

氩、铝原子相互作用势的计算及其在飞秒激光烧蚀分子动力学模拟中的应用

吴寒^{1,2} 张楠¹ 何淼² Shih Cheng-Yu² 朱晓农¹

¹南开大学现代光学研究所, 天津 300071

²弗吉尼亚大学材料科学与工程系, 夏洛茨维尔 22904-4745, 美国

摘要 用分子动力学方法模拟飞秒激光在氩气(Ar)环境中烧蚀金属铝(Al)靶时,需要考虑氩原子和铝原子的相互作用。组合连接短程和长程 2 种势能函数,得到了 Ar-Al 相互作用的势能函数,并利用该相互作用势给出了相应小体系和小尺度下飞秒激光烧蚀的分子动力学模拟结果。该模型在 Ar、Al 原子距离较近时使用 Ziegler-Biersack-Littmark(ZBL)势能函数,距离较远时使用 Lennard-Jones(LJ)势能函数,中间距离则使用二次多项式函数。LJ 势能函数的参数通过对 Ar-Al 结合能的拟合获得。将此 Ar-Al 相互作用势能函数用于氩气环境中飞秒激光烧蚀固体铝的分子动力学模拟,得到了皮秒量级时间延迟下的烧蚀动态图像和此过程中氩气温度、密度的演化规律。

关键词 超快光学; 飞秒激光烧蚀; 分子动力学模拟; 势能函数; 结合能

中图分类号 O562.4

文献标识码 A

doi: 10.3788/CJL201643.0802004

Calculation of Argon-Aluminum Interatomic Potential and Its Application in Molecular Dynamics Simulation of Femtosecond Laser Ablation

Wu Han^{1,2} Zhang Nan¹ He Miao² Shih Cheng-Yu² Zhu Xiaonong¹

¹*Institute of Modern Optics, Nankai University, Tianjin 300071, China*

²*Department of Materials Science and Engineering, University of Virginia, Charlottesville 22904-4745, USA*

Abstract When molecular dynamics method is used to simulate femtosecond laser ablation of aluminum (Al) in argon (Ar) environment, the interaction of Ar and Al atoms needs to be considered. The potential function of Ar-Al interaction is obtained by combining two types of potential functions, including short range and long range. The molecular dynamics simulation results of femtosecond laser ablation at corresponding small system and scale are given by using the interaction potential. Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) potential function is used in shorter range of Ar-Al interatomic potential. Lennard-Jones (LJ) potential function is used in longer range. Second-order polynomial is used at the intermediate distance. The parameters of LJ potential function are obtained by fitting the Ar-Al binding energy. The Ar-Al interatomic potential function is used in molecular dynamics simulation of femtosecond laser ablation of aluminum in argon environment. The ablation dynamic images under picosecond time delay and the evolution laws of temperature and density of Ar in the process are obtained.

Key words ultrafast optics; femtosecond laser ablation; molecular dynamics simulation; potential energy function; binding energy

OCIS codes 320.7120; 320.2250; 350.3390

收稿日期: 2016-02-18; 收到修改稿日期: 2016-04-13

基金项目: 国家自然科学基金(61137001,11274185)、国家留学基金(201406200066)

作者简介: 吴寒(1988—),男,博士研究生,主要从事超短脉冲激光烧蚀分子动力学模拟方面的研究。

E-mail: schmeichel1992@126.com

导师简介: 朱晓农(1957—),男,博士,教授,博士生导师,主要从事超短脉冲激光技术与应用方面的研究。

E-mail: xnzhu1@nankai.edu.cn(通信联系人)

1 引 言

超短脉冲激光烧蚀固体材料时,光能量在极短时间和极小空间内被材料吸收^[1-2],进而使材料发生爆炸性去除。这种光与物质相互作用的独特物理过程不仅可以在材料表面产生特殊的微结构^[3-5],也可以制备金属和半导体新型纳米材料^[6-9]。在不同气体环境中,激光烧蚀产生的喷射物与气体原子的相互作用会形成气体激波^[10],直接影响烧蚀的动力学演化过程以及最终的烧蚀产物^[11]。飞秒激光烧蚀类似于微纳尺度的爆炸,相对于真空或液体环境,气体环境中烧蚀会产生高温高密度的气体激波,对喷射物进行选择性地阻碍和消除^[12-13],影响烧蚀后靶材表面形貌^[4]。这方面的研究成果可以应用于纳米加工^[14]、纳米化学反应^[15]和纳米合成^[16]等。因此,环境气体对烧蚀过程的影响一直是激光与物质相互作用研究领域的重要研究课题^[17-18]。

相比于真空条件下分子动力学模拟飞秒激光烧蚀过程的研究^[19-21],气体环境中的飞秒激光烧蚀分子动力学模拟目前开展的还较少。气体环境下激光烧蚀金属材料的分子动力学模拟至少包含 2 种原子,通常需要用 3 种势能函数,即金属原子间的势能函数、气体原子间的势能函数以及金属原子与气体原子之间的相互作用势能函数。为使问题简化,在已有的相关研究中^[22-24],一般采用同一种元素的固体和气体,这样使用同一种势能函数就可以进行模拟,但这种模拟实际上是对真实情况的一种简化处理。

本文使用双温模型方程结合分子动力学(TTM-MD)^[25]计算方法对氩气环境中飞秒激光烧蚀铝靶的小尺度烧蚀过程进行模拟,首先必须找到 Ar-Al 相互作用势能函数的适当表达方式。借鉴连接多种势能函数的方法^[26],针对不同的原子间距分别使用 Ziegler-Biersack-Littmark(ZBL)、Lennard-Jones(LJ)势能函数和二阶多项式函数构建了 Ar-Al 势能函数。模拟结果给出了实验上难以观测到的空间小至原子尺度、时间快至皮秒量级的微观、超快烧蚀图像以及氩气和铝靶喷射物温度、密度的动态演化过程。初步的模拟结果表明:氩气的存在阻碍了铝原子的喷射,形成了独特的 Ar 和 Al 的相互作用区域,在气体中形成了激波,高密度的气体激波一定程度上阻碍了烧蚀喷射物的向外喷射。这些结果一方面提供了气体环境中飞秒激光烧蚀固体材料的一般物理图像,具有一定的普适性,另一方面也证实了利用构建的 Ar-Al 相互作用势能函数进行后续大尺度分子动力学模拟的可行性。

2 Ar-Al 相互作用势的构建

考虑较低流量的相位爆炸阈值(如 Ni 的相位爆炸阈值为 0.4 J/cm^2 ^[27]、Al 的相位爆炸阈值为 0.1 J/cm^2 ^[28]),附近的超短脉冲激光烧蚀,由于激光流量不是很大,材料所能达到的温度超过临界温度的 20% 左右。根据 Saha 方程可以推算出在此温度下材料的电离度小于 1%,靶材原子被电离的比例很小,因此将相互作用势能函数简化,即不考虑有电离的情况^[27]。这种情况下,飞秒激光烧蚀金属铝过程中喷射物的温度仍然可以接近 10^4 K ^[29],高能喷射物与环境气体之间依然存在着强烈的相互作用,喷射物中的铝原子和氩原子有可能处于极短的相互作用距离内。因此,使用 ZBL 势能函数^[30]来描述短相互作用距离的 Ar-Al 相互作用。ZBL 函数是最常用的描述短程相互作用的势能函数,该函数只有斥力部分,它是目前被认为最适合描述碰撞距离小于 $0.3\sim 0.4 \text{ nm}$ 的势能函数,在这个距离内使用 LJ 势能函数会使两个原子间的作用力接近无穷大,从而导致分子动力学计算无法收敛。ZBL 势能函数的基本思路是原子间相互作用力在短距离情况下可以表示为被电子云屏蔽的带正电原子核之间的库仑斥力。所以,它的表达式是原子核之间的库仑斥力与一个描述原子核周围电子云屏蔽作用的函数的乘积,可表示为^[30]

$$U_{ij}^{\text{ZBL}}(r_{ij}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}} \phi(r_{ij}/a), \quad (1)$$

式中 $\phi(r_{ij}/a) = 0.02817 \exp\left[-0.20162\left(\frac{r_{ij}}{a}\right)\right] + 0.28022 \exp\left[-0.40290\left(\frac{r_{ij}}{a}\right)\right] + 0.50986 \exp\left[-0.94229\left(\frac{r_{ij}}{a}\right)\right] + 0.18175 \exp\left[-3.19980\left(\frac{r_{ij}}{a}\right)\right]$ 是屏蔽方程, $a = \frac{0.885a_0}{Z_i^{0.23} + Z_j^{0.23}}$ 是屏蔽距离, $a_0 = 0.0529 \text{ nm}$ 是玻尔半径。当 $r_{ij}/a \rightarrow 0$ 时, $\phi(r_{ij}/a) \rightarrow 1$ 。可以看出 ZBL 势能函数仅与 2 种原子体系的原子序数 Z_i 、 Z_j 有关。对于 Ar-Al 的 ZBL 相互作用势能函数,Ar 的原子序数 $Z_{\text{Ar}} = 18$,Al 的原子序数 $Z_{\text{Al}} = 13$,由 $a = \frac{0.885a_0}{Z_i^{0.23} + Z_j^{0.23}}$ 计算得到 $a = 0.0125 \text{ nm}$ 。

由于 LJ 势能函数主要用于描述分子间的相互作用力,在较长的相互作用距离内较准确。通常认为 2 种原子结合能在 0.1~10 eV 时,LJ 势能函数可以很好地描述 2 种原子的偶极相互作用。在激光烧蚀过程的后续阶段,粒子体系的温度、密度下降,铝原子和氩原子之间的距离增大,处于长距离相互作用的范围。此时,LJ 势可以准确描述氩原子和铝原子的相互作用,表达式为^[31]

$$U_{ij}^{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2)$$

式中 ϵ 是势能阱的深度, σ 是势能为 0 时的距离。通常 LJ 势能函数在 2.5σ 处截断^[32]。对于 Ar 和 Al 之间的相互作用,有关文献中没有给出准确的 ϵ 和 σ 值。通过调整 ϵ 和 σ 的数值拟合一个氩原子吸附在小体积铝片表面的结合能的方法,来确定 Ar-Al 相互作用 LJ 势能函数中 ϵ 和 σ 的值。其中氩原子吸附铝片的结合能可以通过查找第一性原理计算的相关文献获得,通过分子动力学方法构建一个氩原子吸附在小体积铝片表面的系统,得到氩原子吸附铝片的结合能,并与相关文献报道数值进行对比。

考虑一个氩原子吸附在小体积铝片的表面。LJ 势能函数中 ϵ 和 σ 的物理意义为:系统平衡时, ϵ 对应 Ar-Al 结合能 E_b ; σ 对应氩原子与铝片表面层原子的垂直距离 d 。这种对应关系没有函数表达式,为了确定 Ar-Al 相互作用 LJ 势能函数中 ϵ 和 σ 值,构建一个氩原子吸附在小体积铝片表面的小系统,通过调整 ϵ 和 σ 的数值来拟合 E_b 和 d ,从而确定 ϵ 和 σ 的数值。文献[33]给出了一个氩原子吸附在小体积铝片表面的第一性原理的计算,得到了 E_b 和 d 。铝晶体的 fcc (111) 面上有 4 个不同位置放置 Ar 原子(fcc 为面心立方晶格),其中面心立方空位(fcc hollow)是能量最低的点,也就是最稳定的位置。使用这个位置的结合能和距离进行拟合计算,在这个位置 $E_b = -0.538$ eV, $d = 0.346$ nm。

首先构建一个用来拟合 ϵ 和 σ 值的分子动力学小系统,即使用一个大小为 $x = 7.1$ nm、 $y = 4.9$ nm、 $z = 7.3$ nm 的 fcc(111) 铝片。假定 Al 的晶格常数为 0.405 nm,Al 原子间使用 Embedded Atom Method (EAM) 势能函数^[34]。计算中逐步去掉每个原子的动能,最终使原子静止于势能平衡面,此时系统的总动能为零,系统总能量即所有原子的势能和为 -50014.078 eV。如图 1 所示,计算中使用面心立方空位作为参考点。通过调整 LJ 势能函数中的 ϵ 和 σ 值,计算系统稳定后的结合能 E_b 和 Ar-Al 垂直距离 d 。当 E_b 和 d 达到文献[33]中面心立方空位的值时,所使用 ϵ 和 σ 的值即为 Ar-Al 的 LJ 势能函数参数。

从图 1 中可以看出,当 $\epsilon = 0.080$ eV、 $\sigma = 0.3636$ nm 时,得到了 Al fcc (111) 面上面心立方空位处放置 Ar 原子的结合能 $E_b = -0.538$ eV 和 Ar-Al 片垂直距离 $d = 0.346$ nm。对于其他的位置如 ontop(顶位)、bridge(桥位)和 hcp hollow(密堆六方空位),也计算了在 $\epsilon = 0.080$ eV, $\sigma = 0.3636$ nm 时对应的 E_b 和 d 。发现不同位置的 E_b 和 d 均接近面心立方空位处的值,这是由于面心立方空位是最稳定即能量最低的位置。实际上初始时刻放在不同位置的 Ar 原子最终都会落到面心立方空位处。

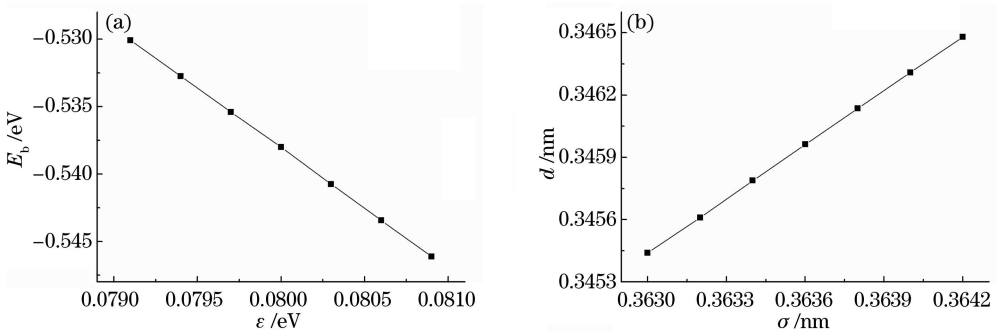


图 1 面心立方空位处不同 ϵ 和 σ 值时 Ar-Al 的 E_b 和 d 值

Fig. 1 E_b and d of Ar-Al with respect to different ϵ and σ at fcc hollow

图 2 绘出了 Ar-Al 势能函数曲线,在 0~0.31 nm 使用 ZBL 势能曲线,0.37 nm 至正无穷大时使用 LJ 势能函数曲线,0.31~0.37 nm 使用二次多项式函数进行连接,可表示为

$$U_{ij}^{ZBL-LJ}(r_{ij}) = 2.31 - 0.90r_{ij} + 0.07r_{ij}^2. \quad (3)$$

连接点的选择并不是唯一的,在实际的 Ar 气体环境烧蚀 Al,Al 喷射物团簇或 Al 单原子快速喷出,与

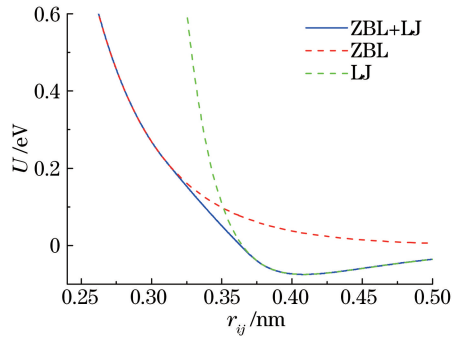


图 2 Ar-Al 势能函数曲线

Fig. 2 Curves of Ar-Al potential energy function

Ar 原子发生碰撞, 强烈碰撞的主要作用距离在 $0.2 \sim 0.3$ nm, 对应此处的势能在 0.2 eV 以上, 所以在这个距离以内需要使用 ZBL 势能函数; 在较远距离主要是 2 种原子偶极相互作用, LJ 势能函数就可以很好地描述这种相互作用, 所以在这个距离以上就可以过渡到 LJ 势能函数。另外, 希望保持 2 种势能函数的平滑特性, 尽量减小二次多项式连接的部分, 由此确定了 2 个连接点。

3 模拟结果与分析讨论

在下述分子动力学(MD)模拟中, 使用的铝靶在 x 和 y 方向上的长度均为铝晶格常数的 10 倍, 沿 z 方向长度为 150 nm, 初始温度为 300 K; 双温模型方程(TTM)模拟的金属铝的连续部分长度为 300 nm。根据相同激光流量真空环境下分子动力学模拟的文献[28]可知, 铝的烧蚀深度约为 100 nm, 熔化深度在 250 nm 左右, 均小于设置的计算区域。氩气与固体铝在 x - y 方向上的长度相同, 氩气在 z 方向上的长度为 $1.5 \mu\text{m}$, 初始温度为 300 K, 气压为 2.02×10^5 Pa。烧蚀所用的激光脉冲宽度为 100 fs, 激光能流为 0.2 J/cm^2 。计算采用的 TTM-MD 模型的详细介绍见参考文献[25]。该模型采用双温方程描述超快激光脉冲与物质相互作用过程中电子温度的变化, 晶格温度的变化利用一个摩擦项耦合到 MD 运动方程中, 这样耦合的 TTM-MD 模型可以将光与物质相互作用的过程引入到 MD 模拟中。图 3 和图 4 给出了烧蚀动态图像和氩气温度、密度的时间演化。

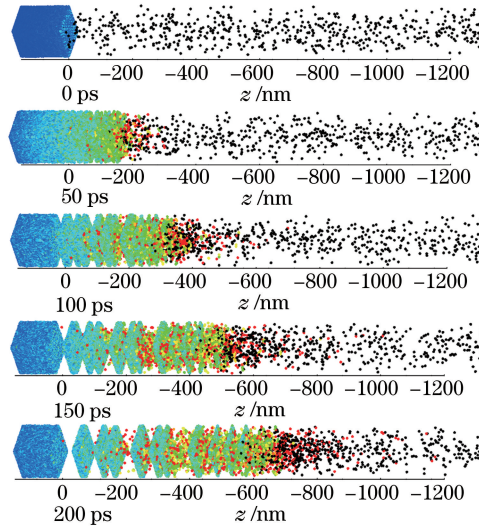


图 3 飞秒激光轰击铝靶后 $0 \sim 200$ ps 时间延迟的瞬态烧蚀图像。铝原子的颜色根据铝的势能值标记, 从 -3.2 eV (蓝) 到 -0.2 eV (红), 氩原子标记为黑色

Fig. 3 Transient ablation images from 0 to 200 ps time delay after Al bombarded by femtosecond laser. Al atoms are colored by their potential energies, with the scale from -3.2 eV (blue) to -0.2 eV (red). Ar atoms are all colored by black

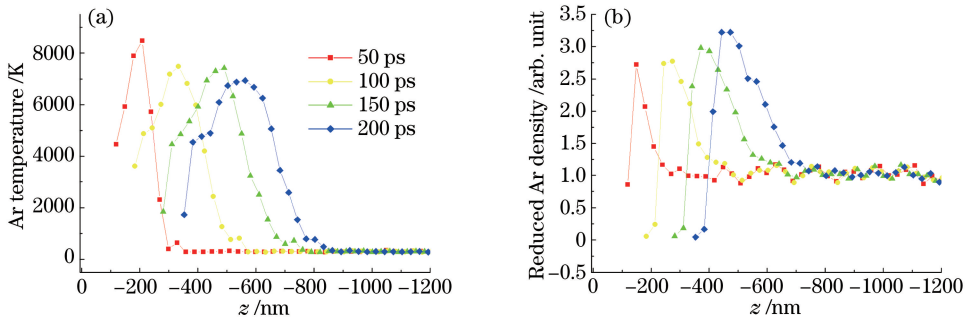


图 4 Ar 热力学参数的动态演化。(a) 温度随时间和深度的变化趋势；(b) 密度随时间和深度的变化趋势，密度值由 300 K, 2.02×10^5 Pa 气体 Ar 密度进行约化

Fig. 4 Dynamic evolution of thermodynamic parameters of Ar. (a) Variation trend of temperature with time and depth; (b) variation trend of density with time and depth, and the density value is reduced by Ar density at 300 K and 2.02×10^5 Pa

图 3 为不同时间延迟下的烧蚀图像，可以看出铝喷射物的前端是低密度的气态原子；喷射物中端是一些中等大小的团簇和单原子的混合物；喷射物的后端主要是尺寸更大的团簇，后端喷射物主要来自材料内部烧蚀后的分解和扩张等慢过程。规律性的分层剥离是由于采用了仅有 4 nm 的小尺度计算，并且在横截面 $x-y$ 方向上使用了周期性边界条件，并不能反映烧蚀过程中出现团簇的真实状况。在大尺度的分子动力学计算中可以看到更准确的物理现象。图 3 的计算结果可以和参考文献[28]中纯 Al 的烧蚀分子动力学模拟进行比较。两者的烧蚀图像中 Al 在激光作用下都出现了爆炸式的喷射，当外界存在 Ar 气体时，Ar 气体在一定程度上阻碍了 Al 原子的喷射，可以看出 Al 喷射物挤压 Ar 气体部分，形成了 Ar 和 Al 相互作用区域，这个区域大概位于 Al 喷射物的前端，靠近喷射物前端的 Ar 气体部分出现了明显的密度变化。图 4 为小系统模拟的 Ar 热力学参数变化图，没有出现突变或不连续，在 Al 和 Ar 混合区靠 Ar 气体端形成了高温、高密度的气体区域。可以看出，随时间逐渐增加，在喷射物的作用下氩气部分出现了密度和厚度的压缩层，形成了激波，这与冲击波的物理模型相符^[35]。其中温度的变化图 4(a)与文献[36]中激波的经典模型计算图得到了相同的规律，气体激波内部的温度经历了从一个很小值快速上升到温度最大值的过程，然后逐渐变化到初始气体的温度值；模拟中温度极值在 7000 K 左右，远远高于初始气体温度 300 K，这与相关的经典尺度分析得到的温度值接近^[37]。上述结果表明，应用此种 Ar-Al 相互作用的势能函数进行飞秒激光 Ar 气体环境下烧蚀金属 Al 的大规模分子动力学模拟是可行和有价值的。

4 结 论

针对目前分子动力学模拟计算中还缺少关于 Ar-Al 势能函数的报道，提出了一种构建 Ar-Al 相互作用势能函数的方法，并将其应用于飞秒激光 Ar 气体环境下烧蚀 Al 靶的小系统分子动力学模拟，得到热力学参数变化图和烧蚀图，模拟结果初步表明该势能函数的有效性。这种方法具有通用性，提供了一种构建气体原子和固体原子相互作用势能函数的普遍方法。通过此方法构建的势能函数，适用于激光烧蚀这一类原子间相互作用由强烈到稳定的物理过程。分子动力学模拟非真空环境下超快小尺度过程的研究，对于构建 2 种或多种原子间相互作用势能函数，是一种简便且物理意义明确的有效方法。

致谢 感谢美国弗吉尼亚大学材料科学与工程系 Zhigilei 教授和 Chengping Wu 博士的指导与帮助。

参 考 文 献

- 1 Zhang Keyan. Phase transition speed research of metal material at laser irradiation medium strength[J]. Acta Physica Sinica, 2004, 53(6): 1815-1819.
张可言. 金属材料在中强度激光辐照下的相变速度研究[J]. 物理学报, 2004, 53(6): 1815-1819.
- 2 Zhao Shiqiang, Li Ling. Numerical investigation of phase change during thermal ablation of gold films induced by

- femtosecond Laser[J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(12): 1214001.
- 赵士强, 李 凌. 飞秒脉冲激光烧蚀金膜的相变传热研究[J]. *光学学报*, 2015, 35(12): 1214001.
- 3 Her T H, Finlay R J, Wu C, *et al.* Microstructuring of silicon with femtosecond laser pulses[J]. *Appl Phys Lett*, 1998, 73(12): 1673-1675.
- 4 Feng P, Zhang N, Wu H, *et al.* Effect of ambient air on femtosecond laser ablation of highly oriented pyrolytic graphite [J]. *Opt Lett*, 2015, 40(1): 17-20.
- 5 Xue Qing, Wu Wenhui, Ye Yunxia, *et al.* Property degradation of GaAs/Ge solar cells after femtosecond laser irradiation [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2015, 52(4): 041405.
- 薛 青, 吴文慧, 叶云霞, 等. 飞秒激光辐照对 GaAs/Ge 太阳能电池的性能退化研究[J]. *激光与光电子学进展*, 2015, 52(4): 041405.
- 6 Hastrup N, O'connor G M. Impact of wavelength dependent thermo-elastic laser ablation mechanism on the generation of nanoparticles from thin gold films[J]. *Appl Phys Lett*, 2012, 101(26): 263107.
- 7 Perrière J, Boulmer-Leborgne C, Benzerger R, *et al.* Nanoparticle formation by femtosecond laser ablation[J]. *Journal of Physics D: Appl Phys*, 2007, 40(22): 7069-7076.
- 8 Feng Peipei, Wu Han, Zhang Nan. Study of the time-resolved emission spectra of the ejected plume generated by ultrashort laser ablation of graphite[J]. *Acta Physica Sinica*, 2015, 64(21): 214201.
- 冯培培, 吴 寒, 张 楠. 超短脉冲激光烧蚀石墨产生的喷射物的时间分辨发射光谱研究[J]. *物理学报*, 2015, 64(21): 214201.
- 9 Cheng Yong, Lu Yimin, Guo Yanlong, *et al.* Development of function films prepared by pulsed laser deposition technology [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2015, 52(12): 120003.
- 程 勇, 陆益敏, 郭延龙, 等. 脉冲激光沉积功能薄膜的研究进展[J]. *激光与光电子学进展*, 2015, 52(12): 120003.
- 10 Ren Huan, Wang Junbo, Qiu Rong, *et al.* Ultrafast dynamics of intense femtosecond laser ablation of silicon[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2013, 24(12): 2787-2790.
- 任 欢, 王俊波, 邱 荣, 等. 飞秒脉冲烧蚀单晶硅的超快动力学[J]. *强激光与粒子束*, 2013, 24(12): 2787-2790.
- 11 Hu Zhan, Qi Ying, Yang Ding, *et al.* Metal micromachining with shaped femtosecond laser pulses[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2012, 24(10): 2381-2385.
- 胡 湛, 齐 莹, 杨 鼎, 等. 整形飞秒激光金属材料精细加工[J]. *强激光与粒子束*, 2012, 24(10): 2381-2385.
- 12 de Giacomo A, Dell'aglio M, Gaudioso R, *et al.* Effects of the background environment on formation, evolution and emission spectra of laser-induced plasmas[J]. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2012, 78(1): 1-19.
- 13 Amoruso S, Bruzzese R, Wang X, *et al.* Propagation of a femtosecond pulsed laser ablation plume into a background atmosphere[J]. *Appl Phys Lett*, 2008, 92(4): 041503.
- 14 Toth M, Straw M. Gas-assisted laser ablation: US8524139 B2[P]. 2013-09-03.
- 15 Vorobyev A Y, Guo C. Nanochemical effects in femtosecond laser ablation of metals[J]. *Appl Phys Lett*, 2013, 102(7): 074107.
- 16 Kiani A, Patel N B, Tan B, *et al.* Leaf-like nanotips synthesized on femtosecond laser-irradiated dielectric material[J]. *J Appl Phys*, 2015, 117(7): 074306.
- 17 Zhang Shudong, Chen Guanying, Liu Yanan, *et al.* Influence of the ambient pressure on velocity of emission particle of laser-ablated Al target[J]. *Nuclear Physics Review*, 2002, 19(2): 206-208.
- 张树东, 陈冠英, 刘亚楠, 等. 气压对激光烧蚀 Al 等离子体中粒子速度的影响[J]. *原子核物理评论*, 2002, 19(2): 206-208.
- 18 Guo Qinglin, Han Meiyang, Zhang Lei, *et al.* Effect of ambient atmosphere on laser micro-plasma radiant intensity[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2009, 29(10): 2606-2609.
- 郭庆林, 韩美英, 张 雷, 等. 环境气氛对激光微等离子体辐射强度的影响[J]. *光谱学与光谱分析*, 2009, 29(10): 2606-2609.
- 19 Liu Xuan, Wang Yang. Molecular dynamics of the mechanism of ultrashort laser ablation of metals[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2005, 17(4): 500-504.
- 刘 璇, 王 扬. 超短激光蚀除金属机制的分子动力学研究[J]. *强激光与粒子束*, 2005, 17(4): 500-504.
- 20 Wang Limei, Zeng Xinwu. Molecular dynamics simulation of 266 nm femtosecond laser ablation of monocrystalline silicon [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2008, 20(8): 1360-1364.
- 王丽梅, 曾新吾. 266 nm 飞秒激光烧蚀单晶硅的分子动力学模拟[J]. *强激光与粒子束*, 2008, 20(8): 1360-1364.
- 21 Chen Bing, Zhu Weihua, Chen Peng, *et al.* Mechanism of femtosecond laser ablating CuZr amorphous alloy[J]. *Laser &*

Optoelectronics Progress, 2015, 52(4): 041406.

陈 冰, 朱卫华, 陈 鹏, 等. 分子动力学模拟飞秒激光烧蚀 CuZr 非晶合金的机理[J]. 激光与光电子学进展, 2015, 52(4): 041406.

- 22 Li Chong, Zhang Jingchao, Wang Xinwei. Phase change and stress wave in picosecond laser-material interaction with shock wave formation[J]. Appl Phys A, 2013, 112(3): 677-687.
- 23 Gacek S, Wang X. Dynamics evolution of shock waves in laser-material interaction[J]. Appl Phys A, 2008, 94(3): 675-690.
- 24 Guo L, Wang X. Effect of molecular weight and density of ambient gas on shock wave in laser-induced surface nanostructuring[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2009, 42(1): 015307.
- 25 Ivanov D S, Zhigilei L V. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films[J]. Phys Rev B, 2003, 68(6): 064114.
- 26 Kornich G V, Betz G, Zaporozhtchenko V, *et al.* Molecular dynamics simulations of interactions of Ar and Xe ions with surface Cu clusters at low impact energies[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2005, 228(1-4): 41-45.
- 27 Zhigilei L V, Lin Z, Ivanov D S. Atomistic modeling of short pulse laser ablation of metals: Connections between melting, spallation, and phase explosion[J]. Journal of Physical Chemistry C, 2009, 113(27): 11892-11906.
- 28 Wu C, Zhigilei L V. Microscopic mechanisms of laser spallation and ablation of metal targets from large-scale molecular dynamics simulations[J]. Appl Phys A, 2013, 114(1): 11-32.
- 29 Nakano H, Oguri K, Okano Y, *et al.* Dynamics of femtosecond-laser-ablated liquid-aluminum nanoparticles probed by means of spatiotemporally resolved X-ray absorption spectroscopy[J]. Appl Phys A, 2010, 101(3): 523-531.
- 30 Ziegler J F, Biersack J, Littmark U. The stopping and range of ions in solids[M]. Oxford: Pergamon Press, 1985.
- 31 Lennard-Jones J E. Cohesion[J]. Proceedings of the Physical Society, 1931, 43(5): 461-482.
- 32 Stoddard S D, Ford J. Numerical experiments on the Stochastic behavior of a Lennard-Jones gas system[J]. Phys Rev A, 1973, 8(3): 1504-1512.
- 33 Niu Wenxia, Zhang Hong. Ar adsorptions on Al (111) and Ir (111) surfaces: A first-principles study[J]. Chin Phys B, 2012, 21(2): 026802.
- 34 Purja Pun G P, Mishin Y. Development of an interatomic potential for the Ni-Al system[J]. Philosophical Magazine, 2009, 89(34-36): 3245-3267.
- 35 Zel'dovich Y B. Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena [M]. New York: Courier Corporation, 2002.
- 36 Bird G A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows[M]. Oxford: Oxford University Press, 1994.
- 37 Miloshevsky A, Harilal S S, Miloshevsky G, *et al.* Dynamics of plasma expansion and shockwave formation in femtosecond laser-ablated aluminum plumes in argon gas at atmospheric pressures[J]. Physics of Plasmas, 2014, 21(4): 043111.