

Континуально-атомистическое моделирование формирования наночастиц при абляции металлов под воздействием фемтосекундных лазерных импульсов

В.Б. Фокин, П.Р. Левашов, М.Е. Поварницын, К.В. Хищенко

Объединенный институт высоких температур РАН

Получение наночастиц – очень важный технологический процесс во многих сферах деятельности, а абляция вещества с помощью фемтосекундных лазерных импульсов является достаточно эффективным способом получения частиц различных размеров. Тем не менее, многие механизмы, лежащие в основе этого процесса, до сих пор окончательно не изучены. Для моделирования лазерной абляции мы используем континуально-атомистическую модель, основанную на приближении [1]. Молекулярная динамика используется для описания атомной подсистемы, тогда как электроны моделируются континуальным уравнением для энергии электронов.

Основное преимущество комбинированной модели (по сравнению с гидродинамическим приближением) – аккуратное воспроизведение кинетических процессов фрагментации как в твердой, так и в жидкой фазах металла на малых временных и пространственных масштабах. Взаимодействие атомов металла описывается потенциалом в форме ЕАМ [2]. В нашей модели поглощение лазера рассчитывается путем решения уравнений Гельмгольца для электромагнитного поля. Для расчета диэлектрической проницаемости, электронной теплопроводности и коэффициента электрон-ионного взаимодействия мы используем широкодиапазонные модели [3]. Также мы используем модель Томаса-Ферми [4] для определения локальной плотности и теплоемкости электронов.

Показано хорошее соответствие с экспериментальными данными по глубине абляции в алюминии, также исследована структура аблированной массы и распределение наночастиц по размерам. Разработанный подход можно применять для моделирования лазерных импульсов с умеренной интенсивностью, для изучения процессов сверхбыстрого плавления, испарения и фрагментации.

Литература

1. *Ivanov D.S., Zhigilei L.V.* // Phys. Rev. B. 2003. Vol.68. P.064114.
2. *Zhakhovskii V.V. [et al]* // Appl. Surf. Sci. 2009. Vol. 255. P. 9592.
3. *Povarnitsyn M.E. [et al]* // Appl. Surf. Sci. 2012. Vol. 258. P. 9480.
4. *Shemyakin O.P. [et al]* // J. Phys. A: Math. Theor. 2010. Vol. 43. P. 335003.