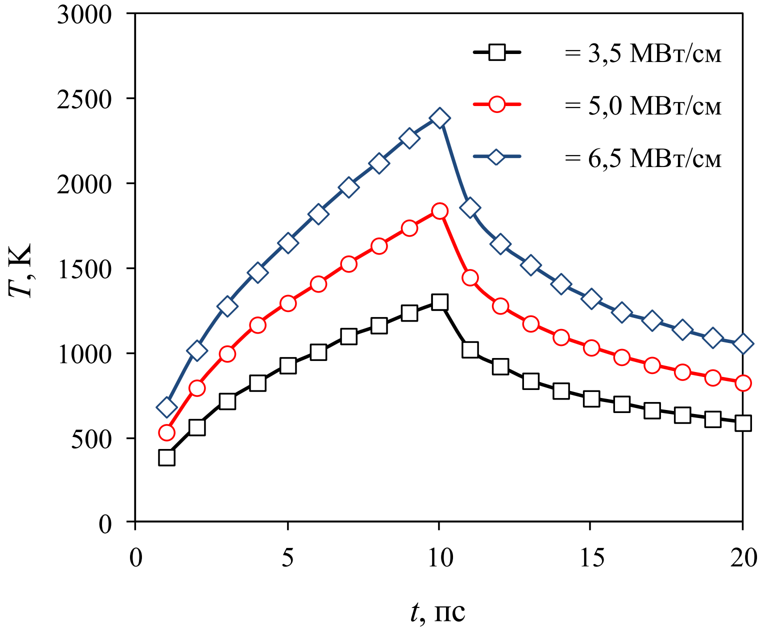

Рис. 2. Изменение средней температуры расчетной ячейки в течение моделирования при плотности энергии лазерного излучения 3,5 (□), 5,0 (○) и 6,5 (◊) МВт/см^2

Fig. 2. Change in the average temperature of the calculation cell during the simulation at the energy density of laser radiation 3,5 (□), 5,0 (○) и 6,5 (◊)MW/cm^2

структура имеет более неравномерное строение по сравнению с другими рассмотренными значениями q. В рассматриваемом случае доля частиц, пребывающих в газообразном состоянии, составляет 5,68 %. На рис. 7 представлено изменение доли таких частиц в процессе моделирования.

Кривые имеют характерный для кривой Гаусса «колоколообразный» вид. Для величины q = 3,5 МВт/см^2 сравнение численных значений асимметрии ($A \approx 0{,}91$) и экцесса ($E \approx -0{,}55$) со значениями их дисперсий позволяет приближенно считать распределение нормальным.

Выводы

В ходе проведенного исследования была построена молекулярно-динамическая модель, позволяющая исследовать процесс абляции, происходящей под воздействием ультракоротких лазерных импульсов низкой пиковой плотности излучения, а также выполнена оценка доли эжектированных частиц в результате нагрева расчетной ячейки. Установлено, что распределение изменения таких частиц в процессе нагрева и охлаждения системы близко к нормальному. Выполнена оценка пороговой температуры эжектирования частиц.

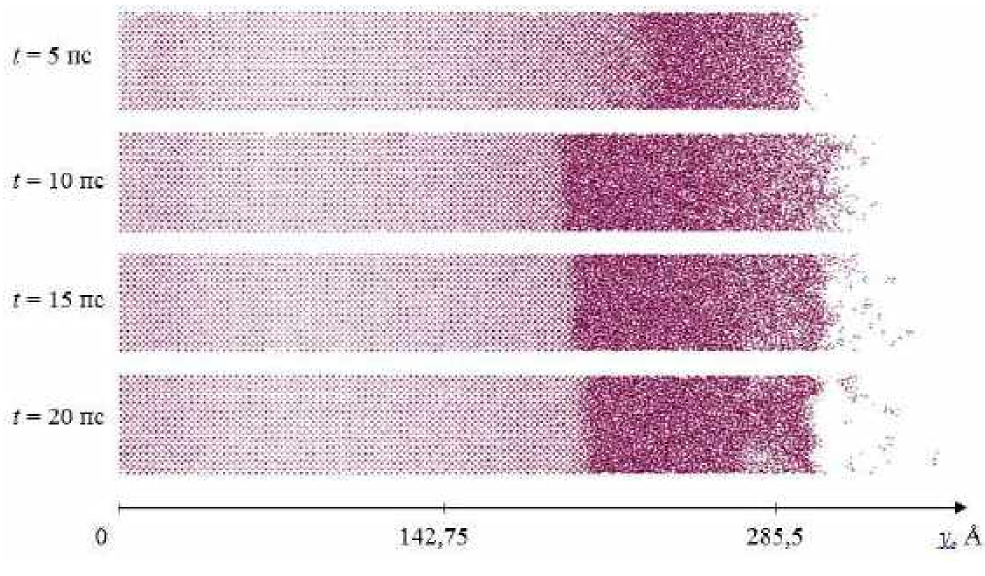

Рис. 3. Визуализация расчетной ячейки в различные моменты времени моделирования (q = 5 МВт/см^2)

Fig. 3. Visualization of the calculation cell at various points in the simulation time (q = 5 MW/cm^2)

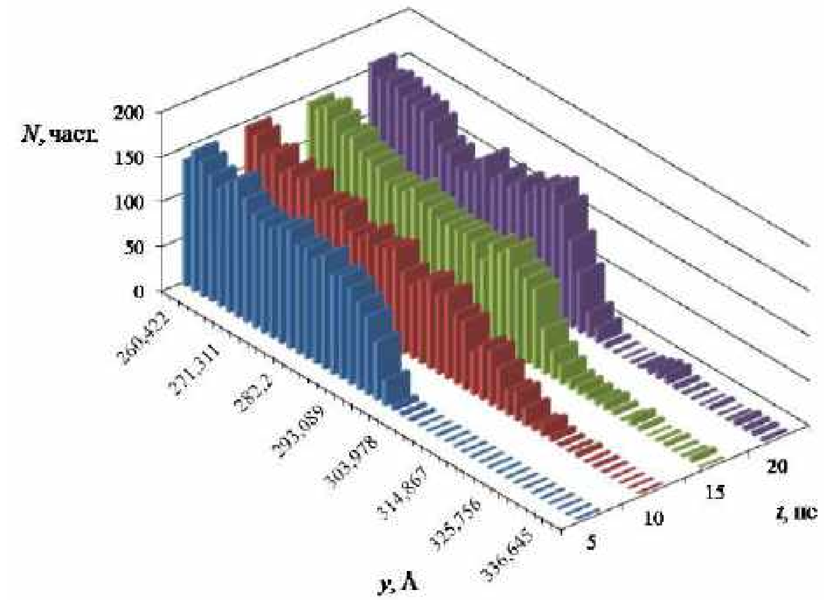

Рис. 4. Распределение частиц вблизи поверхности моделируемой системы в различные моменты времени (q = 5 МВт/см^2)
Fig. 4. Particle distribution near the surface of the simulated system at different time points (q = 5 MW/cm^2)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gamaly E.G. Femtosecond Laser-Matter Interaction: Theory, Experiments and Applications. New York: Jenny Stanford Publishing, 2011. 350 p.
2. Faenov Ya., Kato Y., Tanaka M., Pikuz T.A. Submicrometer-resolution in situ imaging of the focus pattern of a soft x-ray laser by color center formation in LiF crystal // Optics Letters. 2009. Vol. 34. P. 941–943.
3. Гостевская А.Н., Маркидонов А.В. Исследование методом молекулярно-динамического моделирования процесса лазерной абляции. В кн.: Материалы XIII школы-конференции молодых ученых “Кому-2021”, Ижевск, 18 – 22 октября 2021 года. Ижевск: изд. Удмуртского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук, 2021. С. 131, 132.
4. Завьялова М.А. Поверхностная модификация кварцевого стекла импульсами пикосекундного лазера // Компьютерная оптика. 2016. Т. 40. № 6. С. 863–870.
5. Мажукин В.И., Демин М.М., Шапранов А.В. Эффекты неравновесности при воздействии импульсного лазерного излучения на металлы // Оптический журнал. 2011. Т. 78. № 8. С. 29–37.
6. Явтушенко Т.О., Кадочников А.С., Новиков С.Г., Беринцев А.В., Столяров Д.А. Экспериментальное исследование процесса структурирования поверхности металла фемтосекундными лазерными импульсами высокой мощности // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2013. Т. 15. № 4 (5). С. 1033–1037.

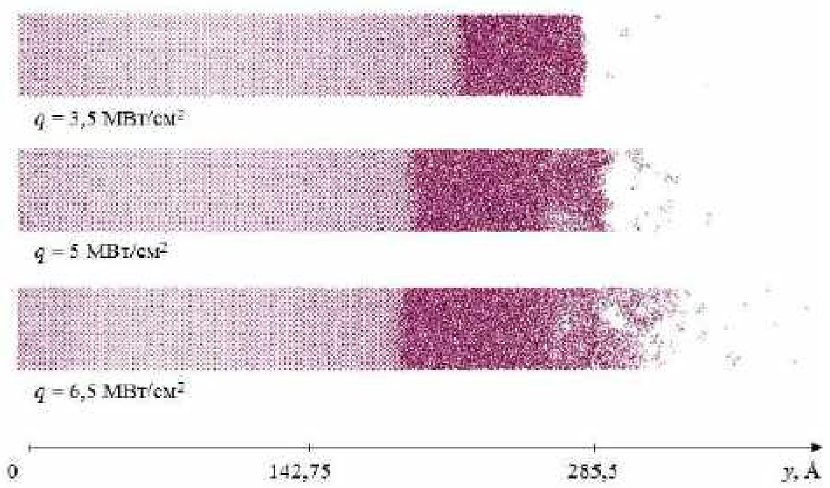

Рис. 5. Визуализация расчетной ячейки в момент времени t = 20 пс при различной плотности энергии лазерного излучения
Fig. 5. Visualization of the calculation cell at time t = 20 ps at different energy densities of laser radiation

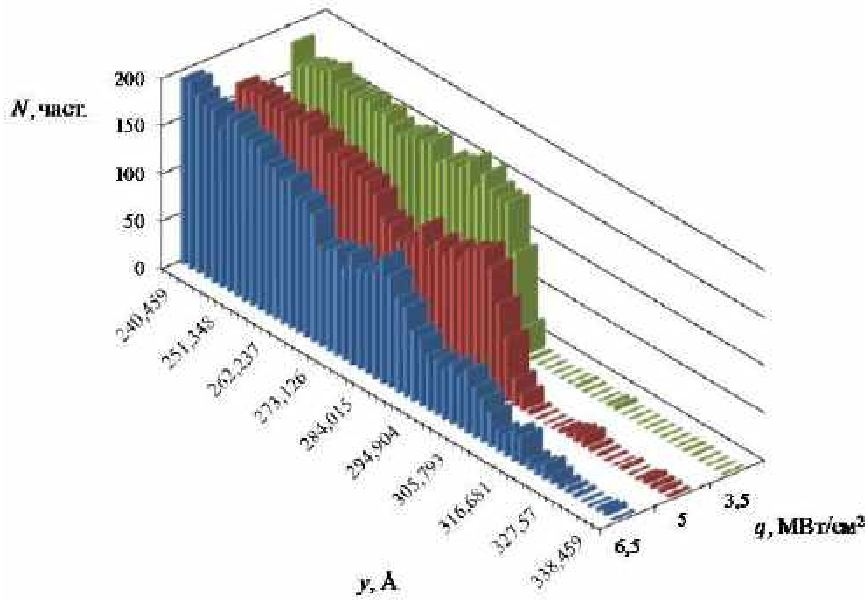

Рис. 6. Распределение частиц вблизи поверхности моделируемой системы в момент времени t = 20 пс при различной плотности энергии лазерного излучения
Fig. 6. Distribution of particles near the surface of the simulated system at time t = 20 ps at different energy densities of laser radiation

7. Kuo J.-K., Huang P.-H., Chien S.-K., Huang K.-Y., Chen K.-T. Molecular Dynamics Simulations of Crater Formation Induced by Laser Ablation on the Surface of α-Fe Substrate // MATEC Web of Conferences. 2018. Vol. 167. Article 03011.
8. Gong X.-F., Yang G.-X., Li P., Wang Y., Ning X.-J. Molecular Dynamics Simulation of Pulsed Laser Ablation // International Journal of Modern Physics B. 2011. Vol. 25. No. 4. P. 543–550.
9. Cheng C., Wu A.Q., Xu X. Molecular Dynamics Simulation of Ultrafast Laser Ablation of Fused Silica // Journal of Physics: Conference Series. 2007. Vol. 59. P. 100–104.
10. Рыкалкин Н.Н., Углов А.А., Зуев И.В., Кокора А.Н. Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов. М.: Машиностроение, 1985. 496 с.

REFERENCES

1. Gamaly E.G. *Femtosecond Laser-Matter Interaction: Theory, Experiments and Applications*. New York: Jenny Stanford Publishing, 2011, 350 p.
2. Faenov Ya., Kato Y., Tanaka M., Pikuz T.A. Submicrometer-resolution in situ imaging of the focus pattern of a soft x-ray laser by color center formation in LiF crystal. *Optics Letters*. 2009, vol. 34, pp. 941–943.
3. Gostevskaya A.N., Markidonov A.V. Investigation by the method of molecular dynamic modeling of the laser ablation process. In: *Proceedings of the XIII school-conference of young scientists "To Whom-2021", Izhevsk, October 18–22, 2021*. Izhevsk: izd. Udmurtskogo federal'nogo issledovatel'skogo tsentra Ural'skogo otdeleniya Rossiiskoi akademii nauk, 2021, pp. 131, 132. (In Russ.).
4. Zav'yalova M.A. Surface modification of quartz glass by picosecond laser pulses. *Komp'yuternaya optika.* 2016, vol. 40, no. 6, pp. 863–870. (In Russ.).
5. Mazhukin V.I., Demin M.M., Shapranov A.V. Effects of nonequilibrium under the influence of pulsed laser radiation on metals. *Opticheskii zhurnal.* 2011, vol. 78, no. 8, pp. 29–37. (In Russ.).

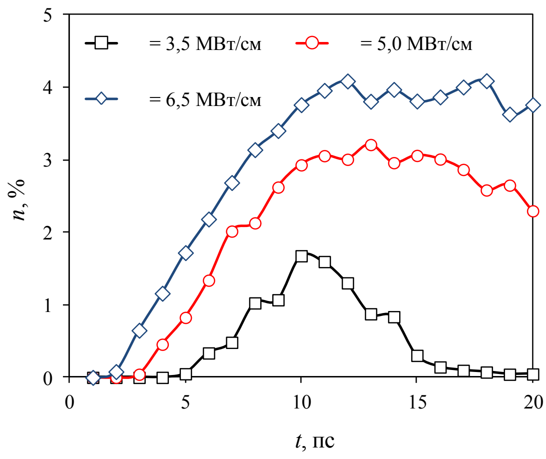

Рис. 7. Изменение доли частиц, располагающихся за пределами первоначальной границы расчетной ячейки в течение моделирования, при плотности энергии лазерного излучения 3,5 (□), 5,0 (○) и 6,5 (◊) МВт/см^2
Fig. 7. The change in the fraction of particles located outside the initial boundary of the computational cell during the simulation at a laser radiation energy density of 3,5 (□), 5,0 (○) and 6,5 (◊) MW/cm^2

6. Yavtushenko T.O., Kadochnikov A.S., Novikov S.G., Berintsev A.V., Stolyarov D.A. Experimental study of the process of structuring the metal surface by femtosecond laser pulses of high powe. *Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra Rossiiskoi akademii nauk.* 2013, vol. 15, no. 4 (5), pp. 1033–1037. (In Russ.).
7. Kuo J.-K., Huang P.-H., Chien S.-K., Huang K.-Y., Chen K-.T. Molecular Dynamics Simulations of Crater Formation Induced by Laser Ablation on the Surface of α-Fe Substrate. *MATEC Web of Conferences*. 2018, vol. 167, article 03011.
8. Gong X.-F., Yang G.-X., Li P., Wang Y., Ning X.-J. Molecular Dynamics Simulation of Pulsed Laser Ablation. *International Journal of Modern Physics B*. 2011, vol. 25, no. 4, pp. 543–550.
9. Cheng C., Wu A.Q., Xu X. Molecular Dynamics Simulation of Ultrafast Laser Ablation of Fused Silica. *Journal of Physics: Conference Series*. 2007, vol. 59, pp. 100–104.
10. Rykalkin N.N., Uglov A.A., Zuev I.V., Kokora A.N. *Laser and electron beam processing of materials.* Moscow: Mashinostroenie, 1985, 496 p. (In Russ.).

Сведения об авторах

Анастасия Николаевна Гостевская*, аспирант кафедры естественнонаучных дисциплин имени профессора В.М. Финкеля,* Сибирский государственный индустриальный университет
E-mail*:* gostevskaya_an@mail.ru
ORCID: 0000-0002-7328-5444

Артем Владимирович Маркидонов*, д.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой ИВТ им. Буторина,* Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета
E-mail*:* markidonov_artem@mail.ru
ORCID: 0000-0002-4566-528X

Information about the authors

Anastasia N. Gostevskaya*, Postgraduate student of the Department of Natural Sciences named after Professor V.M. Finkel,* Siberian State Industrial University
E-mail*:* gostevskaya_an@mail.ru
ORCHID*:* 0000-0002-7328-5444

Artem V. Markidonov*, Ph.D., Associate Professor, Head of the Department of IVT im. Butorina,* Kuzbass Humanitarian and Pedagogical Institute of Kemerovo State University
E-mail*:* markidonov_artem@mail.ru
ORCID*:* 0000-0002-4566-528X

Поступила в редакцию 1 февраля 2022 г.