・光电器件与材料・

飞秒激光烧蚀CuZr非晶合金机理与烧蚀区结构分析

曹友朋1,陈 冰1,何 涛2,何红宇2,陈志勇2,朱卫华2,王新林1,2

(1.南华大学 机械工程学院, 湖南 衡阳 421001;2.南华大学 电气工程学院, 湖南 衡阳 421001)

摘 要:采用结合双温模型的分子动力学的方法,数值模拟了脉宽100 fs,能量密度为40~200 mJ/cm²的飞秒激光与CuZr非晶 合金的相互作用过程。低能量密度下,靶材的烧蚀机制主要表现为机械破碎;高能量密度下,热机械蚀除和相爆炸共同存在于靶 材的烧蚀过程,随着能量密度的增加,相爆炸成为主要蚀除机制。利用径向分布函数分析了CuZr非晶合金结构的无序性,分析 结果表明,激光能量密度由80 mJ/cm²增加到120 mJ/cm²时,飞秒激光与靶材相互作用过程中,材料内部的原子保持着无序状态, 材料未发生明显晶化。

关键词:飞秒激光;双温方程;分子动力学;非晶合金;径向分布函数 中图分类号:0437;TN249 文献标识码:A 文章编号:1673-1255(2017)-01-0015-07

Mechanism of Femtosecond Laser Ablation of CuZr Amorphous Alloy and Microstructure of Ablation Zone's Matrix

CAO You-peng¹, CHEN Bin², HE Tao², HE Hong-yu², CHEN Zhi-yong², ZHU Wei-hua², WANG Xin-lin^{1,2}

Department of Mechanical Engineering, University of South China, Hengyang 421001, China;
 Department of Electrical Engineering, University of South China, Hengyang 421001, China)

Abstract: The femtosecond laser ablating CuZr amorphous alloy has been simulated using the molecular dynamics method combined with the two temperature model. The duration of laser is 100 fs and the fluence is selected from 40 mJ/cm² to 200 mJ/cm². At low laser fluence, the ablation mechanism of the target material is mechanical spallation. At high laser fluence, thermo-mechanical removal and phase explosion co-exist in the ablation process of the target material, and with the increase of the fluence, the phase explosion becomes the main removal mechanism. The disordering of CuZr amorphous alloy structure is analyzed by the radial distribution function. The results indicate that material atomics maintain a disordered state and no obvious crystallization is observed when the laser fluence increases from 80 mJ/cm² to 120 mJ/cm² during ablation process.

Key words: femtosecond laser; two temperature equation; molecular dynamics; amorphous alloy; radial distribution function

非晶合金因具有优异的力学、化学和物理性能,使其成为最具发展潜力的材料之一^[1]。在非晶合金领域,由于CuZr合金具有突出的非晶形成能力,逐渐成为学者们研究的热点^[2-4]。然而,非晶是亚稳态,在高温或者高应力下,会发生晶化,其相应

的优异性能也随之改变,因而块体非晶材料的加工,特别是微纳加工,成为其应用中的一个难点。 飞秒激光由于其加工精度高,热影响和机械损伤小的特点,在材料微纳制造和超精细加工方面具有重 要的应用^[5-6],最近有研究表明,飞秒激光可以使非晶

收稿日期:2016-12-13

基金项目:国家自然科学基金(11174119);湖南省自然科学基金(2015JJ6098)资助;衡阳市科技计划项目(2016KJ26) 作者简介:曹友朋(1989-),男,硕士,主要研究方向为超快激光与金属相互作用方面的研究;王新林(1970-),男,博士,教授,主要研究方向为光 电子与激光技术及应用.

r

合金的无晶化加工成为可能四。展开对飞秒激光烧 蚀CuZr非晶合金数值模拟的研究,寻求不同激光参 数下靶材的蚀除机制,进而为飞秒激光无晶化加工 非晶合金提供可靠的理论和参数依据,这对非晶合 金的推广应用具有重大影响。目前,学者认为超快 激光蚀除金属的机制,主要是机械破碎和液相爆 炸^[8-9]。Karim采用经典分子动力学结合连续描述的 混合模型,模拟了飞秒激光与Cr的相互作用过程, 观察到了靶材表层的熔化,再结晶,机械破碎以及 过热区域的爆炸分解与喷射几个过程^{10]}。Lewis 等 人采用双温方程和分子动力学相结合的方法模拟 了飞秒激光烧蚀非晶 CuZr 和晶体 CuZr,得出非晶 CuZr的电声耦合强度比晶体CuZr的弱,因此需要更 长的耦合平衡时间,同时观察到相对于晶体CuZr, 非晶CuZr内部的压力传播速度基本不受激光能量 的影响¹¹¹。文中主要数值模拟并分析了飞秒激光烧 蚀CuZr非晶合金的机制,并分析了靶材中Cu-Cu, Cu-Zr,Zr-Zr原子对的径向分布函数^[12],给出了适合 无晶化加工CuZr非晶合金的激光参数。

1 数值模拟方法

超快激光和金属相互作用时,激光能量被导带 电子吸收后,快速沉积并把电子温度加热到极高, 此时晶格的温度几乎没有变化,电子和晶格之间产 生巨大温差,使两者处于非热平衡的状态。Anisimov^[13]提出了双温方程模型,用来描述电子和晶格这 两个温度体系,目前,双温方程是描述超快激光辐 照靶材后的电子和晶格温度演化的主要模型。双 温方程表达式如下

$$C_{e}\frac{\partial T_{e}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{e} \frac{\partial T_{e}}{\partial z} \right) - g \left(T_{e} - T_{l} \right) + S(z,t)$$
(1)

$$C_{l}\frac{\partial T_{e}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \left(k_{l} \frac{\partial T_{l}}{\partial z} \right) + g \left(T_{e} - T_{l} \right)$$
(2)

$$S(z,t) = I(t)(1-R)\alpha \exp(-\alpha z)$$
(3)

 表1
 铜锆非晶合金热物性参量

 c_{\circ} c_{\circ} α A B E_{F}
 $/(J \cdot m^{-3} \cdot k^{-2})$ $/(J \cdot m^{-3} \cdot k^{-2})$ $/(m^{-1})$ $/(s^{-1} \cdot k^{-2})$ $/(s^{-1} \cdot k^{-1})$ /eV

 321.3
 2.34×10⁶
 7.143×10⁶
 1.86×10⁶
 2.64×10¹²
 1.4

其中, T_a 和 T_i 分别为电子和晶格温度; C_a 和 C_i 为电 子和晶格热容; g为电声耦合系数; S(z,t)为激光源; k_e和 k_t分别为电子和晶格热传导率;R是材料的光 反射率;α是材料的吸收系数;z代表激光的入射 方向;I(t)表示激光光强随时间的分布。

虽然双温方程对电子体系吸收激光能量,电子 和声子之间的能量耦合以及靶材内部电子热传导 有很好的描述,但不能体现靶材的相变和蚀除过 程,分子动力学可以在这方面进行直观的描述,将 靶材吸收的飞秒激光能量等效成一个速度均衡力, 加载到原子上,以此实现双温方程和分子动力学的 结合。表达式如下

$$n_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i + \xi m_i v_i \tag{4}$$

$$F_i = -\nabla_{r_i} E_{\text{total}} \tag{5}$$

式中,
$$\xi = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} GV_{N} (T_{e}^{k} - T_{l}) / \sum_{i} m_{i} (v_{i}^{T})^{2}$$
 (6)

式中, *F_i* 表示作用在第*i*个原子上的力; *m_i* 表示原 子的质量; *r_i* 表示位移; *v_i* 表示原子速度; *ξ* 表示速 度均衡力,其大小主要取决于靶材内电子与晶格的 温度差; *G* 表示电声耦合系数; *V_N* 表示每层模拟网 格的体积。

原子间相互作用采用第二动量紧束缚势描述^[14],形式如下

$$U_{\text{total}} = \sum_{i} \left[E_{B}^{i} + E_{R}^{i} \right] \tag{7}$$

$$E_{B}^{i} = -\left\{\sum \xi_{\alpha\beta}^{2} \exp\left[-2q_{\alpha\beta}\left(\frac{r_{ij}}{r_{0}}-1\right)\right]\right\}^{1/2}$$
(8)

$$E_{R}^{i} = \sum A_{\alpha\beta} \exp\left[-p_{\alpha\beta}\left(\frac{r_{ij}}{r_{0}} - 1\right)\right]$$
(9)

式中, U_{total} 代表总势能; E_B^i , E_R^i 分别代表相互吸引 势和相互排斥势; α , β 分别代表 Cu 原子和 Zr 原 子; r_{ij} 代表第 i 个原子到第 j 个原子的距离; r_{o} 代 表第一近邻距离; $\xi_{\alpha\beta}$ 代表有效阶跃常数; $q_{\alpha\beta}$ 是描 述原子相对间距的常数。表2为铜锆非晶合金紧束 缚势函数参数^[15]。

表2 铜锆非晶合金紧束缚势函数参数

	Cu-Cu	Zr-Zr	Cu-Zr
$A_{\alpha\beta}/(eV/atom)$	0.107 4	0.184 4	0.1808
$p_{\alpha\beta}$	10.221 5	7.927 3	8.602 0
$q_{\alpha\beta}$	2.749 0	2.025 0	2.796
$\xi_{\alpha\beta}/({\rm eV}/{\rm atom})$	1.348 3	2.336 5	2.010 0
r _o	0.263 56	0.321 00	0.290 86

模拟中将 5×20×300个晶包的体心立方铜锆晶体薄膜作为初始模型,将其升温至 2 500 K,体系弛豫 10 ps 后以 30 K/ps 的速率降温到 300 K,得到横向尺寸 1.6×6.5 nm,纵向深度为 98 nm,总共 60 000个原子的铜锆非晶模型。激光入射 Z 的方向采用自由边界条件,底部采用压力传输边界条件¹¹⁶¹,X、Y 方向采用周期性边界条件。模拟中,采用的激光参数的中心波长为 800 nm,脉宽为 100 fs,能量密度从 40~200 mJ/cm²的单脉冲激光。

径向分布函数(radial distribution function-RDF) 是反映原子体系中原子对关系的函数,表示找到一 对相距为r的原子对的概率相对于在一个均匀分布 的体系中找到这样的原子对的概率的比值,可以有 效反映一个体系的原子排列的有序或无序。模拟 中采用VMD软件中径向分布函数(RDF)功能,对烧 蚀后的靶材进行结构分析。

2 结果与讨论

2.1 靶材烧蚀机制

能量密度为40 mJ/cm²,脉宽为100 fs的激光与 CuZr非晶合金作用后,采用双温-分子动力学耦合 的方法模拟计算得到的表层和底层电子、晶格温度 时间演化图,材料内部的温度演化图,压力演化图 和原子位型图(红色点与蓝色点分别代表Cu原子和 Zr原子)分别如图1a~图1d所示。



(a)双温 - 分子动力学耦合的方法模拟计算得到 的靶材表层和底层电子、晶格温度时间演化图



图1 能量密度为40 mJ/cm²,脉宽为100 fs的激光与 CuZr非晶合金作用后,采用双温 – 分子动力学耦合的 方法模拟计算得到的表层和底层电子、晶格温度时间 演化图(a),材料内部的温度演化图(b),压力演化图 (c)和原子位型图(d)

由图 1a 可知,低功率密度下,电子温度在 1 ps 以内迅速上升,但模拟层上下表面晶格温度上升度 较慢。图 1b,红色区域代表温度在靶材熔点以上 (熔点2500K),熔化深度在10nm以上区域。由图 lc可知,激光作用于靶材后,靶材表面温度迅速升高,并在表面形成一个自靶材表层往底部传播的压 应力,随后产生一个拉应力,也是往底部传播,这也 使得靶材先被压缩,表层温度上升,接着在拉应力 的作用下,发生膨胀,靶材表层温度逐渐降低。结 合图1b、图1c、图1d可知,40mJ/cm²能量密度下的 烧蚀深度在18nm附近,而此处的温度远低于材料 的熔化温度,在拉应力的作用下,靶材发生基于应 力的机械破碎而蚀除^[17]。由此可得,低能量密度下 非晶合金的飞秒激光烧蚀机制主要是基于应力的 机械破碎。

能量密度为160 mJ/cm²,脉宽为100 fs的激光与 CuZr非晶合金作用后,采用双温-分子动力学耦合 的方法模拟计算得到的表层和底层电子、晶格温度 时间演化图,材料内部的温度演化图,压力演化图 和原子位型图分别如图2a~图2d所示。



(a) 双温 - 分子动力学耦合的方法模拟计算得到 的靶材表层和底层电子、晶格温度时间演化图





图2 能量密度为160 mJ/cm²,脉宽为100 fs的激光与 CuZr非晶合金作用后,采用双温 – 分子动力学耦合的 方法模拟计算得到靶材的表层和底层电子、晶格温度 时间演化图(a),材料内部的温度演化图(b),压力演 化图(c)和原子位型图(d)

由图2a可知,在较高能量密度下,表层电子温 度在极短的时间内急剧上升到很高温度,且表层 与底层电子温差很大;表层晶格温度上升也很快, 在1 ps时间内迅速上升到远高于熔点的温度,由图 2b~图2d可知,能量密度为160 mJ/cm²与靶材作用 后,靶材内部的温度和压力随时间的演化与40 mJ/ cm²的基本相同,但靶材距离表层10 nm的区域,温 度超过了8750K,晶格温度远远超过了其熔化温 度,出现了晶格过热现象,而晶格强烈过热会造成 相爆炸189,产生少量尺寸较小,分布相对均匀的空 泡。由图 2d 可知,在 20~30 nm 区域,靶材温度高 于其熔化温度,产生热熔化并在拉应力的作用下, 干接近30 nm 处产生多个空泡, 靶材发生基于热熔 化和拉应力共同作用的热机械蚀除^{19]}。由此得知, 此能量密度下先产生由于晶格过热而引发的相爆 炸,接着又出现了热熔化和拉应力共同作用的热 机械蚀除。

能量密度为200 mJ/cm²,脉宽为100 fs 的激光与

CuZr非晶合金作用后,材料内部的温度演化图,压力 演化图和原子位型图分别如图3a~图3c所示。



(c)能量密度为200 mJ/cm²时的原子位型图

图 3 能量密度为 200 mJ/cm²,脉宽为 100 fs 的激光与 CuZr非晶合金作用后,材料内部的温度演化图(a),压力 演化图(b)和原子位型图(c)

由图 3a、图 3c可知,200 mJ/cm²能量密度下,距 离靶材表面 18 nm左右区域,晶格达到极高温度,晶 格强烈过热,导致相爆炸的产生,而靶材内部出现 了大范围的尺寸较小,分布均匀的空泡,随着时间 空泡持续增长。由图 3a~图 3c可知,在20~27 nm左 右区域,靶材产生了热熔化,并在拉应力的作用下 产生尺寸较小的空泡。相对于160 mJ/cm²能量密度 激光的烧蚀结果,200 mJ/cm²能量密度下,靶材中晶 格过热区域更广,相爆炸成为材料去除的主导机制。结合图3a~图3c可得,高能量密度下,热机械蚀除和相爆炸共同存在于烧蚀过程,随着能量密度的增加,相爆炸成为靶材主要的蚀除机制。

2.2 靶材原子结构的径向分布函数及结构分析

采用VMD软件中径向分布函数(RDF)功能,对 靶材发生烧蚀处以下 20 nm 区域进行结构分析,并 对比了晶体 CuZr,淬火处理后得到的非晶 CuZr 和飞 秒激光与非晶 CuZr 相互作用后靶材中各原子对的 径向分布函数。g(r)代表径向分布函数,横轴r表 示从一个原子出发,离开这个原子的距离,纵轴表 示在某个距离上出现原子的个数或者可能性,r的 参数设置为0.01~1 nm。

能量密度为80 mJ/cm²时,脉宽100 fs的激光与 经淬火处理得到的非晶CuZr相互作用后的温度演 化图如图4a。由图4a可知,在5 ps时刻的温度在 2800 K左右,靶材在200 ps时刻,材料去除之后,靶 材表层的温度在1800 K左右,冷却速度大于5 k/ ps,此冷却速度大于使靶材保持非晶原子结构所需 的2 k/ps的冷却速度^[20]。

由于玻璃态合金的结构具有短程有序性,因此 有确定的最近邻和次近邻原子层,相应的径向分布 函数中有清晰可见的第一峰和第二峰。另一方面, 玻璃态合金中不存在长程序,因此在径向分布函数 的第三近邻以后几乎没有可分辨的峰位,而晶体材 料有一系列特征峰,与材料长程有序的原子结构相 对应,图4b、图4c和图4d中黑色曲线,红色曲线和 蓝色曲线分别代表晶体CuZr,淬火处理后得到的非 晶CuZr和飞秒激光与非晶CuZr相互作用后,200 ps 时刻靶材中各原子对的径向分布函数。





(b)晶体 CuZr,淬火处理后的非晶 CuZr 和烧蚀非晶 CuZr 200 ps后,材料中Cu-Cu原子对的径向分布函数



(c)晶体CuZr,淬火处理后的非晶CuZr和烧蚀非晶CuZr 200 ps后,材料中Cu-Zr原子对的径向分布函数



(d)晶体CuZr,淬火处理后的非晶CuZr和烧蚀非晶CuZr 200 ps后,材料中Zr-Zr原子对的径向分布函数

图4 能量密度为80 mJ/cm²,脉宽为100 fs的激光和CuZr 非晶合金相互作用后的温度演化图(a),晶体CuZr,非晶 CuZr和烧蚀非晶CuZr 200 ps后,材料中不同原子对径向 分布函数图Cu-Cu(b),Cu-Zr(c),Zr-Zr(d) 由图4b,图4c和图4d中可知,晶体CuZr的径向分布函数有一系列特征峰,代表着原子结构长程有序;淬火处理后材料的径向分布函数有着清晰第一个和第二个峰,没有长程峰,这是非晶材料原子结构最显著的特征^[21],表明经淬火处理后,晶体CuZr转变为非晶CuZr。能量密度为80 mJ/cm²,脉宽为100 fs的激光与淬火处理后得到的非晶CuZr。能量密度为80 mJ/cm²,脉宽为100 fs的激光与淬火处理后得到的非晶CuZr。能量密度为60 mJ/cm², mgmmm。 理后得到的非晶CuZr的径向分布函数是一致的,表明非晶CuZr与激光相互作用后,原子仍然保持着无序化。

能量密度为120 mJ/cm²,脉宽为100 fs的激光与 淬火处理后得到的非晶CuZr相互作用后,材料内部 的温度演化图如图5a。由图5a可知,100 ps时刻靶 材表面的温度在2300 K左右,200 ps时刻靶材表面 的温度在2000 K左右,靶材表层的降温速度大约为 3 k/ps,此冷却速度大于使靶材保持非晶原子结构所 需的2 k/ps的冷却速度^[20]。



(b)晶体 CuZr,淬火处理后的非晶 CuZr 和烧蚀非晶 CuZr 200 ps后,材料中Cu-Cu原子对的径向分布函数



(c)晶体CuZr,淬火处理后的非晶CuZr和烧蚀非晶CuZr200ps后,材料中Cu-Zr原子对的径向分布函数



(d)晶体CuZr,淬火处理后的非晶CuZr和烧蚀非晶CuZr 200 ps后,材料中Zr-Zr原子对的径向分布函数

图5 能量密度为120 mJ/cm²,脉宽为100 fs的激光和 CuZr非晶合金相互作用后的温度演化图(a),晶体 CuZr, 淬火处理后得到的非晶 CuZr 和烧蚀非晶 CuZr 200 ps 时 刻,材料中不同原子对径向分布函数图 Cu-Cu(b),Cu-Zr(c),Zr-Zr(d)

图 5b、图 5c 和图 5d 中黑色曲线,红色曲线和蓝 色曲线分别代表晶体 CuZr,淬火处理后得到的非晶 CuZr 和飞秒激光与非晶 CuZr 相互作用后,200 ps 时 刻靶材中各原子对的径向分布函数。

由图 5b、图 5c、图 5d 可知,能量密度增大到 120 mJ/cm²时,靶材中的 Cu-Cu, Cu-Zr 和 Zr-Zr 原子 对的径向分布函数分布图还是保持着非晶材料的 特殊曲线,这表明,飞秒激光与靶材相互作用后,材 料内部的原子保持着无序化状态,靶材未发生明显 晶化。

3 结 论

采用结合双温模型的分子动力学的方法,数值模 拟了脉宽100 fs,能量密度为40~200 mJ/cm²的飞秒激 光与 CuZr 非晶合金的相互作用过程。低能量密度 下,靶材的烧蚀机制主要表现为机械破碎,高能量 密度下,热机械蚀除和相爆炸共同存在于靶材的烧 蚀过程,随着能量密度的增加,相爆炸成为主要蚀 除机制;激光能量密度增加到120 mJ/cm²时,靶材中 Cu-Cu,Cu-Zr,Zr-Zr原子对的径向分布函数有着明 显的第一峰和第二峰,与非晶材料长程无序,短程 有序的原子结构相一致,这表明,激光与靶材相互 作用后,靶材材料内部的原子保持着无序状态,材 料未发生明显晶化。

参考文献

- Nekouie V, Abeygunawardane-Arachchige G, Roy A, et al. Bulk Metallic Glasses: Mechanical Properties and Performance[M]// Mechanics of Advanced Materials. Springer International Publishing, 2015:101-134.
- [2] Foroughi A, Tavakoli R, Aashuri H. Molecular dynamics study of structural formation in Cu50-Zr50 bulk metallic glass[J]. Journal of Non- Crystalline Solids, 2015, 432: 334-341.
- [3] Ward L, Dan M, Windl W, et al. Structural evolution and kinetics in Cu-Zr Metallic Liquids[J]. Physical Review B, 2013, 88(13):3532-3540.
- [4] Zhao S. A theoretical study on composition location of the best glass formers in Cu-Zr amorphous alloys[J]. Journal of Physical Chemistry A, 2015, 119(4):806-14.
- [5] WANG Dong-ning. Femtosecond laser micromachining[M]. Springer, 2012.
- [6] Lucas L, Zhang J, Energetics A. Femtosecond laser micromachining: a back-to-basics primer[J]. Industrial Laser Solutions, 2012.
- [7] 王新林, 戴能利, 李玉华, 等. 金属玻璃飞秒激光烧蚀特性[J]. 中国激光, 2007, 34(9): 1297-1302.
- [8] Wu C, Karim E T, Volkov A N, et al. Atomic movies of laser, induced structural and phase transformations from molecular dynamics simulations[J]. Springer, 2014, 191: 67,100.
- [9] Wu C, Zhigilei L V. Microscopic mechanisms of laser (下转第29页)

- [3] Wang L P, Zhang Z M. Wavelength-selective and diffuse emitter enhanced by magnetic polaritons for thermophotovoltaics[J]. App Phys Lett, 2012,100(6):063902.
- [4] Sakurai A, Zhao B, Zhang Z M. Resonant frequency and bandwidth of metamaterial emitters and absorbers predicted by an RLC circuit model[J]. J Quant Spectrosc Radiat Transf, 2014, 149:33-40.
- [5] Feng R, Ding W, Liu L. Dual-band infrared perfect absorber based on asymmetric T-shaped plasmonic array[J]. Opt Express, 2014, 22(S2):A335-A343.
- [6] Cui Y, Fung K H, Xu J, et al. Ultrabroadband light absorption by a sawtooth anisotropic metamaterial slab[J]. Nano Lett, 2012, 12(3):1443-1447.
- [7] Wu J, Zhou C, Yu J, et al. TE polarization selective absorber based on metal-dielectric grating structure for infrared frequencies[J]. Opt Commun, 2014, 329:38-43.
- [8] Feng R, Qiu J, Cao Y, et al. Omnidirectional and polarization insensitive nearly perfect absorber in one dimensional meta-structure[J]. Appl Phys Lett, 2014, 105(18):181102.
- [9] Desieres Y,Rochat N, Espiau delamaestre R. Subwavelength optical absorber with an integrated photon sorter[J]. Appl Phys lett, 2012, 100(11), 113305.
- [10] Hendrickson J, Guo J, Zhang B, et al. Wideband perfect light absorber using spatially multiplexed plasmon reso-

(上接第21页)

spallation and ablation of metal targets from large-scale molecular dynamics simulations[J]. Applied Physics A, 2014, 114(1): 11-32.

- [10] Karim, Eaman T. Molecular dynamics study of femtosecond laser interactions with Cr targets[J]. AIP Conference Proceedings-American Institute of Physics, 2012, 1464(1).
- [11] Marinier S, Lewis L J. Femtosecond laser ablation of Cu x Zr 1 x bulk metallic glasses: a molecular dynamics study
 [J]. Physical Review B, 2015, 92(18): 184108.
- [12] Allen M P, Tildesley D J. Computer simulation of liquids[M]. Oxford University Press, 1989.
- [13] Anisimov S I. Vaporization of metal absorbing laser radiation[J]. Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics, 1968, 27: 182.
- [14] Cleri F, Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys[J]. Physical Review B, 1993, 48(1): 22.
- [15] Duan G, Xu D, Zhang Q, et al. Molecular dynamics study of the binary Cu 46 Zr 54 metallic glass motivated by experiments: glass formation and atomic-level structure[J]. Physical Review B, 2005, 71(22): 224208.

nance metal square structures[J]. Opt Soc Am, 2013, B30 (3):656-662.

- [11] Nielsen M G,Pors A, Albrektsen O, et al. Efficient absorption of visible radiation by gap plasmon resonators[J]. Opt Express, 2012, 20(12):13311-13319.
- [12] Cui Y, Fung K H, Xu J, et al. Ultrabroadband light absorption by a sawtooth anisotropic metamaterial slab[J]. Nano Lett, 2012,12(3):1443-1447.
- [13] Ding F, Cui Y, Ge X, et al. Ultra-broadband microwave metamaterial absorber[J]. Appl Phys Lett, 2012, 100(10): 103506.
- [14] Ye Y Q, Jin Y, He S. Omnidirectional, polarization-insensitive and broadband thin absorber in the terahertz regime[J]. J Opt Soc Am, 2012, 27(3):498-504.
- [15] Engheta N. Circuits with light at nanoscales: optical nanocircuits inspired by metamaterials[J]. Science 317 (5845), 2007:1698-1702.
- [16] Wang Y, Jiang X,Li Q, et al. High-resolution monitoring of wavelength shifts utilizing strong spatial dispersion of guided modes[J]. Appl Phys Lett, 2012, 101(6):061106.
- [17] Wang Y, Cao Z, Yu T, et al. Enhancement of the superprism effect based on the strong dispersion effect of ultrahigh-order modes[J]. Opt Lett, 2008, 33(11):1276-1278.
- [16] Schäfer C, Urbassek H M, Zhigilei L V, et al. Pressuretransmitting boundary conditions for molecular-dynamics simulations[J]. Computational Materials Science, 2002, 24(4): 421-429.
- [17] Moshe E, Eliezer S, Dekel E, et al. Measurements of laser driven spallation in tin and zinc using an optical recording velocity interferometer system[J]. Journal of applied physics, 1999,86(8): 4242-4248.
- [18] Kelly R, Miotello A. Comments on explosive mechanisms of laser sputtering[J]. Applied Surface Science, 1996, 96: 205-215.
- [19] Zhigilei L V, Garrison B J. Microscopic mechanisms of laser ablation of organic solids in the thermal and stress confinement irradiation regimes[J]. Journal of Applied Physics, 2000, 88(3): 1281-1298.
- [20] Wang J, Hodgson P D, Zhang J, et al. Effects of quenching rate on amorphous structures of Cu 46 Zr 54 metallic glass[J]. Journal of materials processing technology, 2009, 209(9): 4601-4606.
- [21] 泽仑. 非晶态固体物理学[M]. 北京:北京大学, 1988.