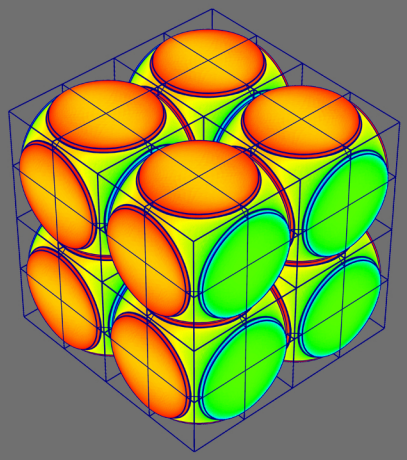
ISSN 2309-3684



Математическое моделирование и численные методы

Перов Е.А., Жаховский В.В., Иногамов Н.А., Шепелев В.В., Фортова С.В., Долуденко А.Н.. Молекулярно-динамическое моделирование модификации алюминия лазерной ударной волной. Математическое моделирование и численные методы, 2023, № 4, с. 74-92

Источник: https://mmcm.bmstu.ru/articles/326/

Параметры загрузки:
IP: 216.73.216.101
09.01.2026 01:26:47

УДК 519.63 DOI: 10.18698/2309-3684-2023-4-7492

Молекулярно-динамическое моделирование модификации алюминия лазерной ударной волной

© Е.А. Перов[1], В.В. Жаховский[1,2], Н.А. Иногамов[3], В.В. Шепелев[4], С.В. Фортова[4], А.Н. Долуденко[1]

[1]Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, 125412, Россия
[2]Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Москва, 127055, Россия
[3]Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Москва, 142432, Россия
[4]Институт автоматизации проектирования РАН, Москва, 123056, Россия

Пластические деформации лежат в основе такой промышленной технологии, как лазерное термоупрочнение или лазерный пиннинг (LSP, laser shock peening). В данной работе методом классической молекулярной динамики исследована возможность упрочнения поверхностного слоя алюминиевого образца, облученного единичным фемтосекундным лазерным импульсом. Рассмотрены три ориентации кристаллической решетки — [1, 0, 0] (первая ориентация кристаллической решетки), [1, 1, 0] (вторая ориентация кристаллической решетки), [1, 1, 1] (третья ориентация кристаллической решетки). Проведено численное исследование влияния различных величин вложенной энергии в диапазоне от 120,98 Дж/м^2 до 2540,01 Дж/м^2 лазерного импульса на глубину залегания пластических деформаций, влияющих на упрочнение исследуемого материала. Построена зависимость максимальной глубины залегания пластических деформаций от вложенной энергии. Значения энергий подобранны таким образом, что пластический фронт УВ (ударной волны) останавливался до того, как достигнет правой границы моделируемого образца. Необходимость соблюдения этого условия обусловлена тем фактом, что отразившаяся от правой границы образца волна растяжения может тормозить пластический ударный фронт, выступая в роли волны разгрузки. С помощью построенной в работе зависимости максимальной глубины залегания пластических деформаций от вложенной энергии определено пороговое значение вложенной энергии, при превышении которого алюминий начинает пластически деформироваться.

Ключевые слова: *фемтосекундный лазерный импульс, ударная волна, пластические деформации, молекулярно-динамическое моделирование, вложенная энергия, лазерное термоупрочнение*

Введение. В настоящее время существует множество областей применения лазерных технологий, одним из которых является обработка поверхностей материала (лазерное структурирование). Лазерному структурированию посвящено большое количество работ [1–9]. При помощи лазеров можно получать различные узоры на поверх-ности обрабатываемого вещества (технология LIPSS) [3]. Можно добывать наночастицы путем лазерной абляции вещества,

покрытого слоем жидкости [4, 5, 6]. Одним из наиболее технологически актуальных процессов является так называемое лазерное термоупрочнение или лазерный пиннинг (laser shock peening, LSP). Термоупрочнение может проводиться лазерными импульсами как наносекундного порядка [7–9], так и фемтосекундного диапазона [10–12]. В случае наносекундного импульса в качестве защитного покрытия необходимо использовать слой воды, либо же другое оптически прозрачное вещество. После данной процедуры прочность детали на поверхности возрастает в несколько раз при сравнительно малых финансовых затратах [9].

В последнее время изучается влияние фемтосекундных лазерных импульсов на облучаемый в процессе лазерного термоупрочнения [10–12]. При облучении металлического образца фемтосекундными лазерными импульсами в пятне нагрева возникает более высокое давление, чем при воздействии наносекундными импульсами. Поэтому использование фемтосекундных лазеров дает потенциальную возможность не только точнее, но и глубже упрочнять металл.

Давление, которое возникает при облучении лазером, является движущей силой образования пластических деформаций, которые упрочняют материал [13]. Известно [13], что упругая волна не создает никаких пластических деформаций, которые являются основными в лазерном термоупрочнении. Поэтому необходимо исследовать свойства упруго пластических волн, возникающих при лазерном облучении металлов и формирующих пластические деформации. Более того, ответы на вопросы — как зависит глубина залегания пластических деформаций в зависимости от начальной температуры в пятне нагрева (или от вложенной энергии), а также — какова минимальная энергия, превышая которую, возникают пластические деформации, позволят определить глубину лазерного упрочнения. В этой статье предпринята попытка ответить на эти вопросы.

Математическая постановка и численная методика. Численное исследование проводилось с использованием метода молекулярной динамики (МД). Данный метод позволяет имитировать движение атомов (молекул) с помощью решения классических уравнений движения, учитывая взаимодействие атомов между собой.

Лазерный нагрев имеет три вида характеристик — пространственные, временные и энергетические. В качестве временной характеристики выступает длительность фемтосекундного лазерного импульса порядка 100 фс. Пятно нагрева имеет диаметр 100 нм (острая фокусировка), толщина прогрева составляет 20 нм (скин-слой). Эти параметры отличаются от параметров, которые используются в эксперименте. Однако использование теории

подобия позволяет масштабировать систему до экспериментальной, сохранив при этом точность расчетов. Энергетическая характеристика определяется вложенной энергией в пятно нагрева и является важнейшей характеристикой, благодаря которой можно предсказать максимально возможную глубину и ширину залегания пластических деформаций.

Опишем кратко алгоритм молекулярного моделирования (МД). В основе метода МД лежит Второй закон Ньютона, уравнения которого решаются при помощи выбранной расчетной схемы.

В традиционном варианте метода решаются классические уравнения движения. Это означает, что моделируемая система представляет собой замкнутую систему, в которой сохраняется полная энергия (сумма кинетической и потенциальной энергий).

В качестве решения уравнений Второго закона Ньютона применяется метод Верле в скоростной форме [14]:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + v_n \Delta t + a_n \frac{\Delta t^2}{2}, \\ v_{n+1} &= v_n + (a_n + a_{n+1}) \frac{\Delta t}{2}. \end{aligned} \tag{1}$$

Данная расчетная схема обладает свойствами, которые необходимы для её применения в методе молекулярной динамики — сохранение фазового объема и обратимость по времени.

Для тонкой пленки из алюминия с гранецентрированной кубической решеткой (постоянная решетки $a = 0,405$ нм) и размерами $L_x \times L_y \times L_z = 200 \times 640 \times 20$ нм, примерное число частиц равно $4\left(L_x \cdot L_y \cdot L_z\right)/a^3 \approx 154 \cdot 10^6$.

Для проведения расчетов используется разработанный параллельный алгоритм. В самом начале расчетная область разбивается на домены в трехмерном пространстве по методу разбиения на ячейки Вороного [15]. Внутри этих ячеек атомы взаимодействуют как друг с другом, так и с атомами, которые находятся возле границ ячейки (то есть, существует взаимодействие с соседними ячейками). Каждая из ячеек попадает на свой вычислитель суперкомпьютера.

Начальные условия. Для решения системы уравнений, необходимо задать координаты частиц и их скорости в начальный момент времени $t = 0$. Так как моделируется монокристалл алюминия, то сначала строится его кристаллическая решетка. Мы исходим из следующих представлений — кристалл имеет гранецентрированную кубическую решетку (ГЦК); решетка строится путем размножения элементарных ячеек во всех трех

направлениях; элементарная ячейка состоит из некоторого количества атомов, координаты которых определяются в соответствии с формулами [16]:

$$x = \frac{1}{2}a(a' + c'),\ \ y = \frac{1}{2}a(a' + b'),\ \ z = \frac{1}{2}a(b' + c'). \qquad (2)$$

где x, y и z — координаты атома в пространстве; a — постоянная кристаллической решетки (у алюминия она равна $4,050 \cdot 10^{-10}$ м); a', b' и c' — целые числа, которые могут лежать в диапазоне от $-\infty$ до $+\infty$.

Для установления стационарного состояния системы проводится релаксация моделируемой системы. Для этого применяется термостат Ланжевена [17], который вводит в систему две дополнительные компоненты сил. Одна из компонент вызывает нагрев частиц и называется случайной силой F_r. Для компенсации температур и защиты от перегрева частиц используется вторая компонента — сила трения F_f:

$$F_r \sim N(0;\sigma_l^{\,2}),\ \ \sigma_l^{\,2} = \frac{2k_b T_t m}{\tau_t \Delta t},\ \ F_f = -\frac{m(v - v_f)}{\tau_t}. \qquad (3)$$

У случайной силы F_r имеется Гауссово распределение с дисперсией σ_l^2; T_t — желаемая температура, которую мы хотим достигнуть; τ_t — оптимальное время взаимодействия с тепловым резервуаром, за это время система должна достигнуть равновесного состояния; v_t — скорость потока частиц.

Граничные условия. В работе рассматривается кристалл алюминия, который представляет из себя тонкую алюминиевую пленку, бесконечную в направлениях осей Y и Z. Для моделирования выделяется некоторый объем этой пленки размером $L_x \times L_y \times L_z$. Чтобы учесть воздействие от области, которая не входит в расчетную область, используются периодические граничные условия вдоль осей Y и Z, а период равен L_y и L_z соответственно. Периодические граничные условия подразумевают, что при пересечении частицы некоторой границы $x = 0$ или $x = L_x$, координата этой частицы меняется на $x = x \pm L_x$, в зависимости от того, какая граница была пересечена.

Необходимо учитывать периодичность при расчете сил взаимодействия частиц из приграничных областей. Частицы, которые находятся в области $0 \le x < r_c$, где r_c — радиус обрезки потенциала

взаимодействия, взаимодействуют с частицами в области $L_x - r_c \le x < L_x$, путем коррекции соединяющего их радиус-вектора $r_{ij} = r_j - r_i$. То есть, частица с индексом i, лежащая в одной приграничной области, располагается от частицы с индексом j из противоположной приграничной области, на расстоянии, определяемом следующими соотношениями:

$$\begin{cases} x_{ij} = x_j - x_i, \text{ если } |x_j - x_i| < \dfrac{L_x}{2}, \\ x_{ij} = x_j - x_i + L_x, \text{ если } (x_j - x_i) < -\dfrac{L_x}{2}, \\ x_{ij} = x_j - x_i - L_x, \text{ если } (x_j - x_i) > \dfrac{L_x}{2}. \end{cases} \quad (4)$$

Правило периодичности аналогично работает для y и z компонент координат r_{ij}.

Система перед началом моделирования фемтосекундного лазерного импульса приведена к равновесному состоянию при температуре 300 К и плотности $1{,}43$ г/см^3.

По осям Z и Y установлены периодические граничные условия. Вдоль оси X на границе расчетной области установлены поглощающие граничные условия. Это означает, что атом, который достигает этой границы, удаляется из расчетной области.

Поскольку при моделировании используется классический метод молекулярной динамики, то вклад электронной подсистемы в передаче энергии не учитывается. Нагрев моделируется при помощи термостата Ланжевена. Вложенная энергия при этом меняет своё значение от $120{,}98$ Дж/м^2 до $3709{,}46$ Дж/м^2. Толщина пятна нагрева равна 20 нм, энергия в пятне распределяется при помощи Гауссового распределения в 16 степени, и имеет форму, близкую к прямоугольнику.

Потенциал взаимодействия. Ключевым вопросом метода молекулярной динамики является выбор потенциала взаимодействия, так как оно описывает реальное физическое взаимодействие частиц друг с другом. Существует большое количество потенциалов, для каждой конкретной задачи выбирается свой. Выбор потенциала определяется тем, какие именно параметры или какую именно постановку задачи надо смоделировать. Также играет роль тип исследуемого материала (металлы или неметаллы) [18, 19]. Для моделирования взаимодействия атомов металла применяют EAM-потенциалы. EAM — аббревиатура от «embedded atom model» или «модель погруженного атома». Классические парные потенциалы

дают не вполне корректные результаты при моделировании металлов и некоторых других материалов по причине учета лишь электромагнитных сил парного взаимодействия. Такие потенциалы не позволяют получить устойчивую конфигурацию для кристаллических решеток, не относящихся к плотноупакованным. Например, ОЦК или простая гексагональная решетки оказываются неустойчивыми при использовании большинства парных потенциалов. В EAM в отличие от парного потенциала учитываются не только взаимодействия между атомами, но и взаимодействия электронных облаков с атомами и атомов с электронными облаками. Общая формула такого потенциала имеет вид:

$$E_{tot} = \sum_i F(n_i) + \sum_{i<j} V(r_{ij}),\ n_i = \sum_{i \neq j} n(r_{ij}), \tag{5}$$

здесь $V\left(r_{ij}\right)$ — парный потенциал взаимодействия, $F\left(n_i\right)$ — энергия погружения i-го атома в электронное облако, $n\left(r_{ij}\right)$ — функция плотности электронного облака. В данной статье использован EAM потенциал В.В. Жаховского [20], определяемый следующими соотношениями:

$$\begin{gathered} x = a_1 r^2, x_c = a_1 r_c{}^2, \\ V(r) = (\frac{1}{x} - a_c)(x - x_c)^{10}((x - x_c)^6 + a_3 x^6), \\ F(n) = \frac{b_1 n(b_2 + (b_3 + n)^2)}{1 + b_4 n}, \\ n(r) = \frac{c_1 (r^2 - r_c{}^2)^2}{1 + (c_2 r^2)^3}, \end{gathered} \tag{6}$$

где r_c — радиус обрезки потенциала взаимодействия и равен 0,6874 нм. Параметры a_N, b_N, c_N подобраны экспериментально.

Макроскопические параметры. Во время молекулярно-динамического моделирования конденсированной среды, характерное время установления термодинамического равновесия составляет единицы пикосекунд. Основные макроскопические параметры, такие как давление, температура и т. д. определялись при помощи процедуры осреднения. Таким образом, давление (напряжения в кристалле) можно получено при помощи осреднения мгновенной функции давления [21]:

$$P = \frac{k_b T N}{V} + \left\langle \frac{\sum_{\substack{i=0,\\ j=0}}^{N} r_{ij} F_{ij}}{6V} \right\rangle. \tag{7}$$

Здесь величины T, N, V — температура, количество атомов, объем; k_b — константа Больцмана; r_{ij} — разность между положениями i и j частицами; F_{ij} — сила, с которой частица j воздействует на частицу i. Данная формула получена при помощи вириального разложения Клаузиуса [22]:

$$\left\langle \sum_{i=1}^{N} \frac{|p_i|^2}{m_i} + \sum_{i=1}^{N} r_i F_i \right\rangle, \tag{8}$$

где p_i — импульс i-ой частицы, F_i — суммарная сила, действующая на i-ую молекулу со стороны стенок и других молекул, r_i — пространственный вектор i-ой частицы.

Температура рассчитывается по формуле:

$$T = \frac{2E_{kin}}{3k_b},\ E_{kin} = \frac{\sum_{i=0}^{N}(m_i(v_i - v_{c.m.})^2)}{2}, \tag{9}$$

где E_{kin} — тепловая кинетическая энергия атомов, $v_{c.m.}$ —— скорость центра масс системы, k_b — константа Больцмана.

Напряжения. В данной работе исследовалась эволюция упругопластической ударной волны и её распад на пластическую и упругую части. Волна распространяется перпендикулярно плоскостям, которые определяются при построении кристаллической решетки. Эти плоскости задаются при помощи индексов Миллера.

Всего рассматривалось три различные модификации (здесь и далее под модификациями или ориентациями кристалла понимается набор плоскостей, очерченных при помощи индексов Миллера). В первой модификации у плоскостей следующие координаты: [1, 0, 0], [0, 1, 0], [0, 0, 1] (плоскости, перпендикулярно которым распространяется воздействие от ударной волны вдоль осей X, Y, и Z соответственно). Координаты второй модификации — [1, 1, 0], [–1, 1, 0], [0, 0, 1]; третьей — [1, 1, 1], [–1, 1, 0], [–1, –1, 2]. Координаты плоскостей подбирались таким образом, чтобы ударная волна воздействовала на вещество во всех трех направления, то есть, чтобы полностью охватывало вещество. Далее, обозначения (100), (110) и (111) будут использоваться для описания ориентаций кристалли-ческой решетки — первой, второй и третьей соответственно.

Целью численных исследований являлось определение глубины прохождения пластической ударной волны при вышеописанных начальных условиях. Динамика распространения и затухания пластической ударной волны определялась путем исследования

эволюции продольных и поперечных напряжений. Формулы расчета напряжений по осям имеют следующий вид:

$$P_{xx} = \frac{k_b T_{xx} N}{V} + \frac{\sum\limits_{\substack{i=0,\\ j=0}}^{N} r_{xx} F_{xx}}{6V},$$

$$P_{yy} = \frac{k_b T_{yy} N}{V} + \frac{\sum\limits_{\substack{i=0,\\ j=0}}^{N} r_{yy} F_{yy}}{6V}, \qquad (10)$$

$$P_{zz} = \frac{k_b T_{zz} N}{V} + \frac{\sum\limits_{\substack{i=0,\\ j=0}}^{N} r_{zz} F_{zz}}{6V},$$

где r_{xx} означает расстояние между i и j частицей по оси X (для r_{yy} и r_{zz} по осям Y и Z соответственно), а F_{xx} означает силу воздействия от j частицы на i частицу по оси X (для F_{yy} и F_{zz} по осям Y и Z соответственно).

Ещё одним критерием определения глубины прохождения пластического фронта ударной волны, является локальный параметр центральной симметрии [23]:

$$Cs_k = \sum_{i<j} \left(1 + \left[\frac{r_{ik} - r_{ik}}{c \cdot r_k} \right]^8 \right)^{-1}, \qquad (11)$$

где r_{ik} — расстояние между i и k атомами, r_{jk} — расстояние между j и k атомами, r_k — радиус, вокруг которого ищутся пары, c — константа Линдеманна для критерия плавления (численно находится в диапазоне $0{,}1 \sim 0{,}2$) [24]. Этот параметр означает количество симметрично расположенных пар у каждого атома кристаллической решетки в некотором объеме. У пластически недеформированной кристаллической решетки алюминия этот параметр равен 6.

Пластические деформации возможны в том случае, когда прикладываемое к материалу напряжение больше предела упругости (предел Гюгонио) [25]. Сдвиговые напряжения пластически деформируют материал. Когда прекращаются сдвиговые напряжения, тогда же и прекращается возникновение пластических деформаций. Этот момент можно определить по значению параметра симметрии — если он не равен 6 в данной кристаллической решетке, значит, в рассматриваемой части вещества присутствуют пластические деформации. Момент затухания пластической ударной

волны можно найти, проследив за эволюцией продольных и поперечных напряжений. Когда они начинаются приближаться друг к другу, это означает, что фронт пластической ударной волны ослабляется и затухает.

Результаты моделирования Ударная волна, в процессе своей эволюции, совершает переход от плоской волны к сферической. Во время этой эволюции происходит распад упругопластической волны на пластическую и упругую часть с последующим затуханием пластической части [13]. Рис. 1 показывает данный процесс для ориентации кристалла (100), рис. 2 — для ориентации (110), рис. 3 — для (111).

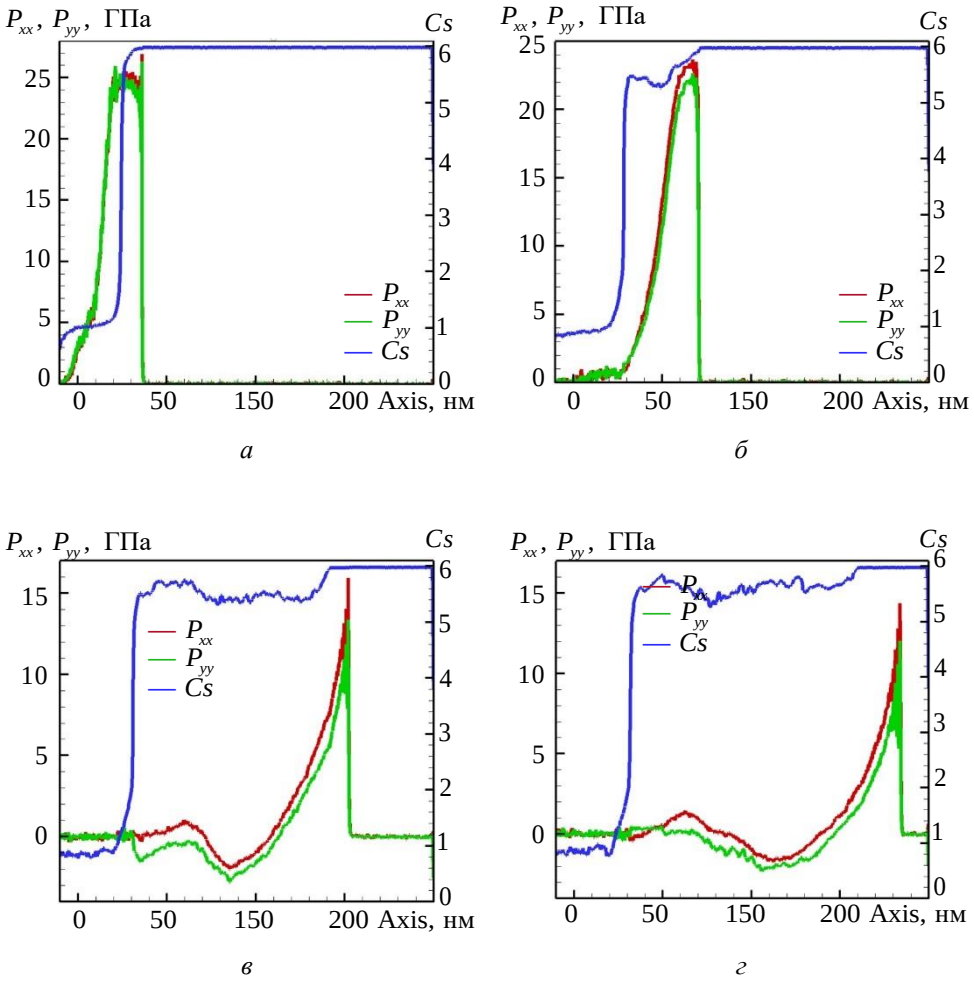


Рис. 1. Эволюция УВ для ориентации кристалла (100) при различных временах: *а* — 2,4 пс; *б* — 7,2 пс; *в* — 19,2 пс; *г* — 24 пс

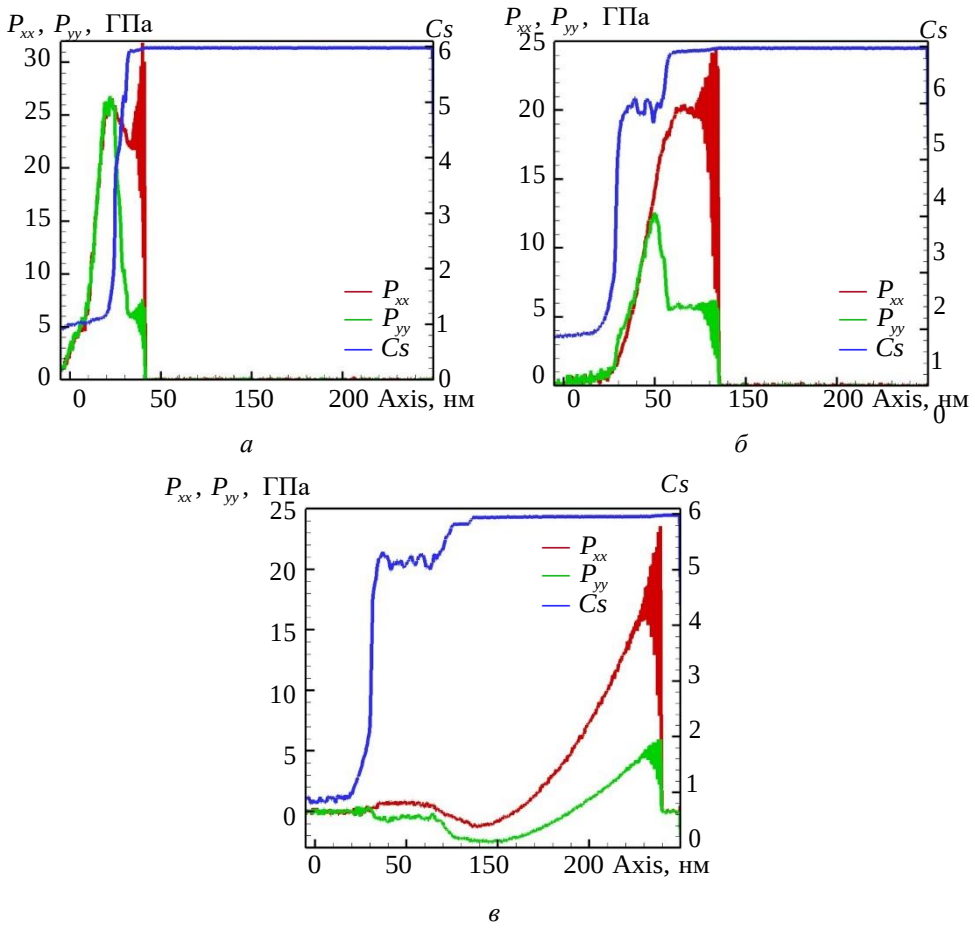
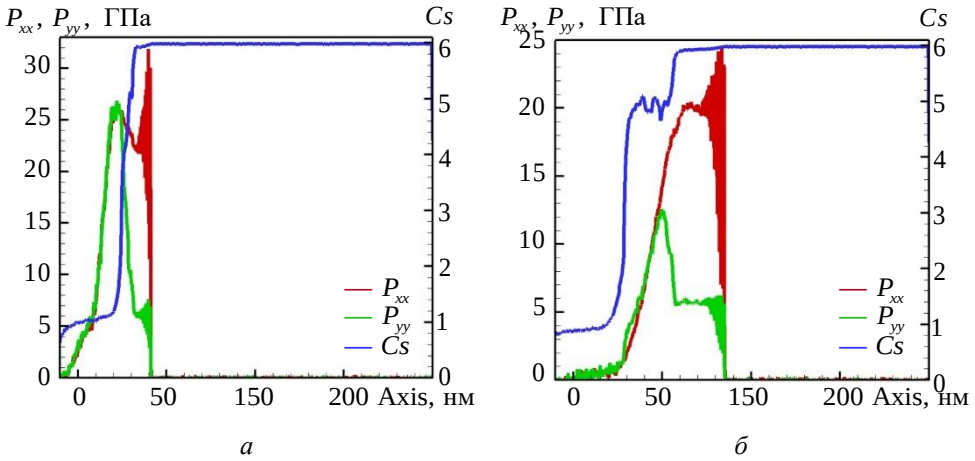
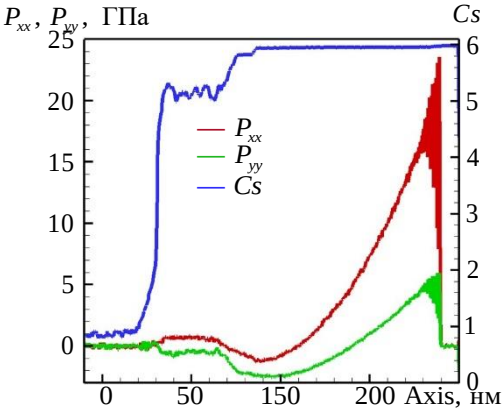


Рис. 2. Эволюция УВ для ориентации кристалла (110) на временах:
а — 2,4 пс; *б* — 7,2 пс; *в* — 19,2 пс

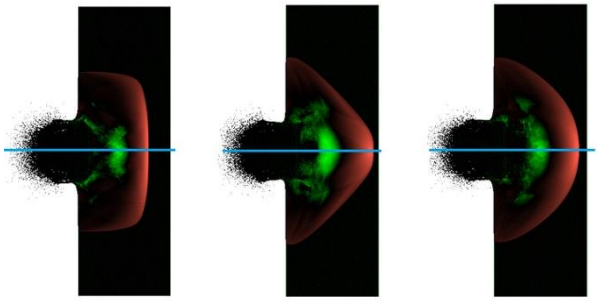




в

Рис. 3. Эволюция УВ для ориентации кристалла (111) на временах:
а — 2,4 пс; *б* — 7,2 пс; *в* — 19,2 пс

Значения параметров определялись вдоль линии симметрии, которая направлена вдоль оси X и проходит через центр пятна нагрева (синяя линия на рис. 4).



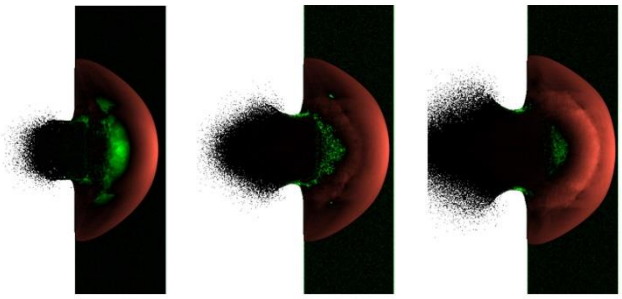
а *б* *в*

Рис. 4. 2D-картинки давления (общего) в разрезе плоскости XY, ориентации:
а — (100); *б* — (110); *в* — (111)

У ориентации кристалла (100) при численном моделировании не переход к сферическому ударному фронту ударной волны не обнаружен, поэтому в дальнейшем рассмотрены конфигурации кристаллов в следующих направлениях (110) и (111). Для этих двух ориентаций кристалла максимальная глубина залегания пластически деформированного слоя находится на примерно одинаковой глубине, из чего можно сделать вывод, что волна проходит полный цикл перехода от плоской к сферической. Однако у ориентации кристалла (111) наблюдается более сферический фронт волны, поэтому далее рассмотрена только эта ориентация.

Сравним влияние различных значений вложенных энергий на распространение ударной волны в момент времени, равный 19,2 пс.

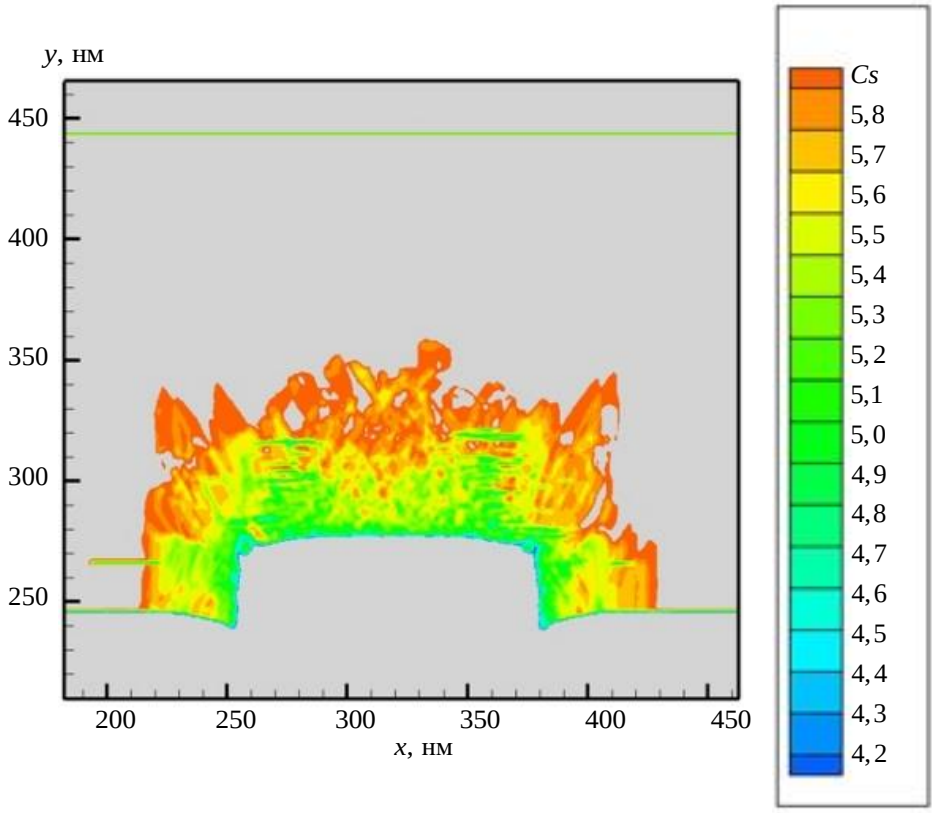
К этому моменту ударная волна достигает дальнего края пленки для всех вариантов значений вложенной энергии. На рис. 5 представлены 2D-карты давления.



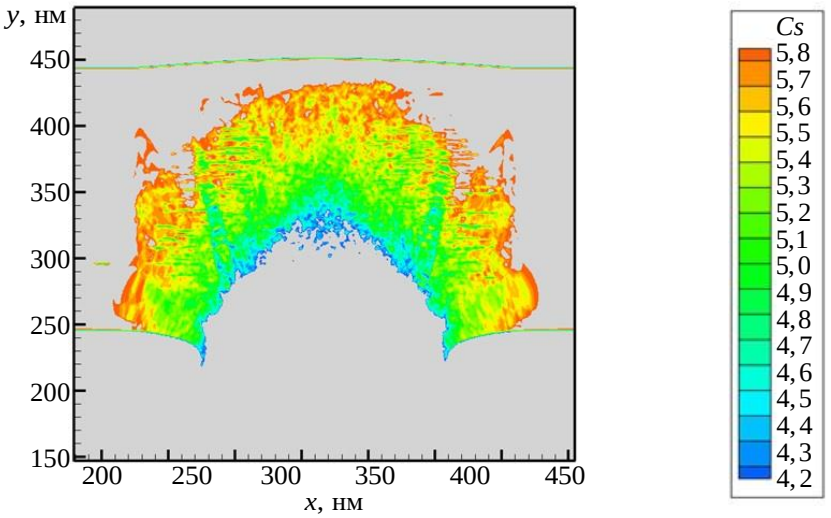
а *б* *в*

Рис. 5. 2D-карты давления для момента времени 19,2 пс с ориентацией кристалла (111) и вложенными энергиями:
а — 685,641 Дж/м^2; *б* — 1354,66 Дж/м^2; *в* — 2540,01 Дж/м^2

На рис. 6 показано распределение деформаций для двух вариантов вложенной энергии.



а



б

Рис. 6. 2D-карты параметра порядка *Cs* для энергий:
а — 686 Дж/м^2; *б* — 2540 Дж/м^2

Площадка, на которую воздействует единичный лазерный импульс, имеет площадь 200 нм^2 (100 нм в ширину и 20 нм в глубину). Так как площадка нагрева в глубину имеет размер 20 нм, то начало модификации происходит, начиная с 20 нм. Значение пороговой вложенной энергии находится на пересечении линий оси ординат и кривой, характеризующей рост глубины модификации кристаллической решетки (синяя точка). Немонотонный рост глубины и ширины области пластических деформаций происходит при превышении пороговой энергии в 188,36 Дж/м^2.

На рис. 7 показаны максимальные глубина и ширина области пластической модификации алюминия от вложенной энергии.

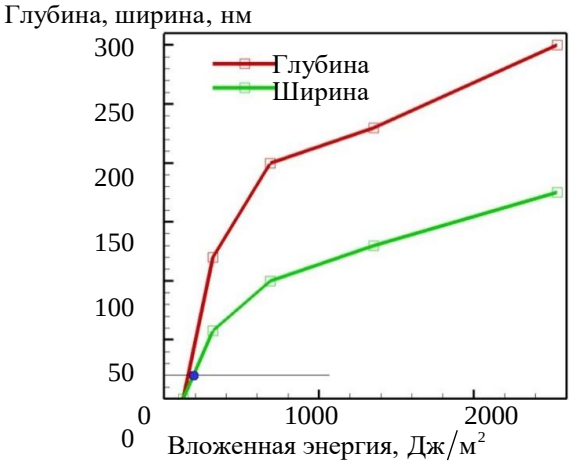


Рис. 7. Максимальные глубина и ширина области пластической модификации алюминия от вложенной энергии

Заключение. В данной работе исследовано влияние величины вложенной начальной энергии лазерного импульса на глубину залегания пластических деформаций. Проведено прямое атомистическое моделирование монокристалла алюминия при различных модификациях кристаллической решетки. Результаты расчетов позволяют построить зависимость максимальной ширины и глубины залегания пластических деформаций от вложенной энергии, а также определить её пороговое значение, при превышении которого, алюминий начинает пластически деформироваться. Данная зависимость имеет большое значение для планирования и проведения физических экспериментов по лазерному упрочнению, так как позволяет определить значения вложенной энергии для упрочнения материала на определенную глубину.

Работа выполнена в рамках госзадания ИАП РАН (Шепелев В.В., Фортова С.В.), госзадания ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН (Иногамов Н.А.) и госзадания ОИВТ РАН (Перов Е.А., Долуденко А.Н.).

ЛИТЕРАТУРА

[1] Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Nishihara K. New mechanism of the formation of the nanorelief on a surface irradiated by a femtosecond laser pulse. *JETP Letters*, 2008, vol. 87, pp. 423–427. DOI: 10.1134/S0021364008080079

[2] Inogamov N.A., Petrov Y.V., Khokhlov V.A., Anisimov S.I., Zhakhovsky V.V., Demaske B.J., Oleynik I.I., Ashitkov S.I., Faenov A.Y., Pikuz T.A., Skobelev I.Y., Agranat M.B., Fortov V.E., Emirov Y.N., Ishino M., Tanaka M., Hasegawa N., Nishikino M., Ohba T., Kaihori T., Ochi Y., Imazono T., Fukuda Y., Kando M., Kawachi T., Tamotsu S., Kato Y. Surface Nanodeformations Caused by Ultrashort Laser Pulse. *Engineering Failure Analysis*, 2015, vol. 47, pp. 328–337. DOI: 10.1016/j.engfailanal.2013.12.009

[3] Bonse J., Kruger J., Hohm S., Rosenfeld A. Femtosecond laser-induced periodic surface structures. *Journal of Laser Applications*, 2012, vol. 24, iss. 4, art. no. 042006. https://doi.org/10.2351/ 1.4712658

[4] Inogamov A., Zhakhovskii V.V., Khokhlov V.A. Dynamics of gold ablation into water. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2018, vol. 127, pp. 79–106. DOI: 10.1134/S1063776118070075

[5] Petrov Yu.V., Khokhlov V.A., Zhakhovsky V.V., Inogamov N.A. Hydrodynamic phenomena induced by laser ablation of metal into liquid. *Applied Surface Science*, 2019, vol. 30, pp. 285–297. DOI: https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.05.325

[6] Maciulevicius M., Vinciunas A., Brikas M., Butsen A., Tarasenka N., Tarasenko N., Raciukaitis G. On-line characterization of gold nanoparticles generated by laser ablation in liquids. *Physics Procedia*, 2013, vol. 41, pp. 531–538. DOI: https://doi.org/10.1016/j.phpro.2013.03.112

[7] Liao Y., Ye C., Cheng G.J. A review: Warm laser shock peening and related laser processing technique. *Optics & Laser Technology*, 2016, vol. 78, Part A, pp. 15–24. DOI: https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2015.09.014

[8] Kim J., Kim Y., Kim J. Effects of simulation parameters on residual stresses for laser shock peening finite element analysis. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2013, vol. 27, pp. 2025–2034. DOI: 10.1007/s12206-012-1263-0

[9] *LSP Technologies: Introduction to Laser Peening.* URL: https://www.lsptechnologies.com/wp-content/uploads/2019/03/Intro-to-Laser-Peening-Webinar.pdf

[10] Tsujino M., Sano T., Ogura T., Okoshi M., Inoue N., Ozaki N., Kodama R., Kobayashi K.F., Hirose A. Formation of High-Density Dislocations and Hardening in Femtosecond-Laser-Shocked Silicon. *Applied Physics Express*, 2012, vol. 5, no. 2, art. no. 022703. DOI: 10.1143/APEX.5.022703

[11] Matsuda T., Sano T., Arakawa K., Hirose A. Multiple-shocks induced nanocrystallization in iron. *Applied Physics Letters*, 2014, vol. 105, iss. 2, art. no. 021902. DOI: 10.1063/1.4890389

[12] Sano T., Eimura T., Kashiwabara R., Matsuda T., Isshiki Y., Hirose A., Tsutsumi S., Arakawa K., Hashimoto T., Masaki K., Sano Y. Femtosecond laser peening of 2024 aluminum alloy without a sacrificial overlay under atmospheric conditions. *Journal of Laser Applications*, 2017, vol. 29, iss. 1, art. no. 012005. DOI: https://doi.org/10.2351/1.4967013

[13] Иногамов Н.А., Перов Е.А., Жаховский В.В., Шепелев В.В., Петров Ю.В., Фортова С.В. Лазерная ударная волна: пластичность, толщина слоя остаточных деформаций и переход из упругопластического в упругий режим распространения. *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*, 2022, т. 115, № 1-2 (1), с. 80–88. DOI: 10.31857/S1234567822020033

[14] Hairer E., Lubich C., Wanner G. Geometric numerical integration illustrated by the Störmer–Verlet method. *Acta Numerica*, 2003, vol. 12, pp. 399–450. DOI:10.1017/S0962492902000144

[15] Препарата Ф., Шеймос М. *Вычислительная геометрия: введение*. Москва, Мир, 1989, 478 с.

[16] Киттель Ч. *Введение в физику твердого тела*. Москва, Наука, 1978, 791 с.

[17] Хеерман Д.В. *Методы компьютерного эксперимента в компьютерной физике*. Москва, Наука, 1990, 176 с.

[18] Волегов П.С., Герасимов Р.М., Давлятшин Р.П. Модели молекулярной динамики: обзор EAM-потенциалов. Часть 1: потенциалы для однокомпонентных систем. *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*, 2017, № 4, с. 214–237. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.14

[19] Волегов П.С., Герасимов Р.М., Давлятшин Р.П. Модели молекулярной динамики: обзор EAM-потенциалов. Часть 2. Потенциалы для многокомпонентных систем. *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*, 2018, № 2, с. 114–132. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.2.11

[20] Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials. *Applied Surface Science*, 2009, vol. 255, iss. 24, pp. 9592–9596. DOI: 10.1016/j.apsusc.2009.04.082

[21] Cheung P.S.Y. On the calculation of specific heats, thermal pressure coefficients and compressibilities in molecular dynamics simulations. *Molecular Physics*, vol. 33, iss. 2, pp. 519–526. DOI: 10.1080/00268977700100441

[22] Clausius R. On a mechanical theorem applicable to heat. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 1870, vol. 40, iss. 265, pp. 122–127.

[23] Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation. *Physical Review B*, 1998, vol. 58, art. no. 11085. DOI:https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.11085

[24] Уббеллоде А.Р. *Расплавленное состояние вещества*. Москва, Металлургия, 1982, 376 с.
[25] Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. *Ударно-волновые явления в конденсированных средах*. Москва, Янус-К, 1996, 408 с.

Статья поступила в редакцию 26.06.2023

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:
Перов Е.А., Жаховский В.В., Иногамов Н.А., Шепелев В.В., Фортова С.В., Долуденко А.Н.. Молекулярно-динамическое моделирование модификации алюминия лазерной ударной волной. *Математическое моделирование и численные методы*, 2023, № 4, с. 74-92.

Перов Евгений Александрович — аспирант Объединенного института высоких температур РАН. e-mail: eugenie051296@mail.ru

Жаховский Василий Викторович — канд. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник, Объединенный институт высоких температур РАН; главный исследователь, Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова. e-mail: 6asi1z@gmail.com

Иногамов Наиль Алимович — д-р. физ.-мат. наук, член-корр. РАН, ведущий научный сотрудник, Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН. e-mail: nailinogamov@gmail.com

Шепелев Вадим Владимирович — канд. физ.-мат. наук, доцент, старший научный сотрудник, Институт автоматизации проектирования РАН.
e-mail: vadim.aries@gmail.com
Фортова Светлана Владимировна — д-р. физ.-мат., ведущий научный сотрудник, Институт автоматизации проектирования РАН. e-mail: fortova@icad.org.ru

Долуденко Алексей Николаевич — канд. физ.-мат. наук, доцент, старший научный сотрудник, Объединенный институт высоких температур РАН. e-mail: adoludenko@gmail.com

Modification of aluminum by laser shock wave detected in atomistic modeling

© E.A. Perov[1], V.V. Zhakhovskiy[1,2], N.A. Inogamov[3], V.V. Shepelev[4], S.V. Fortova[4], A.N. Doludenko[1]

[1]Joint Institute of High Temperatures of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 125412, Russia
[2]Dukhov Automatics Research Institute, Moscow, 127055, Russia
[3]L.D. Landau Institute for Theoretical Physics RAS, Moscow, 142432, Russia
[4]Institute of Design Automation RAS, Moscow, 123056, Russia

Plastic deformations are the basis of such industrial technology as laser thermal hardening or laser pinning (LSP, laser shock peening). In this paper, the possibility of hardening the surface layer of an aluminum sample irradiated by a single femtosecond laser pulse is investigated by the method of classical molecular dynamics. Several initial

states of the film are simulated; three orientations of the crystal lattice are investigated — [1, 0, 0] (the first orientation of the crystal lattice), [1, 1, 0] (the second orientation of the crystal lattice), [1, 1, 1] (the third orientation of the crystal lattice). A numerical study of the effect of various values of the invested energy in the range from 120,98 J/m^2 to 2540,01 J/m^2 of a laser pulse on the depth of plastic deformations affecting the hardening of the material under study was carried out. The energy values were selected in such a way that the plastic front of the UV (shock wave) stopped before it reached the right boundary of the simulated film. If this condition is not observed, then the dependence cannot be considered correctly constructed, since the stretching wave reflected from the right boundary of the sample will slow down the plastic shock front, acting as an unloading wave. With the help of this dependence, the threshold value of the invested energy is determined, when exceeded, aluminum begins to deform plastically.

Keywords: *femtosecond laser pulse, shock wave, plastic deformations, molecular dynamic modeling, embedded energy, laser thermal hardening*

REFERENCES

[1] Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Nishihara K. New mechanism of the formation of the nanorelief on a surface irradiated by a femtosecond laser pulse. *JETP Letters*, 2008, vol. 87, pp. 423–427. DOI: 10.1134/S0021364008080079

[2] Inogamov N.A., Petrov Y.V., Khokhlov V.A., Anisimov S.I., Zhakhovsky V.V., Demaske B.J., Oleynik I.I., Ashitkov S.I., Faenov A.Y., Pikuz T.A., Skobelev I.Y., Agranat M.B., Fortov V.E., Emirov Y.N., Ishino M., Tanaka M., Hasegawa N., Nishikino M., Ohba T., Kaihori T., Ochi Y., Imazono T., Fukuda Y., Kando M., Kawachi T., Tamotsu S., Kato Y. Surface Nanodeformations Caused by Ultrashort Laser Pulse. *Engineering Failure Analysis*, 2015, vol. 47, pp. 328–337. DOI: 10.1016/j.engfailanal.2013.12.009

[3] Bonse J., Kruger J., Hohm S., Rosenfeld A. Femtosecond laser-induced periodic surface structures. *Journal of Laser Applications*, 2012, vol. 24, iss. 4, art. no. 042006. DOI: https://doi.org/10.2351/ 1.4712658

[4] Inogamov A., Zhakhovskii V.V., Khokhlov V.A. Dynamics of gold ablation into water. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2018, vol. 127, pp. 79–106. DOI: 10.1134/S1063776118070075

[5] Petrov Yu.V., Khokhlov V.A., Zhakhovsky V.V., Inogamov N.A. Hydrodynamic phenomena induced by laser ablation of metal into liquid. *Applied Surface Science*, 2019, vol. 30, pp. 285–297. DOI: https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.05.325

[6] Maciulevicius M., Vinciunas A., Brikas M., Butsen A., Tarasenka N., Tarasenko N., Raciukaitis G. On-line characterization of gold nanoparticles generated by laser ablation in liquids. *Physics Procedia*, 2013, vol. 41, pp. 531–538. DOI: https://doi.org/10.1016/j.phpro.2013.03.112

[7] Liao Y., Ye C., Cheng G.J. A review: Warm laser shock peening and related laser processing technique. *Optics & Laser Technology*, 2016, vol. 78, Part A, pp. 15–24. DOI: https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2015.09.014

[8] Kim J., Kim Y., Kim J. Effects of simulation parameters on residual stresses for laser shock peening finite element analysis. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2013, vol. 27, pp. 2025–2034. DOI: 10.1007/s12206-012-1263-0

[9] *LSP Technologies: Introduction to Laser Peening*. URL: https://www.lsptechnologies.com/wp-content/uploads/2019/03/Intro-to-Laser-Peening-Webinar.pdf

[10] Tsujino M., Sano T., Ogura T., Okoshi M., Inoue N., Ozaki N., Kodama R., Kobayashi K.F., Hirose A. Formation of High-Density Dislocations and Hardening in Femtosecond-Laser-Shocked Silicon. *Applied Physics Express*, 2012, vol. 5, no. 2, art. no. 022703. DOI: 10.1143/APEX.5.022703.

[11] Matsuda T., Sano T., Arakawa K., Hirose A. Multiple-shocks induced nanocrystallization in iron. *Applied Physics Letters*, 2014, vol. 105, iss. 2, art. no. 021902. DOI: 10.1063/1.4890389

[12] Sano T., Eimura T., Kashiwabara R., Matsuda T., Isshiki Y., Hirose A., Tsutsumi S., Arakawa K., Hashimoto T., Masaki K., Sano Y. Femtosecond laser peening of 2024 aluminum alloy without a sacrificial overlay under atmospheric conditions. *Journal of Laser Applications*, 2017, vol. 29, iss. 1, art. no. 012005. DOI: https://doi.org/10.2351/1.4967013

[13] Inogamov N.A., Petrov Y.V., Perov E.A., Zhakhovsky V.V., Shepelev V.V., Fortova S.V. Laser Shock Wave: The Plasticity and Thickness of The Residual Deformation Layer and The Transition From The Elastoplastic to Elastic Propagation Mode. *JETP Letters*, 2022, vol. 115, no. 2, pp. 71–78. DOI: 10.1134/S0021364022020047

[14] Hairer E., Lubich C., Wanner G. Geometric numerical integration illustrated by the Störmer–Verlet method. *Acta Numerica*, 2003, vol. 12, pp. 399–450. DOI:10.1017/S0962492902000144

[15] Preparata F., Shamos M. *Computational Geometry: An Introduction*. Springer New York, 1985, 390 c.

[16] Kittel Ch. *Introduction to solid state physics*. Ney York, Wiley, 1971, 766 p.

[17] Heermann D.W. *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*. Springer, 1986, 148 p.

[18] Volegov P.S., Gerasimov R.M., Davlyatshin R.P. Models of molecular dynamics: a review of EAM potentials. Part 1: Potentials for single-component systems. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2017, no. 4, pp. 214–327. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.14

[19] Volegov P.S., Gerasimov R.M., Davlyatshin R.P. Models of molecular dynamics: a review of EAM-potentials. Part 2. Potentials for multi-component systems. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2018, no. 2, pp. 114–132. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.2.11

[20] Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials. *Applied Surface Science*, 2009, vol. 255, iss. 24, pp. 9592–9596. DOI: 10.1016/j.apsusc.2009.04.082

[21] Cheung P.S.Y. On the calculation of specific heats, thermal pressure coefficients and compressibilities in molecular dynamics simulations. *Molecular Physics*, vol. 33, iss. 2, pp. 519–526. DOI: 10.1080/00268977700100441

[22] Clausius R. On a mechanical theorem applicable to heat. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 1870, vol. 40, iss. 265, pp. 122–127.

[23] Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation. *Physical Review B*, 1998, vol. 58, art. no. 11085. DOI:https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.11085

[24] Ubbelohde A.R. *The Molten State of Matter*. London, John Wiley & Sons, 1978, 454 p.

[25] Kanel G.I., Razorenov S.V., Utkin A.V., Fortov V.E. *Udarno-volnovye yavleniya v kondensirovannyh sredah* [Shock wave phenomena in condensed media]. Moscow, Janus-K Publ., 1996, 408 p.

Perov E.A., postgraduate student of the Joint Institute of High Temperatures of the Russian Academy of Sciences. e-mail: eugenie051296@mail.ru

Zhakhovsky V.V., Cand. Sc. (Phys. — Math.), Leading Researcher, Joint Institute of High Temperatures of the Russian Academy of Sciences; main researcher, Dukhov Automatics Research Institute. e-mail: 6asi1z@gmail.com

Inogamov N.A., Dr. Sc. (Phys. — Math.), Corresponding Member of the RAS, Leading Researcher, L.D. Landau Institute for Theoretical Physics RAS.
e-mail: nailinogamov@gmail.com

Shepelev V.V., Cand. Sc. (Phys. — Math.), Assoc. Professor, Senior Researcher, Institute of Design Automation RAS. e-mail: vadim.aries@gmail.com

Fortova S.V., Dr. Sc. (Phys. — Math.), Leading Researcher, Institute of Design Automation RAS. e-mail: fortova@icad.org.ru

Doludenko A.N., Cand. Sc. (Phys. — Math.), Assoc. Professor, Leading Researcher, Joint Institute of High Temperatures of the Russian Academy of Sciences.
e-mail: adoludenko@gmail.com