

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук

На правах рукописи

Григорьева Мария Сергеевна

**Исследование процессов плавления и абляции пористых материалов  
под действием лазерного излучения**

Специальность 1.3.19 –  
Лазерная физика

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва – 2024

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физическом институте им. П.Н. Лебедева РАН

**Научный руководитель:**

**Завестовская Ирина Николаевна**

доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник

**Официальные оппоненты:**

**Головань Леонид Анатольевич**

доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры общей физики и наноэлектроники физического факультета федерального государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

**Комленок Максим Сергеевич**

кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории лазерной оптики поверхности отдела светоиндуцированных поверхностных явлений Центра естественно-научных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук»

**Ведущая организация:**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук

Защита диссертации состоится «24» марта 2025 года в 10:00 часов на заседании диссертационного совета 24.1.262.01 на базе ФИАН по адресу: 119991, Москва, Ленинский проспект, 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Физического института имени П.Н. Лебедева РАН и на сайте института [www.lebedev.ru](http://www.lebedev.ru).

Автореферат разослан «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2025 г.

Ученый секретарь диссертационного совета 24.1.262.01,  
доктор физико-математических наук

А.С. Золотько

## Общая характеристика работы

### Актуальность темы исследования и степень ее разработанности.

Пористые материалы находят свое применение в различных областях технологий и промышленности – машиностроении, авиационной, нефтяной, химической, металлургической промышленности, микро- и оптоэлектронике, биотехнологиях и медицине. Они используются в качестве фильтрующих элементов в фильтрах тонкой очистки жидкостей и газов от примесей, конструкционных материалов при создании камер сгорания и охлаждаемых лопаток турбин, ионизаторов в ионных двигателях [1].

С развитием нанотехнологий нанопористые материалы, как подмножество наноструктурированных материалов, вызвали большой научный и технологический интерес. Они обладают уникальным набором свойств, которых нет у соответствующих объемных материалов, таких как высокая удельная площадь поверхности, проницаемость для жидкости, селективность по форме. Имеют большую пористость, а также очень упорядоченную, однородную структуру пор. Размер пор и степень пористости, а также различный состав поверхности в конечном итоге определяют потенциальное применение нанопористых материалов [2].

Области применения нанопористых материалов постоянно расширяются. Активными областями исследований и разработок с использованием нанопористых материалов являются микро- и наноэлектроника, оптоэлектронные технологии, солнечные батареи, медицина, биотехнологии и биосенсорика и другие [3-5].

Лазерная модификация является эффективным инструментом обработки пористых материалов для придания им требуемых свойств и улучшения эксплуатационных характеристик. Лазерная абляция является перспективным методом получения наночастиц с заданными свойствами при использовании пористых мишеней [6-12]. Исследование воздействия лазерного излучения на пористые материалы является актуальным, т.к. физические механизмы фазовых и структурных изменений в пористых материалах лежат в основе таких технологий, как отжиг, поверхностная модификация, аморфизация, абляция и др. При этом характер процессов, протекающих при взаимодействии лазерного излучения со сплошными и пористыми материалами, существенно отличен, и зависит, как от параметров лазерного излучения, так и от свойств самих пористых материалов.

Несмотря на большое количество экспериментальных и теоретических работ по лазерной модификации кристаллических материалов [13-18], практически мало

известно о закономерностях взаимодействия лазерного излучения с исходно пористыми мишенями, отсутствует комплексный анализ и теоретическое моделирование всех процессов, лежащих в основе этих технологий.

В этой связи становится актуальным систематическое изучение и выявления физических механизмов взаимодействия лазерных импульсов с пористыми материалами в зависимости от параметров лазерного излучения и свойств пористых наноструктур, и использования полученных результатов для оптимизации режимов лазерного воздействия с целью модификации поверхности с требуемыми свойствами или контролируемого и воспроизводимого производства наноструктур.

**Цель работы** – исследование физических процессов воздействия лазерного излучения на пористые материалы, лежащих в основе технологий их обработки, включая нагрев, плавление и абляцию, в зависимости от режима лазерного воздействия, термодинамических и структурных характеристик пористого материала.

Для достижения поставленной цели в диссертационной работе решались следующие задачи:

#### **I. Моделирование лазерной модификации пористых материалов:**

- построение модели проплавления пористого материала при лазерной поверхностной модификации;
- исследование динамики пор при лазерной поверхностной модификации; определение ширины модифицированного слоя;
- моделирование процесса нагрева и плавления пористого материала под воздействием лазерного излучения с учетом зависимости теплофизических величин материала от температуры и степени пористости.

#### **II. Моделирование лазерного плавления и абляции пористых полупроводников:**

- моделирование процесса лазерной абляции пористых полупроводников методом молекулярной динамики;
- определение количества аблированных атомов и порога абляции в зависимости от степени пористости материала и размера пор;
- моделирование процесса лазерного плавления пористых полупроводников с помощью комбинированной континуально-атомистической математической модели; определение порога плавления;

- экспериментальная апробация по определению порога абляции пленок пористого кремния, и сравнение с другими экспериментальными результатами.

Для решения поставленных задач был применён комплекс различных **методов исследования**. Для длительностей лазерных импульсов в наносекундном диапазоне моделирование осуществлялось с использованием уравнений теплопереноса, механики сплошных сред, уравнений движения, описывающих динамику сферической полости в жидкости. Для фемтосекундных лазерных импульсов применялся метод молекулярной динамики как самостоятельно, так и в комбинации с двухтемпературной моделью, описывающей динамику температуры и плотность электронно-дырочных носителей (комбинированная континуально-атомистической модель MD-nTTM). Моделирование и анализ результатов выполнялись с помощью специализированного программного обеспечения LAMMPS, MatLab, Tecplot, Origin, языка программирования Python с использованием библиотек NumPy, Pandas, Matplotlib. Экспериментальная апробация проводилась методом лазерной абляции в воздухе с использованием фемтосекундного Yb:KGW лазера и последующей сканирующей электронной микроскопией (СЭМ) полученных образцов.

**Научная новизна** результатов. В диссертационной работе **впервые**:

1. Разработана самосогласованная модель проплавления при лазерной модификации поверхности пористого материала на основе механизма схлопывания пор под действием сил поверхностного натяжения, с помощью которой определены оптимальная для модификации скорость плавления и толщина модифицированного слоя.
2. Разработана модель лазерной абляции пористых материалов на основе молекулярно-динамического подхода, позволившая установить зависимость порога и производительности абляции от пористости материала и размера пор в широком диапазоне длин волн лазерного излучения.
3. Расширена и применена континуально-атомистическая математическая модель MD-nTTM для исследования лазерного плавления пористого кремния, что позволило выявить механизмы, лежащие в основе технологий обработки пористых материалов.

**Практическая значимость работы.**

Полученные результаты позволяют дать рекомендации по оптимизации режимов лазерной модификации и абляции пористых материалов в зависимости от

характеристик материала (пористости, размера пор) и параметров лазерного излучения. Определена критическая скорость плавления, при которой возможно переплавление пористого материала с образованием однородной модифицированной поверхности, и толщина модифицированного слоя. Определены соотношения между порогами абляции и характеристиками материала (пористость и размер пор), обеспечивающие оптимальную производительность наночастиц методом лазерной абляции. Так, при фемтосекундной абляции пористых образцов Si с размером пор 8 нм минимальный порог абляции и максимальная производительность наблюдается при пористости подложки 60-65%.

**Личный вклад.** Все результаты, представленные в диссертационной работе, были получены автором лично или при его непосредственном участии. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, при этом вклад диссертанта был определяющим.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Модель проплавления при лазерной модификации поверхности пористого материала, основанная на механизме схлопывания пор под действием сил поверхностного натяжения, позволила определить оптимальную для модификации скорость плавления и толщину модифицированного слоя в зависимости от пористости и размера пор.
2. Динамика лазерного плавления пористого материала самосогласованным образом определяется давлением в расплавленном материале, которое определяет как движение расплава от поверхности к области схлопывания пор, так и затекание расплава в пустые поры, что приводит к уменьшению конечной толщины образца.
3. Модель лазерной абляции пористых материалов на основе молекулярно-динамического подхода позволила установить зависимость порога и производительности абляции от пористости материала и размера пор в широком диапазоне длин волн лазерного излучения. Для всех рассматриваемых длин волн ( $\lambda_{\text{итг}}=300$  нм,  $\lambda_{\text{итг}}=600$  нм,  $\lambda_{\text{итг}}=1030$  нм) порог лазерной абляции для пористых образцов снижается относительно монокристаллических.
4. Производительность лазерной абляции (количество аблированных атомов) зависит от пористости материала и размера пор. Для всех рассматриваемых длин волн ( $\lambda_{\text{итг}}=300$  нм,  $\lambda_{\text{итг}}=600$  нм,  $\lambda_{\text{итг}}=1030$  нм) при плотностях энергии близких к

пороговым эффективнее аблируются мишени с меньшим размером пор. Производительность снижается с увеличением пористости материала.

**Достоверность полученных результатов** обеспечена надёжностью применявшихся экспериментальных и теоретических методов, совпадением результатов аналитических и численных расчётов с экспериментальными данными и подтверждается апробацией работы в научных статьях и на конференциях.

**Апробация результатов работы и публикации.**

Результаты диссертационной работы доложены на 23 российских и международных конференциях:

- Всероссийский молодёжный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике, Самара, Россия, 2010;
- Asia-Pacific conference on fundamental problems of opto- and microelectronics (APCOM'2011), Moscow-Samara, Russia, 2011;
- Seventh International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications, Bordeaux, France, 2011;
- Симпозиум по когерентному оптическому излучению полупроводниковых соединений и структур, Москва, Россия, 2011, 2013, 2021
- 4th International Symposium on Transparent Conductive Materials, Crete, Greece, 2012;
- ICONO/LAT, Moscow, Russia, 2013
- International Symposium «Fundamentals of Laser Assisted Micro- and Nanotechnologies», St. Petersburg, 2013, 2016, 2022;
- Advanced Laser Technologies, Cassis, France, 2014; Samara, Russia, 2023; Vladivostok, Russia, 2024;
- Международной конференции «Лазерные, плазменные исследования и технологии», Москва, Россия, 2017, 2022, 2023;
- International Conference on Ultrafast Optical Science (UltrafastLight), Moscow, Russia, 2021, 2023;
- Международная молодёжная научная школа-конференция «Современные проблемы физики и технологий», Москва, Россия, 2022;
- Симпозиум «Физико-химические методы исследования бионаносистем для медицины», Дагомыс, Россия, 2022

- I Международная научная конференция «Инновационные технологии ядерной медицины и лучевой диагностики и терапии», Москва, Россия, 2022;
- VII Международный симпозиум и молодежная школа «Инженерно-физические технологии биомедицины», Москва, Россия, 2022;

Материалы диссертационной работы опубликованы в 6 статьях в научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus; 13 тезисов и статей в сборниках докладов и трудов конференций. Список публикаций приведен на с. 24-26 автореферата.

Работа по исследованию механизмов плавления и абляции пористого кремния поддержана грантом РФФИ 20-02-00861 (2020–2022 гг.).

**Структура и объём работы.** Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и основных выводов, а также списка цитируемой литературы из 183 наименований. Общий объём работы составляет 143 страницы машинописного текста, включая 48 рисунков и 7 таблиц.

### **Основное содержание работы**

**Во введении** обоснована актуальность выбранной темы диссертации, определены цель работы и личный вклад, дан анализ научной новизны полученных результатов и их практической значимости, приведены положения, выносимые на защиту, и сведения об апробации.

**Первая глава** является обзором литературы по современному состоянию исследований в области взаимодействия лазерного излучения с пористыми средами. Раздел 1.1. посвящен структуре и свойствам пористых материалов, включая анализ зависимости теплофизических характеристик материалов от их пористости. В разделе 1.2. рассматриваются технологии модификации пористых материалов лазерным излучением с целью придания им требуемых свойств или улучшения эксплуатационных характеристик. Показано, что наличие пор влияет на характер лазерной обработки и требует исследования физических механизмов воздействия лазерного излучения на пористые материалы. В разделе 1.3. приводятся экспериментальные данные по лазерной абляции наноструктур пористого кремния, которые показывают снижение порога абляции пористых образцов по сравнению с монокристаллическими, а также возможное увеличение концентрации наночастиц по сравнению с абляцией из кристаллического кремния при одинаковых условиях облучения. На основании приведённого обзора сформулированы цель и постановка задачи диссертационного исследования.

Во **второй главе** рассмотрена лазерная поверхностная модификация пористых



пленок. Предложена самосогласованная модель проплавления при лазерной модификации поверхности пористого материала на основе механизма *схлопывания пор в расплавленном материале под действием сил поверхностного натяжения*. Предполагалось, что при плавления пористой пленки лазерным излучением на движущемся фронте плавления образуются пустые изолированные друг от друга пузырьки с размерами, определяемыми первоначальными размерами дефектов – порами. Движение жидкости в образующемся расплаве можно характеризовать двумя пространственными масштабами. Во-первых, локальным движением на размерах масштаба размера поры, приводящем к затеканию расплавленного материала внутрь поры и ее схлопыванию. Во-вторых, затекание материала внутрь пор должно сопровождаться поступлением расплава от облучаемой поверхности к области схлопывания, и возникновением соответствующего усреднённого макроскопического движения. При этом предполагается, что локальное и усреднённое гомогенное движения расплава могут быть разделены. Усреднённое движение расплава определяется разностью давлений на свободной поверхности и заданной глубине. Скорость затекания расплава в отдельно рассматриваемую пору зависит от соотношения между капиллярным давлением и давлением вблизи поры. Таким образом, динамика затекания расплава в поры и его поступательное усреднённое движение от поверхности к области схлопывания оказываются связанными самосогласованным образом посредством давления на заданной глубине (рисунок 1).

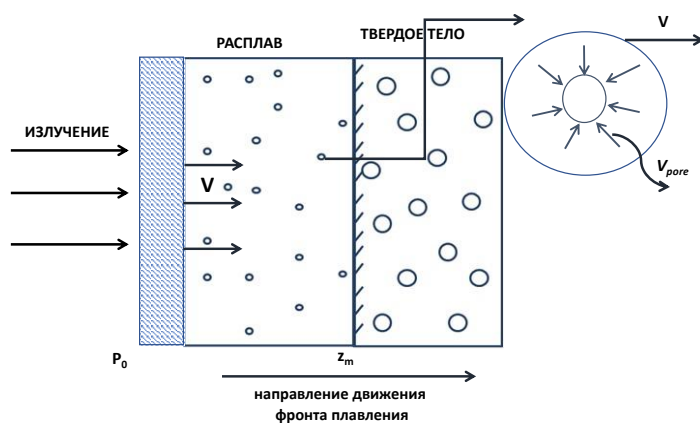


Рисунок 1 – Схематическое изображение постановки задачи о динамике схлопывания пор при лазерной поверхностной модификации пористых пленок.

Для описания движения границы поры считалось, что давлением пара (газа) внутри поры можно пренебречь, и рассматривать схлопывание пустой сферы, находящейся при некоем давлении  $P$ . В связи с тем, что в расплаве находится большое количество пузырьков, которые схлопываются под действием сил поверхностного натяжения, давление  $P$  позволяет в некотором усредненном виде учесть влияние

схлопывания соседних пузырьков на данный конкретный пузырек. Макроскопическое усредненное движение расплава описывается уравнениями (1-2). Движение границы сферической полости в движущемся элементе жидкости описывается уравнением (3) с начальными условиями (4).

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial V}{\partial t} + V \frac{\partial V}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} = 0 \quad (1) \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \rho V = 0 \quad (2) \\ R(t') \frac{d^2 R(t')}{dt'^2} + \frac{3}{2} \frac{dR(t')^2}{dt'} + \frac{2\sigma}{\rho R(t')} + \frac{4\mu}{\rho R(t')} \frac{dR(t')}{dt'} = -\frac{P}{\rho} \quad (3) \\ R(0) = R_0, \quad \dot{R}(0) = 0 \quad (4) \end{array} \right.$$

где  $V$  – усреднённая скорость движения расплава,  $\rho$  – средняя плотность пористого материала,  $P$  – давление внутри расплава,  $R$  – радиус поры,  $t'$  – время после прохождения через пору фронта плавления,  $\sigma$  – коэффициент поверхностного натяжения,  $\mu$  – динамическая вязкость,  $R_0$  – начальный радиус пор.

Таким образом, система уравнений (1-4), самосогласованным образом посредством давления на заданной глубине определяет динамику схлопывания пор в расплаве и его поступательное усреднённое движение от поверхности к области схлопывания.

В квазистационарном случае, при котором скорость фронта плавления и соответственно скорость движения расплава постоянны, и расплав представляет собой идеальную несжимаемую жидкость, из уравнений (1) и (2) в приближении первого порядка малости по  $\Phi$  получено выражение для давления  $P$ :

$$P = P_0 - \rho_0 \cdot V_m^2 \cdot \Phi, \quad (5)$$

где  $P_0$  – давление на свободной поверхности,  $V_m$  – скорость движения фронта плавления (скорость плавления),  $\rho_0$  – плотность материала в отсутствии пор,  $\Phi = 1 - \rho/\rho_0$  – пористость материала.

Из (5) видно, что давление в расплаве вблизи фронта плавления меньше, чем на свободной поверхности, на величину  $\rho_0 V_m^2 \Phi$ , что обеспечивает приток расплавленного материала от поверхности к фронту плавления. Давление  $P$  входит в уравнение (3) в качестве внешнего давления, под которым находится пора в расплаве.

В рамках разработанной модели из численного решения уравнения (3) было найдено изменение радиуса пор в зависимости от расстояния до фронта плавления,

нормированного на полную ширину области схлопывания пор (рисунок 2). Полученная зависимость показывает, что в процессе плавления происходит изменение пористости материала от начальной пористости  $\Phi(0) = \Phi_0$  на фронте плавления до нуля  $\Phi(1) = 0$  на поверхности расплава. Таким образом, предложенная модель описывает случай, когда влияние сил поверхностного натяжения приводит к полному схлопыванию пор.

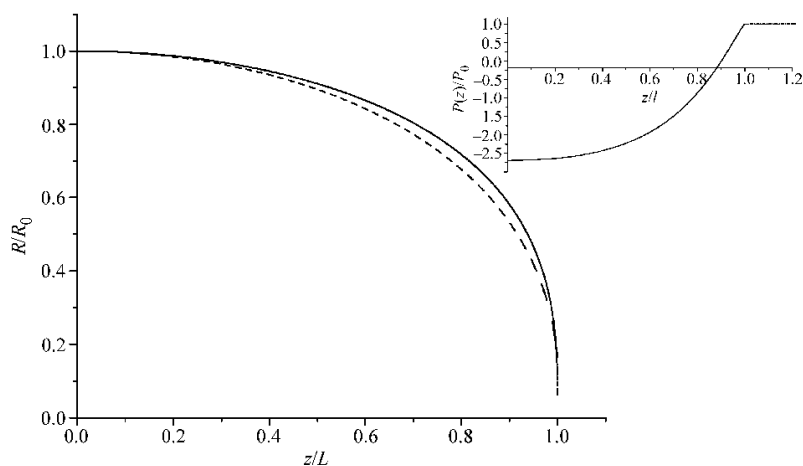


Рисунок 2 – Изменение радиуса пор в зависимости от расстояния до фронта плавления (сплошная линия – численное решение, пунктирная линия – аналитическая аппроксимация функцией вида  $\tilde{y} = (1 - u^2)^{\frac{7}{18}}$ ). Координата  $z/L=0$  соответствует положению фронта плавления, область справа от  $z/L=0$  – область расплава,  $z/L=1$  – поверхность расплава. Вкладка – изменение давления в области схлопывания пор в зависимости от расстояния до фронта плавления.

*Ширина области схлопывания  $L$*  – это некоторая конечная область расплава, в которой происходит изменение размера пор от начального радиуса  $R_0$  до их полного схлопывания. Физический смысл области схлопывания состоит в том, что она показывает, какой слой покрытия может быть модифицирован (избавлен от пор) при определенных параметрах лазерного излучения и физических свойствах материала. В общем случае она является универсальной функцией, зависящей от отношения скорости плавления и критической скорости  $V_m/V_{cr}$ , при приближении  $V_m$  к  $V_{cr}$  размер данной области увеличивается (рисунок 3).

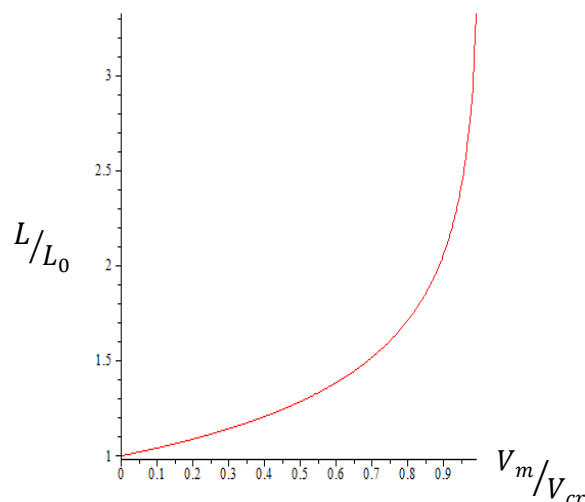


Рисунок 3 – Зависимость ширины области схлопывания пор от отношения  $V_m/V_{cr}$

В случае, когда расплав представляется как идеальная несжимаемая жидкость, а внешнее давление мало по сравнению с капиллярным, *ширина модифицированного слоя*  $L$  может быть определена аналитически, как  $L = u_0 L_0$ , где  $u_0$  – безразмерный ко-

эффициент, равный  $\sim 1,31$ ,  $L_0 = \sqrt{\rho_0 V_m^2 R_0^3 / 2\sigma}$ ,  $R_0$  – начальный радиус пор.

Во вкладке на рисунке 2 приведено изменение давления в области схлопывания пор в зависимости от расстояния до фронта плавления. Согласно разработанной модели поведение давления в расплаве определяется пористостью материала, а перепад давления в зоне схлопывания пропорционален  $V_m^2 \Phi_0$ . При движении от поверхности материала к фронту плавления внешнее давление падает пропорционально росту пористости. При рассматриваемой скорости плавления и исходной пористости в зоне схлопывания реализуются отрицательные значения давления. Из равенства отрицательного давления в расплаве и капиллярного давления определена *критическая скорость плавления*, зависящая от пористости материала и размера пор, при которой лазерная модификация поверхности пористого материала происходит за счет схлопывания пор:

$$V_{cr} = \sqrt{2\sigma / \Phi_0 \rho_0 R_0} \quad (6)$$

Впервые исследован процесс нагрева и плавления пористого материала под воздействием лазерного излучения с учетом зависимости теплофизических величин материала от температуры и степени пористости. Рассматривалась пористая пленка индия, расположенная на медной подложке, толщина которой много больше толщины пленки. Параметры задачи – толщина пленки  $h=2,7$  мкм, пористость пленки  $\Phi=0,5$ ,

средняя плотность падающей энергии  $q=0,1$  Дж/см<sup>2</sup>, длина волны лазерного излучения  $\lambda_{\text{irr}}=1,06$  мкм длительность импульса  $\tau_p=6,5$  нс [19].

Тепловая модель данного процесса может быть описана с помощью системы одномерных уравнений теплопроводности для полубесконечного пространства и построена с учетом порогового изменения степени пористости от исходного значения в твердой фазе до нуля в расплаве в следствии схлопывания пор под действием сил поверхностного натяжения:

$$\begin{cases} c_{In}(T, \Phi)\rho_{In}(\Phi) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \lambda_{In}(T, \Phi) \frac{\partial T}{\partial z}, t < \infty, 0 \leq z \leq h \\ c_{Cu}\rho_{Cu} \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{Cu} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, t < \infty, z > h \\ -\lambda_{In}(T, \Phi) \frac{\partial T}{\partial z}(0, t) = \begin{cases} Aq, 0 < t < \tau_p \\ 0, t > \tau_p \end{cases} \\ \lambda_{In}(T, \Phi) \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=h-0} = \lambda_{Cu} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=h+0} \\ T(z, 0) = T_i \\ 0 < z < \infty \end{cases} \quad (7)$$

где  $c$  – удельная теплоемкость материала,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности материала,  $\rho$  – плотность вещества,  $A$  – поглощательная способность материала,  $T_i$  – начальная температура,  $h$  – толщина пленки индия,  $\tau_p$  – длительность лазерного импульса,  $q$  – плотность потока лазерного излучения,  $\Phi$  – пористость пленки.

В системе уравнений (7) теплофизические величины индия зависят от температуры и пористости материала, теплофизические величины меди считались постоянными. Аналитические зависимости теплоемкости и теплопроводности индия от температуры были получены из анализа экспериментальных данных [20-21]. Зависимости теплофизических величин и плотности индия от пористости  $\Phi$  определялись как:

$$\begin{aligned} C &= C_0(1 - \Phi) - \text{удельная теплоемкость} \\ \lambda &= \lambda_0 \frac{2(1 - \Phi)}{2 + \Phi} - \text{коэффициент теплопроводности} \\ \rho &= \rho_0(1 - \Phi) - \text{плотность} \end{aligned}$$

где  $C_0$ ,  $\lambda_0$  и  $\rho_0$  – удельная теплоемкость, коэффициент теплопроводности и плотность индия при  $\Phi=0$  соответственно.

Показано, что наличие пор приводит к увеличению температуры поверхности пленки, глубины проплавления, а также времени жизни расплава, по сравнению со сплошным материалом при прочих равных условиях. Глубина проплавления

пористой пленки индия, толщиной 2,7 мкм, при средней плотности падающей энергии 0,1 Дж/см<sup>2</sup> увеличилась на 40% относительно глубины проплавления сплошного материала (рисунок 4). При этом полное проплавление пористой пленки происходит при плотностях энергий > 0,3 Дж/см<sup>2</sup>.

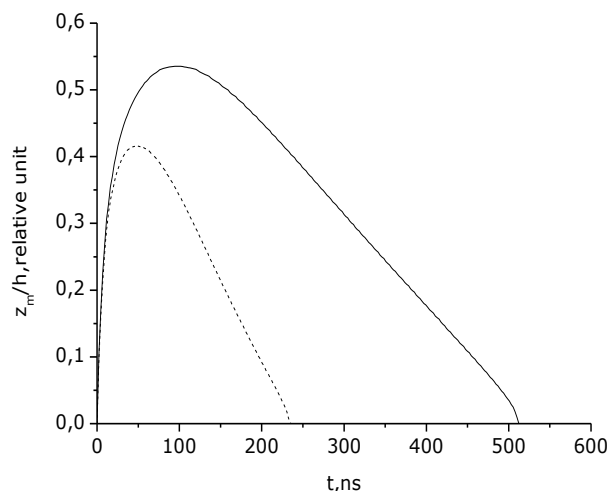


Рисунок 4 – Глубина проплавления пленки индия. Сплошная линия – с учетом температурной зависимости теплофизических величин и пористости материала, штрихованная линия – только учет температурной зависимости теплофизических величин индия.

Время жизни расплава с учетом пористости материала увеличилось в 2 раза. Из решения тепловой задачи оценена скорость плавления пленки индия с пористостью  $\Phi=0,5$  и размерами дефектов  $R_0=10^{-4}$  см. Она составила  $V_m=1,5 \cdot 10^3$  см/с, что меньше критической скорости плавления пористого материала  $V_{cr}=1,7 \cdot 10^3$  см/с, определяемой по формуле (6), для параметров эксперимента [19]. При этом ширина переплавляемого слоя есть  $L = 1,6 \cdot 10^{-4}$  см. Таким образом, при рассматриваемых режимах лазерной поверхностной модификации возможно ожидать переплавления пористого материала с удалением пор и образованием однородной модифицированной поверхности. Проведенные исследования и установленная зависимость критической скорости плавления от режима лазерного воздействия и пористости материала, а также размера пор, позволяет оптимизировать режимы лазерной модификации для различных пористых материалов.

Результаты второй главы опубликованы в работах [А1-А3] из списка публикаций.

**Глава третья** посвящена исследованию механизмов лазерной абляции наноструктур пористого кремния. Впервые проведено моделирование процесса лазерной абляции пористого Si с учетом степени пористости мишени и размера пор в широком диапазоне длин волн (от УФ до ИК диапазона) на основе метода молекулярной

динамики. Для расчетов использовался свободный пакет для классической молекулярной динамики *LAMMPS*. Для длин волн  $\lambda_{\text{irr}}=300$  нм и  $\lambda_{\text{irr}}=600$  нм моделирование проводилось на площади  $10 \times 10 \times 100$  элементарных ячеек (область подложки составляла  $10 \times 10 \times 50$  элементарных ячеек). Для длины волны  $\lambda_{\text{irr}}=1030$  нм размер области моделирования составлял  $20 \times 20 \times 100$  элементарных ячеек (область подложки –  $20 \times 20 \times 50$  элементарных ячеек). Расположение атомов соответствовало решетке монокристаллического кремния с постоянной решетки 5.43 Å. Граничные условия — периодические вдоль осей  $x$  и  $y$ . В качестве потенциала взаимодействия был выбран трехчастичный потенциал Терсоффа [22]. Шаг по времени составлял 1 фс. Поглощение моделировалось мгновенным изменением температуры атомов с определенными координатами и рассчитывалось на основе коэффициентов однофотонного [23] и двухфотонного поглощения для кремния [24-25], и термодинамических характеристик. Предполагалось полное поглощение падающего лазерного импульса, поэтому поток рассматривался как поглощенный поток (отражение не учитывалось). Считалось, что абляция выполняется в вакууме без образования оксидного слоя на поверхности. Для *реализации пористой структуры кремния и распределения температуры* были написаны дополнительные программы на языке программирования *Python*. Поры генерировались случайным удалением атомов из структуры  $c\text{-Si}$  в соответствии с логнормальным распределением. Для длин волн ультрафиолетового и видимого спектрального диапазона температурный профиль соответствовал однофотонному поглощению. Исходя из определения пористости, коэффициент однофотонного поглощения для пористого кремния определялся следующим образом:  $\alpha = \alpha_0(1 - \Phi)$ , где  $\alpha_0$  – коэффициент однофотонного поглощения при  $\Phi=0$ . Для  $\lambda_{\text{irr}}=1030$  нм, соответствующей энергии фотона ниже ширины запрещенной зоны  $c\text{-Si}$  ( $E_g=1,1$  эВ при комнатной температуре), двухфотонное поглощение может быть основным механизмом поглощения при лазерном облучении [26]. При моделировании использовался температурный профиль при двухфотонном поглощении. Стоит отметить, что коэффициент двухфотонного поглощения пористого кремния недостаточно хорошо изучен для всего диапазона пористостей, что затрудняет его учет при моделировании лазерной абляции. Для получения аналитической зависимости коэффициента двухфотонного поглощения от пористости материала была проведена интерполяция экспериментальных данных из работы [25].

Моделирование проводилось для определения *количества аблированных атомов* и *порога абляции* в зависимости от степени пористости материала и размера пор.

Атомы Si считались аблированными, если их расстояние от поверхности подложки превышает 1 нм (над оранжевой линией на рис. 5). На рисунке 5 изображены мишени до и после облучения лазерным импульсом, превышающим порог абляции – рис.5а и 5b – сплошной кремний (с-Si), рис. 5c и 5d – пористый кремний (PSi).

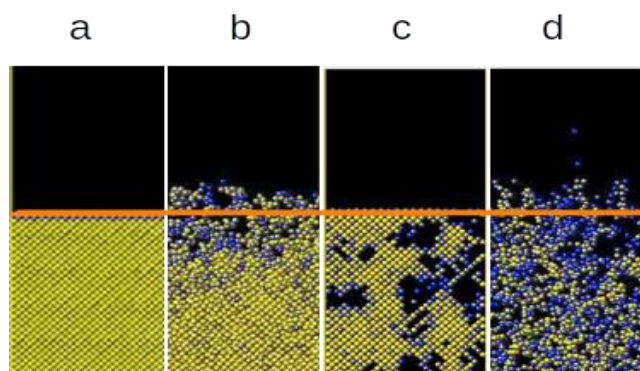


Рисунок 5 – Изображения мишени с-Si до (а) и после (b) лазерного импульса с интенсивностью, превышающей порог абляции; (c) и (d) изображения иллюстрируют абляцию мишени из PSi. Атомы выше оранжевой линии считаются удаленными. Атомы в кристаллической решетке и несогласованные атомы окрашены в желтый и синий цвета соответственно.

На рисунке 6 представлены зависимости числа аблированных атомов от пористости мишени для  $r_0$ , равного 1,2 и 2,5 нм, и длин волн лазерного излучения  $\lambda_{\text{irr}}=300$  нм и 600 нм.

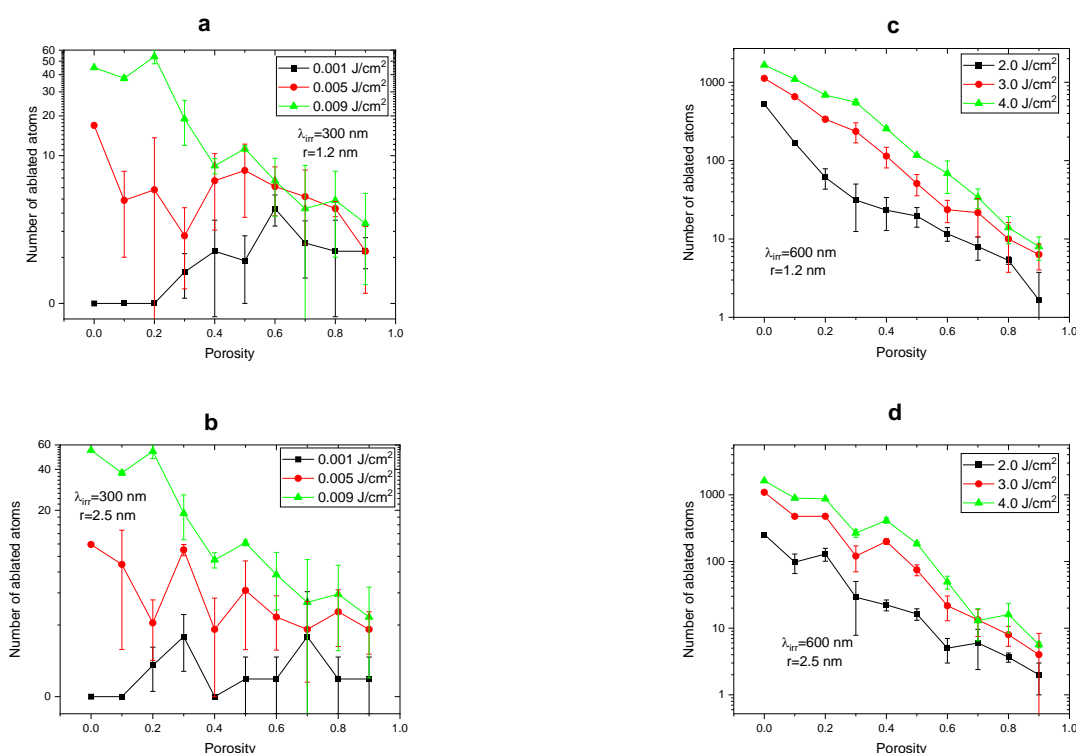


Рисунок 6 – Зависимость количества аблированных атомов от пористости мишени:  $\lambda_{\text{irr}}=300$  нм,  $r_0=1.2$  нм (а),  $\lambda_{\text{irr}}=300$  нм,  $r_0=2.5$  нм (b),  $\lambda_{\text{irr}}=600$  нм,  $r_0=1.2$  нм (c),  $\lambda_{\text{irr}}=600$  нм,  $r_0=2.5$  нм (d). Погрешности показывают дисперсию в течение трех экспериментов со случайным расположением пор.



Моделирование показало существенную разницу в плотности энергии, которая необходима для абляции одного и того же количества материала при облучении лазерным излучением УФ, видимого и ИК диапазонов. Для  $\lambda_{\text{ИТТ}} = 600$  нм обнаружено уменьшение числа аблированных атомов с увеличением пористости мишени (см. рис. 6с и 7d). Аналогичная зависимость количества аблированных атомов от пористости мишени наблюдалась и для ИК диапазона ( $\lambda_{\text{ИТТ}}=1030$  нм). Наличие пор приводит к уменьшению скорости абляции, что может быть связано с затрудненным выходом атомов аблируемого вещества из-за наличия стенок пор. При облучении с малыми плотностями энергии (от 0,001 до 0,009 Дж/см<sup>2</sup> для УФ излучения) число аблированных атомов может увеличиваться с увеличением пористости подложки (рис. 6а и 6б).

Для исследования влияния размера пор на производительность абляции было проведено моделирование зависимости количества аблированных атомов от плотности энергии лазерного излучения при заданной пористости ( $\Phi = 0,5$ ) для двух размеров пор на длине волны  $\lambda_{\text{ИТТ}}=1030$  нм (рис. 7). Впервые установлено, что производительность абляции, определяющая эффективность технологий производства наночастиц, зависит от размера пор. При рассматриваемых размерах пор в 1 и 5 нм показано, что плотности энергии лазерного излучения вплоть до 0,06 Дж/см<sup>2</sup> вызывают более эффективную абляцию мишени пористого кремния с размерами пор 1 нм. Дальнейшее повышение плотности энергии приводит к существенному увеличению количества аблированных атомов с мишени, имеющей размеры пор 5 нм.

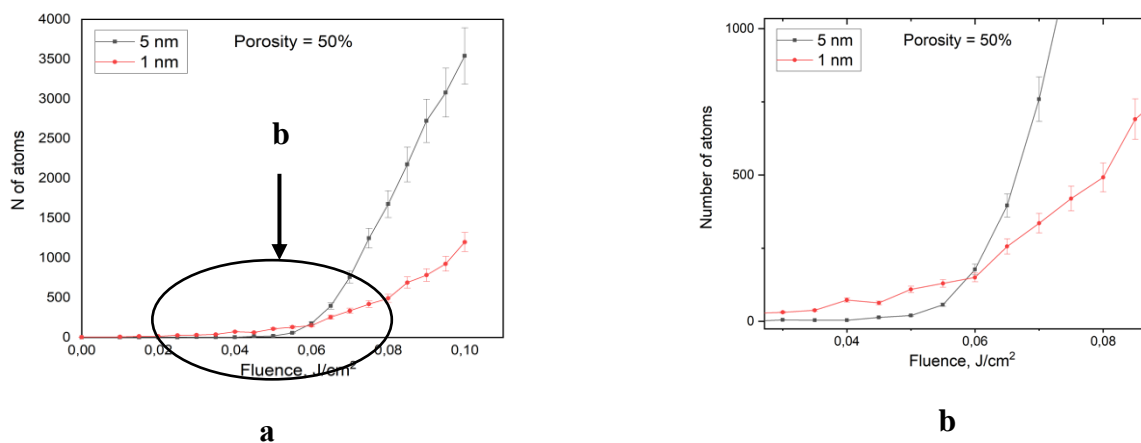


Рисунок 7 –Количество аблированных атомов от плотности энергии лазерного излучения ( $\lambda_{\text{ИТТ}}=1030$  нм) для образцов с размером пор 1 нм и 5 нм при пористости 50%.

Для определения *порога абляции* проводилась линейная аппроксимация зависимостей количества аблированных атомов от плотности энергии. Предполагалось, что значение порога абляции является минимальным значением плотности энергии, которое приводит к абляции не менее N атомов. Поскольку число атомов N колеблется

вблизи порога абляции, то порог рассчитывался как среднее значение плотности энергии, которое соответствует значению  $N$  от 1 до 5 (см. пунктирную линию на рис. 8).

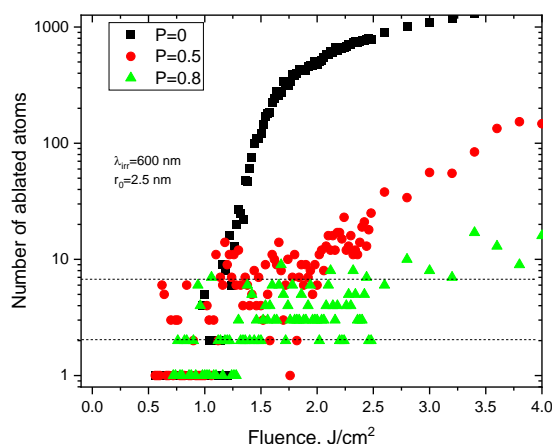


Рисунок 8 – Количество аблированных атомов для различных плотностей энергии при лазерном облучении с  $\lambda_{\text{лг}}=600$  нм и различной пористостью. Для представления значений в логарифмической шкале все числа сдвинуты до 1. Пунктирными линиями отмечена область определения порога абляции.

Установлено, что порог лазерной абляции пористых материалов зависит от пористости материала и размера пор. Для всех рассматриваемых длин волн наблюдалось снижение порога лазерной абляции для пористых образцов относительно монокристаллических. Так, при облучении с длиной волны  $\lambda_{\text{лг}}=300$  нм порог лазерной абляции снижается более чем в 3 раза с  $0,005$  Дж/см<sup>2</sup> ( $\Phi = 0$ ) до  $0,0015$  Дж/см<sup>2</sup> ( $\Phi = 0,8$ ) для пористого образца с размером пор 1,2 нм (рис. 9а). В случае облучения в видимом диапазоне ( $\lambda_{\text{лг}}=600$  нм) порог лазерной абляции снижается в 1,5 раза (с 1,8 до 1,25 Дж/см<sup>2</sup>) для размера пор 2,5 нм, в 2,3 раза (1,8 до  $0,75$  Дж/см<sup>2</sup>) – для пор 1,2 нм. При этом существенное падение начинается при  $\Phi > 0,5$  (см. рис. 9б).

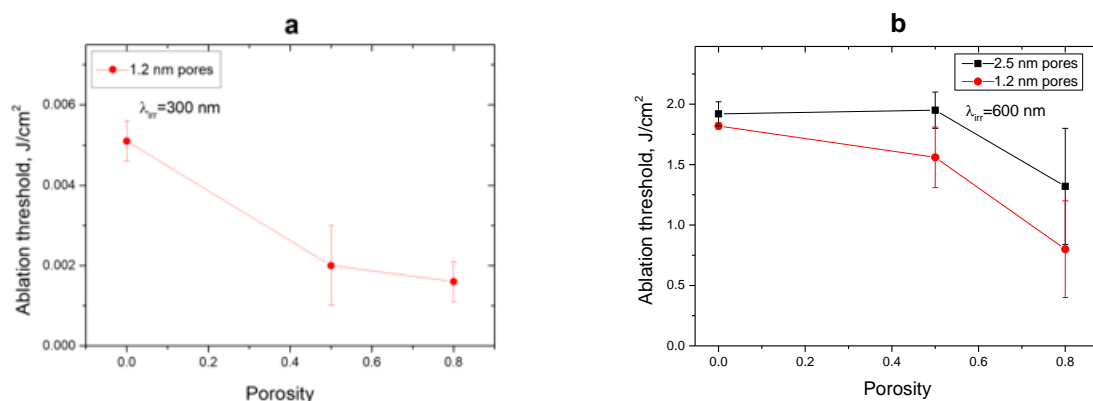


Рисунок 9 – Пороги абляции при облучении с длиной волны  $\lambda_{\text{лг}}=300$  нм (а) и  $\lambda_{\text{лг}}=600$  нм (б) в зависимости от пористости мишени.

При облучении с длиной волны  $\lambda_{\text{лг}}=1030$  нм порог лазерной абляции снижается более чем в 1,5 раза с  $0,03$  Дж/см<sup>2</sup> ( $\Phi = 0$ ) до  $0,0175$  Дж/см<sup>2</sup> ( $\Phi = 0,5$ ) для размера пор

1 нм. При дальнейшем увеличении пористости наблюдается рост порога абляции, чего не наблюдалось при облучении УФ и видимым диапазоном.

Экспериментальная апробация падения порога лазерной абляции для PSi относительно c-Si показала 50-процентное снижение порога абляции для мезопористых образцов при облучении фемтосекундными лазерными импульсами ( $\tau_p=270$  фс,  $\lambda_{\text{irr}}=1030$  нм) (рис.10). Порог абляции составил  $0,81\pm 0,04$  Дж/см<sup>2</sup> для c-Si и  $0,35\pm 0,06$  Дж/см<sup>2</sup> для PSi ( $\Phi=60\%$ ). Расчетное значение для PSi  $\sim 0,15$  Дж/см<sup>2</sup>. Моделирование при параметрах эксперимента (размер пор 8 нм) показало, что минимальный порог абляции и максимальная производительность наблюдается при пористости подложки 60-65%. Следует отметить, что полученные экспериментальные данные по снижению порога абляции пористых образцов относительно монокристаллических находятся в хорошем соответствии с экспериментальными результатами, полученными другой группой исследователей [11].

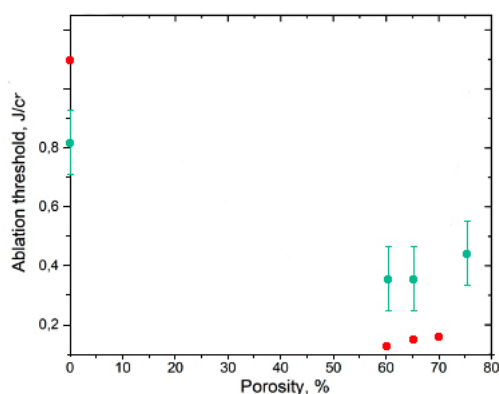


Рисунок 10 –Зависимость порога абляции от пористости для подложек пористого кремния с размером пор 8 нм: зеленый – экспериментальные значения, красный – расчетные значения.

Для изучения кинетики фазовых переходов и выявления физических механизмов, лежащих в основе технологий производства НЧ, впервые проведено моделирование процесса лазерного плавления сплошного и пористого Si с помощью комбинированной континуально-атомистической модели MD-nТТМ, которая сочетает в себе преимущества двух принципиально разных численных методов: молекулярной динамики для описания с атомарным разрешением кинетики неравновесных фазовых превращений, индуцированных лазером, и двухтемпературной модели (ДТМ). Модель MD-nТТМ учитывает динамически изменяющиеся термодинамические параметры мишени – давление, температуру и плотность. Для исследования пористых мишеней был разработан численный алгоритм, который явно учитывает изменение плотности по объему и динамическое изменение плотности носителей в ходе эволюции мишени.

Моделирование процесса плавления c-Si и PSi проводилось для образцов с размерами  $2,6 \times 2,6 \times 1000$  нм, которые были созданы и уравновешены при нормальных условиях ( $T = 300$  К,  $P = 0$  ГПа), при плотностях энергии  $0,24\text{--}0,32$  Дж/см<sup>2</sup>, длительности лазерного импульса  $270$  фс и длине волны  $\lambda_{\text{irr}}=800$  нм. Предполагалось моделирование материала в центре лазерного пятна. Толщина образца ( $\sim 1000$  нм) была выбрана достаточно большой, чтобы учесть лазерно-индуцированные процессы и избежать ее влияния на результаты моделирования. Пористость ( $\sim 33\%$ ) по объему была введена путем вырезания равноотстоящих пустых сфер диаметром  $2$  нм вдоль всей центральной оси образца.

Порог плавления определялся как плотность энергии, которая приводит к поверхностному плавлению до глубины максимум в несколько нанометров. Что предполагает быстрое продвижение фронта плавления на максимальную глубину с медленным процессом рекристаллизации в более длительном масштабе времени по гетерогенному механизму повторного затвердевания.

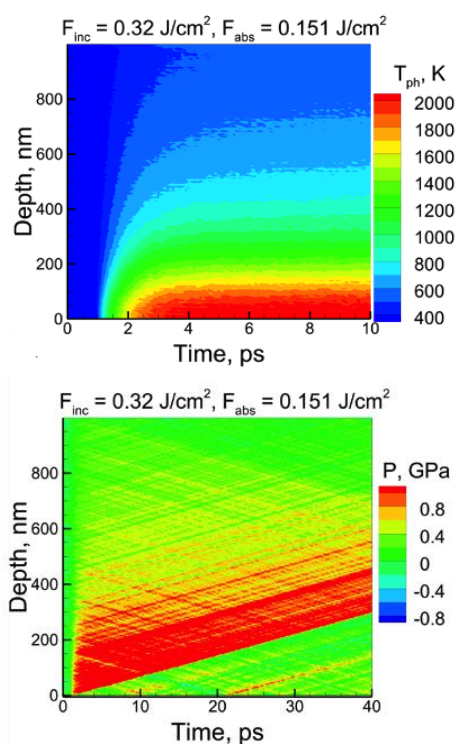


Рисунок 11 – (а) изменение температуры решетки, (б) давления внутри облученной мишени c-Si при облучении с падающим потоком  $0,32$  Дж/см<sup>2</sup> ( $\tau_p=270$  фс,  $\lambda_{\text{irr}}=800$  нм). Лазерный импульс направлен снизу.

На рисунке 11 представлены эволюция температурного поля во времени для кристаллической решетки (а) и давление внутри облученной мишени (б) для c-Si мишени при облучении с плотностью энергии  $0,32$  Дж/см<sup>2</sup>.

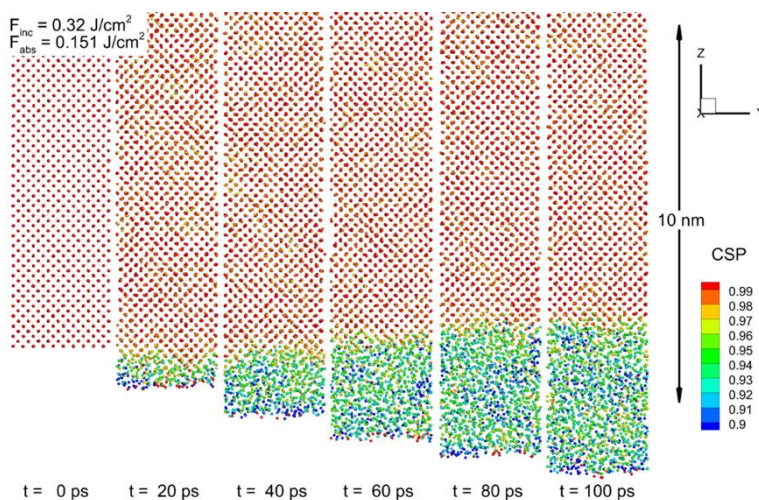
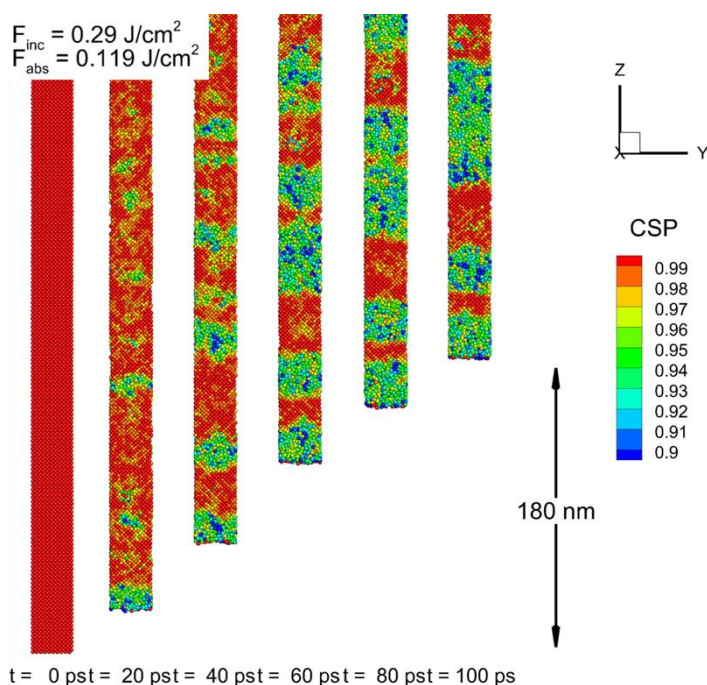


Рисунок 12 – Атомные конфигурации Si вблизи его поверхности ( $< 10$  нм) для времен  $0, 20, 40, 60, 80$  и  $100$  пс после воздействия лазерного импульса с плотностью энергии  $0,32$  Дж/см<sup>2</sup> ( $\tau_p=270$  фс,  $\lambda_{\text{irr}}=800$  нм). Цвет атомов соответствует их центральному параметру симметрии (CSP) для определения их локального порядка с эмпирически выбранным критерием между твердой (CSP  $> 0,97$ ) и жидкой (CSP  $< 0,97$ ) фазами. Лазерный импульс направлен снизу.

На рисунке 11 (а) видно, что к моменту времени 10 пс после импульса значение температуры выше 1750 К (превышающее значение равновесной температуры плавления 1683 К) достигается на глубине до 100 нм под поверхностью. Развитие гетерогенного фронта плавления изображено на рисунке 12, который показывает, что зарождение жидкой фазы, начиная с поверхности, обнаруживается только к 20 пс. Последующее продвижение границы раздела твердое тело – жидкость на более поздних временах достигает не более 3 нм. Обнаружено, что при достаточно близких значениях температуры решетки, полученных при плотности падающей энергии 0,3 Дж/см<sup>2</sup> (при превышении температуры плавления также на глубине до 100 нм), зародышеобразование жидкой фазы не происходит. Таким образом, порог плавления сплошной мишени c-Si, найденный в результате MD-нТТМ моделирования, равен ~ 0,32 Дж/см<sup>2</sup>.



t = 0 ps t = 20 ps t = 40 ps t = 60 ps t = 80 ps t = 100 ps

Рисунок 13 – Атомные конфигурации PSi с пористостью 33% до глубины 300 нм для моментов времени 0, 20, 40, 60, 80 и 100 пс после воздействия лазерного импульса с плотностью энергии 0,29 Дж/см<sup>2</sup> ( $\tau_p=270$  фс,  $\lambda_{\text{лп}}=800$  нм). Цвет атомов соответствует CSP для определения их локального порядка с эмпирически выбранным критерием между твердой (CSP > 0,97) и жидкой (CSP < 0,97) фазами. Лазерный импульс направлен снизу.

При облучении пористого образца с пористостью 33% по объему наблюдается иная эволюция мишени (рис. 13). Наличие пор снижает порог плавления до 0,29 Дж/см<sup>2</sup> и время начала плавления с 20 пс (для c-Si) до 5 пс. После начала плавления наблюдается значительное уменьшение объема материала. Более быстрое начало процесса плавления является следствием накопления тепла (удержания температуры) в приповерхностном

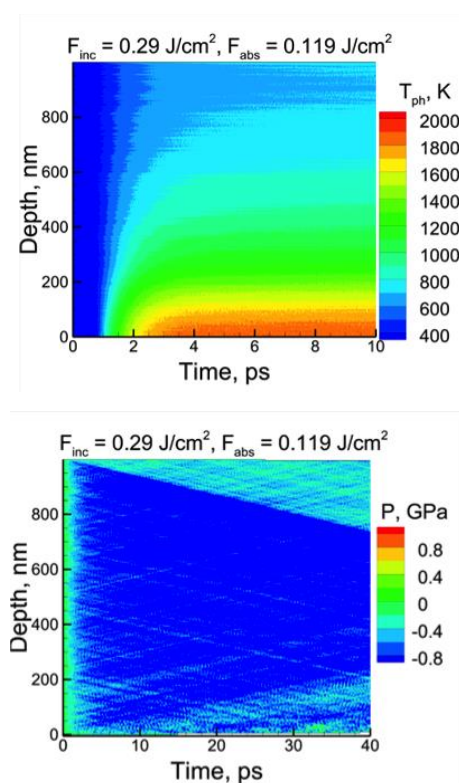


Рисунок 14 – (а) изменение температуры решетки, (б) давления внутри облученной мишени PSi при облучении с падающим потоком 0,29 Дж/см<sup>2</sup> ( $\tau_p=270$  фс,  $\lambda_{\text{лп}}=800$  нм). Лазерный импульс направлен снизу.

слое из-за ограниченной диффузии носителей и теплопередачи. Кроме того, наличие пор увеличивает площадь свободной поверхности, тем самым увеличивая возможность зарождения плавления по гетерогенному механизму. По сравнению со сплошной мишенью в пористой мишени не происходит накопления внутренних напряжений – любой возможный избыток внутренних напряжений, возникающий из-за быстрого нагрева, моментально релаксирует со скоростью звука в ближайших порах (см. рис. 14b). При лазерно-индуцированном плавлении пористого материала в расплаве возникает умеренное отрицательное давление, приводящее к усадке предповерхностного слоя и уменьшению объема материала (см. рис. 13.).

Результаты третьей главы опубликованы в работах [А4-А6] из списка публикаций.

**В заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы:

1. Разработана модель проплавления при лазерной модификации поверхности пористого материала на основе механизма схлопывания пор под действием сил поверхностного натяжения. Динамика лазерной модификации поверхности пористого материала самосогласованным образом определяется давлением в расплавленном материале, которое определяет как скорость усредненного гомогенного движения расплава от поверхности к области схлопывания пор, так и скорость затекания расплава в пустые поры.
2. Определена критическая скорость плавления, зависящая от пористости материала и размера пор, при которой лазерная модификация поверхности пористого материала происходит за счет схлопывания пор с образованием однородной модифицированной поверхности. Определена ширина слоя, который может быть модифицирован, при скорости плавления, меньше критической. Расчетные значения, полученные в рамках разработанной модели, имеют хорошее согласие с экспериментом. При  $q=0,1$  Дж/см<sup>2</sup>,  $\lambda_{\text{ит}}=1,06$  мкм,  $\tau_p=6,5$  нс, для индия с  $R_0=10^{-4}$  см и  $\Phi_0=0,5$  критическая скорость плавления составляет  $V_{cr}=1,7 \cdot 10^3$  см/с. Расчетная скорость плавления составляет  $V_m=1,5 \cdot 10^3$  см/с, ширина слоя есть  $L=1,6 \cdot 10^{-4}$  см.
3. Исследован процесс нагрева и плавления пористого материала под воздействием лазерного излучения с учетом зависимости теплофизических величин материала от температуры и степени пористости. Показано, что наличие пор приводит к увеличению температуры поверхности пленки, глубины

- проплавления ( $\sim$  на 40%), а также времени жизни расплава (в 2 раза), по сравнению со сплошным материалом при прочих равных условиях.
4. Проведено моделирование процесса лазерной абляции пористых материалов с учетом степени пористости мишени и размера пор в широком диапазоне длин волн на основе метода молекулярной динамики. Показано, что порог лазерной абляции пористых материалов зависит от степени пористости материала и размера пор. Для всех рассматриваемых длин волн ( $\lambda_{\text{ир}}=300$  нм,  $\lambda_{\text{ир}}=600$  нм,  $\lambda_{\text{ир}}=1030$  нм) наблюдалось снижение порога лазерной абляции для пористых образцов относительно монокристаллических, эффект более выражен для образцов с меньшим размером пор. При этом характер зависимости порога лазерной абляции зависит от длины волны лазерного излучения и механизмов поглощения.
  5. Установлено, что производительность абляции (количество аблированных атомов), определяющая эффективность технологий производства наночастиц, зависит от пористости материала и размера пор. Наблюдалось уменьшение количества аблированных атомов с увеличением пористости мишени при облучении лазерными импульсами. При плотностях энергии близких к пороговым эффективнее аблируются мишени с меньшим размером пор, дальнейшее повышение плотности энергии приводит к существенному увеличению количества аблированных атомов с мишеней, имеющих бóльшие размеры пор.
  6. Расширена и применена континуально-атомистическая математическая модель MD-nТТМ для исследования лазерного плавления пористого кремния. Выявлено, что в пористой мишени Si не происходит накопления внутренних напряжений, возникающих из-за быстрого нагрева, за счет мгновенной релаксации любых избыточных напряжений внутри пор. При лазерно-индуцированное плавлении PSi в расплаве возникает умеренное отрицательное давление, приводящее к усадке предповерхностного слоя и уменьшению объема материала.
  7. На основе континуально-атомистической модели MD-nТТМ установлено снижение порога плавления и времени начала процесса плавления для пористой мишени Si относительно монокристаллической при облучении ультракороткими импульсами ( $\lambda_{\text{ир}}=800$  нм). Для случая c-Si порог плавления составил  $0,32$  Дж/см<sup>2</sup>, плавление приповерхностной области происходило к 20 пс. Для PSi порог плавления составил  $0,29$  Дж/см<sup>2</sup>, времени начала процесса плавления – 5 пс.

## Список публикаций по теме диссертации

### Статьи в журналах, индексируемых в международных базах данных

#### Web of Science, Scopus

- A1. **Григорьева М.С.**, Завестовская И.Н., Канавин А.П., Динамика схлопывания пор при лазерном отжиге поверхности металлов // Краткие сообщения по физике ФИАН. – 2014. – вып. 9. – с. 27-32 [переводная версия: Grigoryeva M.S., Zvestovskaya I.N., and Kanavin A.P. Pore collapse dynamics during laser annealing of metal surfaces // Bulletin of the Lebedev Physics Institute. – 2014. – Vol. 41, №. 9 – P. 260–263. – DOI: 10.3103/S1068335614090048].
- A2. **Grigoryeva M.S.**, Zvestovskaya I.N., and Kanavin A.P. Theoretical study of the heterogeneous films modified by the laser radiation // Physics Procedia. – 2015. – Vol. 71. – P. 196 – 201. – DOI: 10.1016/j.phpro.2015.08.374.
- A3. **Grigoryeva M. S.**, Zvestovskaya I.N., and Kanavin A.P. Laser annealing of porous defects in metals // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – Vol. 941. – P. 012032. – DOI: 10.1088/1742-6596/941/1/012032.
- A4. Kharin A.Yu., **Grigoryeva M.S.**, Zvestovskaya I.N. and Timoshenko V.Yu. Effect of silicon target porosity on laser ablation threshold: molecular dynamics simulation // Laser Physics Letters. – 2021. – Vol. 941. – P. 076001. – DOI: 10.1088/1612-202X/ac0914.
- A5. **Grigoryeva M.S.**, Kutlubulatova I.A., Lukashenko S.Yu., Fronya A.A., Ivanov D.S., Kanavin A.P., Timoshenko V.Yu. and Zvestovskaya I.N. Modeling of Short-Pulse Laser Interactions with Monolithic and Porous Silicon Targets with an Atomistic–Continuum Approach // Nanomaterials. – 2023. – Vol. 13. – P. 2809. – DOI: 10.3390/nano13202809.
- A6. **Григорьева М.С.**, Завестовская И.Н., Канавин А.П., Фроня А.А., Маврешко Е.И. Влияние пористости и размера пор кремниевой мишени на порог лазерной абляции // Краткие сообщения по физике ФИАН. – 2024. – вып. 9 – с. 9-18. [переводная версия: **Grigoryeva M.S.**, Zvestovskaya I.N., Kanavin A.P., Fronya A.A., Mavreshko E. I. Effect of porosity and pore size of a silicon target on the laser ablation threshold // Bulletin of the Lebedev Physics Institute. – 2024. – Vol. 51, №. 9 – P. 353–359. – DOI: 10.3103/S1068335614090048].

#### Публикации в сборниках трудов международных и всероссийских конференций:

- C1. **Золотых М.С.**, Завестовская И.Н., Канавин А.П., Тепловая модель лазерной поверхностной обработки тонких металлических пленок // VIII Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике: сборник трудов (Самара, 16-20 ноября 2010 г.). – Москва: Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 2010. – с. 63–69.
- C2. **Золотых М.С.**, Завестовская И.Н., Канавин А.П., Модификация поверхности металлов под действием излучения твердотельного лазера с диодной накачкой //



- Симпозиума по когерентному оптическому излучению полупроводниковых соединений и структур: сборник трудов (Москва-Звенигород, 28-30 ноября 2011 г.) – М.: РИИС ФИАН, 2011. – с. 221-224.
- C3. Kanavin A.P., **Zolotykh M.S.**, Zvestovskaya I.N., Theoretical research of laser modification of heterogeneous films // 4th International Symposium on Transparent Conductive Materials: Book of abstract (October 21-26, 2012. Hersonissos, Crete, Greece), 2012. – P. 20.
- C4. **Zolotykh M.S.**, Kanavin A.P., Zvestovskaya I.N., Pore collapse dynamics in metal coatings under the laser action // International Symposium «Fundamentals of Laser Assisted Micro- and Nanotechnologies» (FLAMN-13): Book of abstract (June 24-28, 2013, St.Petersburg – Pushkin, Russia), 2013. – P. 70.
- C5. **Золотых М.С.**, Звестовская И.Н., Канавин А.П., Динамика схлопывания пор при лазерном отжиге металлических покрытий // Симпозиума по когерентному оптическому излучению полупроводниковых соединений и структур: сборник тезисов (Москва-Звенигород, 27-29 ноября 2013 г.) – М.: РИИС ФИАН, 2013. – с. 30.
- C6. **Grigoryeva M.S.**, Kanavin A.P., Zvestovskaya I.N., Pore collapse dynamics in coatings under the laser annealing // Advanced Laser Technologies (ALT'14): Book of Abstract (October, 6 – 10, 2014, Cassis, France), 2014. – P. 80.
- C7. **Григорьева М.С.**, Звестовская И.Н., Канавин А.П., Лазерный отжиг пористых дефектов в металлах // III Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии» (ЛаПлаз-2017): Сборник научных трудов. – М.: НИЯУ МИФИ, 2017. – с. 50.
- C8. Kharin A.Yu., **Grigoryeva M.S.**, Zvestovskaya I.N. and Timoshenko V.Yu., Molecular dynamic simulation for estimation of porosity effect on laser ablation threshold in silicon // V International Conference on Ultrafast Optical Science (UltrafastLight-2021): Book of Abstracts (October 4 – 8, 2021, Lebedev Physical Institute, Moscow), 2021 – P. 249.
- C9. Евдокимова И.А., **Григорьева М.С.**, Харин А.Ю., Звестовская И.Н., Тимошенко В.Ю., Исследование влияния размера пор на порог лазерной абляции пористого кремния методом молекулярной динамики // VIII Международный симпозиум по когерентному оптическому излучению полупроводниковых соединений и структур: Программа. Сборник тезисов докладов (23-25 ноября, 2021 г.) – М.: ФИАН, 2021. – с.72.
- C10. **Grigoryeva M.S.**, Zvestovskaya I.N., Kanavin A.P., Kharin A.Yu., Laser ablation of porous silicon: effect of target porosity, International Symposium «Fundamentals of Laser Assisted Micro- and Nanotechnologies» (FLAMN-22): Book of abstract (June 27-30, 2022, St. Petersburg, Russia), 2022. – P. 92.

- C11. **Grigoryeva M.S.**, Kutlubulatova I.A., Kanavin A.P., Timoshenko V.Yu., Zavestovskaya I.N., Investigation of the short pulse laser ablation of porous silicon targets with molecular dynamics simulation // *Advanced Laser Technologies (ALT'23): Book of Abstract (18 – 21 September, 2023, Samara, Russia), 2023.* – P. 51.
- C12. **Grigoryeva M.S.**, Kutlubulatova I.A., Mavresko E. I., Fronya A. A., Zavestovskaya I.N. and Ivanov D. S., Investigation of laser melting and ablation thresholds of porous silicon // *VII International Conference on Ultrafast Optical Science (UltrafastLight-2023): Book of Abstracts (October 2 – 4, 2023, Lebedev Physical Institute, Moscow), 2023* – P. 249.
- C13. **Grigoryeva M.S.**, Ivanov D.S., Lukashenko S.Yu., Fronya A.A., Zavestovskaya I.N., Modeling of short-pulse laser interactions with monolithic and porous silicon targets with an atomistic–continuum approach *Advanced Laser Technologies (ALT'24): Book of Abstract (23 – 27 September, 2024, Samara, Russia), 2024.* – P. 23.

### **Список литературы, цитируемой в автореферате**

1. Liu P.S., Chen G.F. *Porous Materials: Processing and Applications.* – Oxford, UK: Elsevier Butterworth Heinemann, 2014. – 576 p. – ISBN: 978-0-12-407788-1.
2. Lu G. Q., Zhao X. S. *Nanoporous materials: Science and Engineering* – Covent Garden, London: Imperial College Press, 2004. – 900 p. – ISBN: 1-86094-210-5.
3. Canham L.T., *Handbook of Porous Silicon* – Basel, Switzerland: Springer, 2018. – 438 p. – ISBN: 978-3-319-71379-3.
4. Gautier G., Leduc P. Porous silicon for electrical isolation in radio frequency devices: A review // *Appl. Phys. Rev.* – 2014. – Vol. 1. – P. 011101. – DOI: 10.1063/1.4833575.
5. Gyrdaymov M., Cikhardt J., Tavana P. et al. High-brightness betatron emission from the interaction of a sub picosecond laser pulse with pre-ionized low-density polymer foam for ICF research // *Sci. Rep.* – 2024. – Vol. 14. – P.14785. DOI: 10. 1038/ s41598- 024- 65490-7.
6. Углов А.А., Фомин А.Д., Наумкин А.О., Пекшев П.Ю., Смуров И.Ю., Игнатъев М.Б. Модификация газотермических покрытий излучением лазера // *Физика и химия обработки материалов.* – 1987. – № 4. – С. 78–82.
7. Ctibor P., Kraus L., Tuominen J., Vuoristo P., Chráska P. Improvement of mechanical properties of alumina and zirconia plasma sprayed coatings induced by laser post-treatment // *Ceramics* – 2007. – Vol. 51 (4). – P. 181-189.
8. Liu Z. Crack-free surface sealing of plasma sprayed ceramic coatings using an excimer laser // *Appl. Surf. Sci.* – 2002. – Vol. 186. – P. 135-139. – DOI: 10.1016/S0169-4332(01)00613-4.
9. Omar H., Ibrahim A., Salem H., Sedky S. Effect of Pulsed Laser on the Structure and Morphology of Alumina-Zirconia Coatings // *JSEMAT* – 2013 – Vol. 3 – P. 249-256. – DOI: 10.4236/jsemat.2013.33033.

10. Timoshenko V.Yu., Dittrich T., Sieber I., Rappich J., Kamenev B. V., and Kashkarov P. K. Laser-Induced Melting of Porous Silicon // *Physica status solidi (a)*. – 2000. – V. 182 (1). – P. 325-330.
11. Skobelkina A. V., Kashaev F. V., Kolchin A. V., Shuleiko D. V., Kaminskaya T. P., Presnov D. E., Golovan L. V., and Kashkarov P. K. Silicon Nanoparticles Formed via Pulsed Laser Ablation of Porous Silicon in Liquids // *Tech. Phys. Lett.* – 2020. – Vol. 46. – P. 687-690. – DOI: 10.1134/S1063785020070263.
12. Vendamani V. S., Hamad S., Saikiran V., Pathak A. P., Venugopal Rao S., Ravi Kanth Kumar V. V., Nageswara Rao S. V. S. Synthesis of ultra-small silicon nanoparticles by femto-second laser ablation of porous silicon // *J. Mater. Sci.* – 2015. – Vol. 50. – P. 1666–1672. – DOI: 10.1007/s10853-014-8727-9.
13. Бозон-Вердюра Ф., Брайнер Р., Воронов В. В., Кириченко Н. А., Симакин А. В., Шафеев Г. А. Образование наночастиц при лазерной абляции металлов в жидкостях // *Квантовая электроника*. – 2003. – Т. 33 (8) – С.714-720.
14. Besner S., Kabashin A.V., Winnik F.M., Meunier M. Ultrafast laser based "green" synthesis of non-toxic nanoparticles in aqueous solutions // *Appl. Phys. A*. – 2008. – Vol. 93 (4). – P. 955-959. – DOI: 10.1007/s00339-008-4773-y.
15. Kabashin A.V., Singh A., Swihart M.T., Zvestovskaya I.N., Prasad P. Laser-Processed Nanosilicon: A Multifunctional Nanomaterial for Energy and Healthcare // *ACS Nano*. – 2019. – Vol. 13. – P. 9841-9867. – DOI: 10.1021/acsnano.9b04610.
16. Kabashin A.V., Meunier M. Laser Ablation-Based Synthesis of Nanomaterials // in *Recent Advances in Laser Processing of Materials: J. Perrière, E. Millon, E. Fogarassy (Eds.): Elsevier*. – 2006. – P. 1–36
17. Dolgaev S.I., Simakin A.V., Voronov V. V., Shafeev G. A. and Bozon-Verduraz F. Nanoparticles produced by laser ablation of solids in liquid environment // *Appl. Surf. Sci.* – 2002. – Vol. 186. – P. 546–551. – DOI: 10.1016/S0169-4332(01)00634-1.
18. Завестовская И.Н. Лазерное наноструктурирование поверхности материалов // *Квантовая электроника* – 2010. – Т. 40 (11). – С. 942–954.
19. Безотосный В. В., Бондарев В. Ю., Коваленко В. И., Крохин О. Н., Певцов В. Ф., Попов Ю. М., Токарев В. Н., Чешев Е. А. Модификация структуры металлических пленок излучением твердотельного лазера с диодной накачкой для повышения выходных параметров мощных лазерных диодов // *Квантовая электроника* – 2007. – Т. 37 (11). – С. 1055–1059.
20. Gronvold F. heat capacity of indium from 300 to 1000 K // *J. Thermal Anal.* – 1978. – Vol. 13 – P. 419–428.

21. Peralta-Martinez M.V., Assael M.J., Dix M.J., Karagiannidis L., Wakeham W.A. A Novel Instrument for the Measurement of the Thermal Conductivity of Molten Metals. Part II: Measurements // *Int J Thermophys.* – 2006. – Vol. 27 (3). – P. 681–698. – DOI: 10.1007/s10765-006-0057-y.
22. Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent system // *Phys.Rev. B.* – 1988. – V. 37. – P.6991-7000.
23. Green M. A. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300 K including temperature coefficients // *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* – 2008. – Vol. 92 – P. 1305–1310. – DOI: 10.1016/j.solmat.2008.06.009.
24. Bristow A. D., Rotenberg N., Van Driel H.M. Two-photon absorption and Kerr coefficients of silicon for 850-2200 nm // *Appl. Phys. Lett.* 2007. – V. 90. 191104. – DOI: 10.1063/1.2737359.
25. Gayvoronsky V. Ya., Kopylovsky M.A., Gromov Y.V., Zobotnov S. V., Piskunov N. A., Golovan L. A., Timoshenko V.Yu., Kashkarov P.K., Fangand G.Y., Li C. F. Enhancement of two-photon absorption in anisotropic mesoporous silicon. // *Laser Phys. Lett.* – 2008. – V. 5. – P. 894-897. – DOI: 10.1002/lapl.200810080.
26. Golovan, L.A. and Timoshenko, V. Yu. Nonlinear-Optical Properties of Porous Silicon Nanostructures // *J. Nanoelectron. Optoelektron.* – 2013. – V. 8 (3). – P. 223-239. – DOI: 10.1166/jno.2013.1473.