МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ПРОЧНОСТИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ СО РАН

ФИЗИЧЕСКАЯ МЕЗОМЕХАНИКА МАТЕРИАЛОВ.
ФИЗИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ ФОРМИРОВАНИЯ МНОГОУРОВНЕВОЙ СТРУКТУРЫ И МЕХАНИЗМЫ НЕЛИНЕЙНОГО ПОВЕДЕНИЯ

Международная конференция

5–8 сентября 2022 г.
Томск, Россия

Тезисы докладов

Новосибирск
2022

УДК 539(063)+620.18(063)
ББК В251я431+Ж37я431
Ф503

Ф503 Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения : Тез. докл. Междунар. конф., 5-8 сентября 2022 г., Томск, Россия / Ин-т физики прочности и материаловедения СО РАН. – Новосибирск : ИПЦ НГУ, 2022. – 556 с.

ISBN 978-5-4437-1353-3

Издание содержит тезисы международной конференции «Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения». Физическая мезомеханика является научным направлением, в рамках которого материал представляется как иерархическая система взаимосвязанных структурных (масштабных) уровней. В сборнике отражены последние достижения в области развития принципов и методологии физической мезомеханики и результаты их применения к созданию перспективных материалов в интересах развития новых производственных технологий, освоения космического пространства, в том числе дальнего космоса, электроники, атомной энергетики, нефтегазового комплекса, медицины, транспорта и др.

Предназначено научным сотрудникам, инженерам, аспирантам и специалистам, занимающимся вопросами физической мезомеханики, разработки наноструктурных объемных и наноразмерных материалов, наноструктурированием поверхностных слоев, тонкими пленками и покрытиями, нанотехнологиями, компьютерным конструированием новых материалов и технологий их получения, технологиями локальной нестационарной металлургии и обработки материалов, неразрушающими методами контроля.

УДК 539(063)+620.18(063)
ББК В251я431+Ж37я431

ISBN 978-5-4437-1353-3 © Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 2022

DOI 10.25205/978-5-4437-1353-3-169

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЕ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ НА ИЗМЕНЕНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ МОДЕЛИРОВАНИЕМ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

[1]Гостевская А.Н., [1,2]Маркидонов А.В., [1]Громов В.Е., [3]Старостенков М.Д.
[1]Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк
[2]Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, Новокузнецк
[3]Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул

Быстрые процессы в металлах в настоящее время успешно изучаются методами компьютерного моделирования. Короткоимпульсная лазерная абляция металлических мишеней лежит в основе многих практических приложений, начиная от высокоточной резки и сверления и заканчивая наноструктурированием поверхности и созданием наночастиц с узким распределением по размерам и хорошо контролируемым составом [1, 2]. Оптимизации параметров лазерной обработки в современных приложениях и появлению новых методов, основанных на лазерной абляции, способствовали вычислительные усилия, направленные на понимание неравновесных процессов, запускаемых быстрым высвобождением лазерной энергии и ответственных за выброс материала [3, 4]. На сегодняшней день механизмы непрерывного нагрева кристаллических решеток и атомов являются актуальной проблемой, в которой проводятся исследования.

Облучение материала высокомощными лазерными импульсами может приводить к отрыву вещества от поверхности (абляция), что находит свое применение в различных областях.

В рамках исследования при помощи молекулярно-динамического моделирования изучались структурные изменения металлов под действием высоких температур.

Модель создавалась следующим образом. В прямоугольной системе координат размер вычислительной единицы находится в трех ортогональных кристаллографических направлениях, совпадающих с осью. Далее формируется базовая ячейка, формируется массив частиц, соответствующий ОЦК-решетке, и его трансляция заполняет весь заданный объем. Кроме того, этот процесс включает сложные взаимодействия между различными фазами. В этом исследовании применялось моделирование, чтобы наблюдать переходные явления, связанные с лазерной абляцией [6, 7]. Исследование проводилось при помощи молекулярно-динамического моделирования. В проведенном исследовании изучались изменения структуры на атомарном уровне, происходящие в металле при воздействии высоких температур с помощью молекулярно-динамического моделирования. Расчетная ячейка представлена в виде параллепипеда прямоугольной формы со сторонами $15a_0 \times 100a_0 \times 10a_0$, где a_0 – равновесный параметр решетки. Всего моделируемых частиц было 30000 ед. Расчетная ячейка при компьютерном моделировании разделялась на 10 слоев вдоль оси Y, где для каждого слоя задавалась определенная температура, которая снижалась при удалении от поверхности.

Для вычисления температуры использовались следующие параметры, приведенные в таблице 1.

Таблица 1. Физические параметры, для расчета температуры

A	q, $\frac{\text{МВт}}{\text{см}^2}$	λ, $\frac{\text{Вт}}{\text{м}\cdot\text{К}}$	a, $\frac{\text{м}^2}{\text{с}}$	τ, с
0.68	3.5…6.5	80	$2.621\cdot10^{-5}$	$10\cdot10^{-12}$

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

Процесс моделирования производится в 2 этапа. На первом этапе расчетная ячейка нагревалась неравномерно в течение времени моделирования 10 пс. Далее идет второй этап, где рассчитанная температура неравномерно охлаждается при 20 пс. Локальная температура

ячейки, рассчитанная в процессе нагрева, начинает превышать температуру плавления, происходит фазовый переход, образующий границу между твердой и жидкой фазами в ячейке, смещая температуру в сторону более низкой температуры. Дальнейшее увеличение температуры, приводит к отделению атомов от поверхности вычислительного блока, образуя облако испаренных частиц.

Алгоритм, основанный на методе α-формы Эдельсбруннера и Мюкке [8], использовался для выявления пустот и оценки площади их поверхности. Этот метод использует тетраэдрализации Делоне ряда геометрических точек. Определение пустот в объеме металла происходит за счет подсчета радиуса виртуальной сферы. Радиус такой сферы должен быть не меньше половины расстояния между самыми короткими атомами, иначе в расчет включаются «искусственные» пустоты. В данной работе радиус виртуальной сферы равен значению постоянной решетки.

Было обнаружено, что в поверхностном слое после прекращения внешнего воздействия свободный объем локализуется в виде группы пор, которые растворяются в процессе усадки. Стабилизировать данные поры можно путем увеличения скорости охлаждения расчетной ячейки или же путем создания деформации растяжения. При моделировании разнообразных плотностей поглощенной лазерной энергии путем изменения параметра q в слоях вблизи поверхности расчетной ячейки наблюдаются различные структурные изменения.

При исследовании при помощи метода молекулярной динамики была построена модель для изучения влияния процесса лазерной абляции на образование пор. Одним из способов стабилизации полученных пор является повышением скорости охлаждения кристаллической ячейки.

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

1. Shih C.Y. Atomistic modeling of nanoparticle generation in short pulse laser ablation of thin metal flms in water / C.Y.Shih, C. Wu, M.V. Shugaev, L.V. Zhigilei // Journal of Colloid and Interface Science. 2017. Vol.489. P. 3–17.
2. Kubecek V. 4-W and 23-ps pulses from a lamp-pumped Nd:YAG laser passively mode-locked by polarization switching in a KTP crystal / V. Kubecek, V. Couderc, B. Bourliaguet, F. Louradour, A.Barthelemy // Applied Physics B. 1999. Vol. 69. P. 99–102.
3. Гостевская, А. Н. Молекулярно-динамическое моделирование лазерной абляции / А. Н. Гостевская // Наука и молодежь: проблемы, поиски, решения : Труды Всероссийской научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, Новокузнецк, 12–14 мая 2021 года. – Новокузнецк: Сибирский государственный индустриальный университет, 2021. С. 14–18.
4. Mendelev M.I., Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron / M.I. Mendelev [etc.] // Philosophical Magazine. 2003. Vol. 83, No.35. P.3977–3994.
5. Гостевская А. Н. Молекулярно–динамическое моделирование лазерной абляции / А.Н. Гостевская, А.В. Маркидонов, В.В. Коваленко // Перспективные материалы и технологии : материалы международного симпозиума, Минск, 2021 г. - Минск: Белорусский государственный институт стандартизации и сертификации», 2021. С. 21–22.
6. Cheng C. Molecular dynamics simulation of ultrafast laser ablation of fused silica / C. Cheng, A.Q. Wu, X. Xu // Journal of Physics: Conference Series. 2007. Vol. 59. P.100–104.
7. Povarnitsyn M.E. Simulation of multi-pulse laser ablation for laser-induced breakdown spectroscopy applications / M.E. Povarnitsyn, P.R. Levashov // Applied Physics A. 2019. Vol. 125.
8. Маркидонов, А. В. О возможности гомогенного зарождения поры в зернограничной области под воздействием ударных послекаскадных волн / А. В. Маркидонов, М. Д. Старостенков // Вопросы атомной науки и техники. Серия : Математическое моделирование физических процессов. 2016. № 3. С. 37–46.