Письма в ЖЭТФ, том 122, вып. 12, с. 807 – 814

Моделирование взаимодействия коротко-импульсного лазерного излучения с тонкими пленками для производства (синтеза) наночастиц

Д. С. Иванов[+1)], *А. А. Фроня*[+], *М. С. Григорьева*[+], *С. Ю. Лукашенко*[*], *Е. И. Маврешко*[+], *И. Н. Завестовская*[+×], *А. В. Колобов*[+]

[+]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия*

[*]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт аналитического приборостроения РАН, 198095 С.-Петербург, Россия*

[×]*Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 7 октября 2025 г.
После переработки 3 ноября 2025 г.
Принята к публикации 3 ноября 2025 г.

Статья посвящена исследованию механизмов формирования наночастиц золота методом лазерной абляции тонких пленок в жидкой среде. Для этого проведены численные моделирования процессов лазерного взаимодействия с облучаемой мишенью. Моделирования производились методом молекулярной динамики, где учет механизма нагрева мишени был представлен на основании данных,полученных из предварительных вычислений с помощью двухтемпературной модели. На основании полученных результатов, был сделан вывод о соответствующих вкладах различных лазерно-индуцированных процессов в итоговые характеристики получаемых коллоидных растворов,включая размерные свойства, необходимые для биомедицинских применений.

DOI: 10.7868/S3034576625120167

Введение. В последнее десятилетие возрос интерес к наночастицам (НЧ) для применения в биомедицине, особенно в области визуализации и лечения раковых образований. Применение НЧ обладает целым рядом преимуществ над хирургическими методами, такими как локализованность,многофункциональность, неинвазивность и возможность использования различных типов материалов. Так, в работах [1–4] показано использование уникальных сенсибилизирующих свойств НЧ для гипертермии, фотодинамической терапии и ядерной биомедицины в бор-нейтрон-захватной терапии.

На сегодняшний день золотые НЧ являются наиболее изученными наноматериалами для биомедицинских применений. Однако, важной задачей остается разработка методов и технологий синтеза, позволяющих контролируемым образом формировать НЧ достаточно малых размеров 1–15 нм. Как минимум, необходимо увеличить долю таких частиц в общем объеме получаемых коллоидных растворов и уменьшить количество дополнительных процедур и стадий производства. Одним из разрабатывающихся в этом направлении подходов является синтез НЧ методом лазерной абляции в жидкости из тонких пленок, которые ограничены нанометровыми масштабами по толщине.

Для биомедицинских применений импульсная лазерная абляция в жидкости (ИЛАЖ) зарекомендовала себя как простой и эффективный метод генерации НЧ [5–8]. Экспериментально показано, что при контакте продуктов лазерной абляции (нанокластеров, мелких капель и паров) с водой или нейтральной жидкой средой они эффективно охлаждаются (в значительной степени за счет оттока их кинетической энергии в теплоту парообразования жидкости) и постепенно слипаются, образуя более крупные НЧ (более 100 нм). При этом наличие в растворе реакционноспособных частиц может остановить их рост и, следовательно, уменьшить средний размер образующихся НЧ (менее 100 нм) [9]. В результате, одно из важнейших свойств образующихся НЧ – их средний размер, в зависимости от параметров облучения, может иметь широкое и мультимодальное распределение [10, 11]. Конечные параметры полученных коллоидных растворов также зависят от свойств исходных материалов и окружающих сред [12, 13].

[1)]e-mail: ivanovds@lebedev.ru

В настоящее время основная масса работ приходится на синтез НЧ из объемных материалов, где толщина материала вдоль направления воздействия лазерного излучения составляет больше десятков микрон [14–16]. Экспериментальных работ по синтезу НЧ из пленок с толщиной до 100 нм достаточно мало. Так, в экспериментах по абляции тонких пленок [17, 18] исследуется влияние толщины пленок и энергии лазерного излучения на распределение НЧ по размерам. Результаты показали возможность формирования как уни-, так и бимодального распределения по размерам, с одной из фракций меньше 100 нм.

Недавние теоретические работы [19–21] позволили выявить основные механизмы генерации металлических НЧ в процессе ИЛАЖ и причины установления бимодального распределения частиц по размерам, которое было обнаружено в экспериментах [10, 11, 17]. Наши предыдущие исследования абляции толстых (∼ мкм) мишеней [22] позволили предложить модель, применение которой дало понимание роли лазерно-индуцированных процессов в облученной мишени и их вкладе в итоговые характеристики НЧ. Однако, на сегодняшний день в отношении абляции тонких пленок, не существует единой и общепринятой теории, которая описывала бы и предсказывала экспериментальный выход НЧ с заданными свойствами.

Таким образом, актуальной является задача развития технологий контролируемого синтеза НЧ из тонких пленок для биомедицинских применений,которая требует фундаментального изучения процесса лазерной абляции. В настоящей работе представлено исследование механизмов генерации НЧ золота в жидкости при взаимодействии лазерного излучения с пленкой золота нанометровой толщины (20 нм) в жидкой окружающей среде методом молекулярной динамики (МД).

Теоретическая модель. Для решения поставленной задачи были проведены расчеты методом МД в ее многопроцессорной реализации,чтобы достичь достаточно большого анализируемого объема и возможности последующего прямого сравнения результатов моделирования с экспериментом.

На основании предыдущих теоретических исследований [21, 23], подкрепленных экспериментальными измерениями [9], существуют два основных режима абляции, ответственные за ее динамику: 1) режим откола (спалляции), как результат релаксации внутренних напряжений при скорости нагрева мишени быстрее скорости ее акустической релаксации, и 2) режим фазового взрыва, как результат перегрева поверхности мишени выше критического значения температуры облученного материала. В короткоимпульсных (фемто- и пикосекундных) экспериментах ИЛАЖ, как правило, реализуются оба режима. Но, именно первый режим ведет к появлению крупной фракции НЧ, как результат распада неустойчивостей Рэлей–Тейлора, возникающих на движущейся границе раздела двух сред. При этом, данный режим в значительной степени обуславливается наличием градиента по температуре (и, как следствие, по давлению) по глубине прогреваемой мишени. Следовательно, уменьшением толщины аблируемой мишени мы способствуем минимизации вклада режима откола (спалляции) в итоговые характеристики получаемых НЧ. Было также установлено [24, 25], что характерная глубина прогрева мишени золота при использовании фемто- и пикосекундных импульсов составляет порядка 250 нм. Следовательно, выбирая толщину моделируемой пленки на порядок меньшую (20 нм), мы, как минимум, исключаем развитие градиента по температуре (и давлению) внутри прогреваемой мишени.

Используемая в моделировании длительность импульса 1 пс обусловлена выбором короткоимпульсного режима как перспективного метода ИЛАЖ для получения НЧ требуемых характеристик, обоснованного в работе [22]. Скорость нагрева мишени вследствие воздействия короткоимпульсного лазерного излучения определяется скоростью перетекания энергии от горячих электронов к фононным колебаниям решетки. Ее значение и временной контур были определены в предварительных вычислениях с помощью двухтемпературной модели (ДТМ) и напрямую учтены в МД. Таким образом, мы аппроксимируем достаточно точную, но дорогостоящую с точки зрения расчетных ресурсов совмещенную модель МД-ДТМ [26], более эффективной классической МД в многопроцессорном режиме. Предлагаемая модель схематически показана на рис. 1.

Для расчета межатомных взаимодействий в пленке золота использовался межатомный потенциал, реализующий метод вставленного атома с параметризацией, предложенной Жаховским [27]. Этим же автором была предложена удачная модель воды,представленная одной частицей с потенциалом межатомного взаимодействия так же по методу вставленного атома [28]. Несмотря на недооценку теплоемкости, такая модель хорошо описывает упругие (механические) свойства воды, которые, как было показано в [19–22], играют определяющую роль в исследовании механизмов формирования НЧ. Наконец, взаимодействие между атомами золота и во-

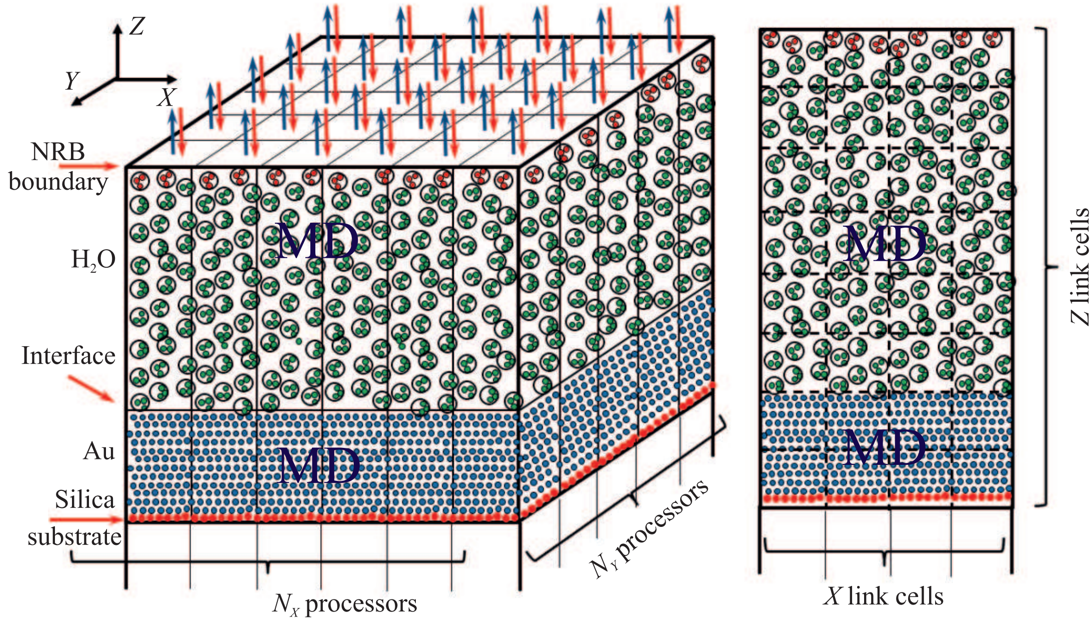

Рис. 1. (Цветной онлайн) Расчетная область для моделирования взаимодействия лазерного излучения с тонкими пленками золота. На нижней границе пленка взаимодействует с неподвижной подложкой. На верхней границе установлены безотражательные граничные условия, с возможностью их динамического перемещения по Z направлению (синие и красные указатели направления). Указано разбиение системы на процессоры в направлениях X и Y (слева). Указано 3Д разбиение на ячейки внутри каждого процессора (справа)

ды описывалось с помощью потенциала Леннарда–Джонса, как это было предложено и показало свою эффективность в работе [29].

Для моделирования была подготовлена расчетная ячейка, состоящая из тонкой пленки золота 20 нм и слоя воды 100 нм с атомным разрешением в пределах его толщины, включающая в себя 30 000 000 частиц. Предполагая, что размер лазерного пятна на поверхности мишени намного больше, чем поперечный размер моделируемой системы, были использованы периодические граничные условия по X и Y направлениям, перпендикулярным распространению лазерного импульса. На верхней границе расчетной ячейки применялись безотражательные граничные условия для поглощения лазерно-индуцированной волны разряжения. На нижней границе пленка золота взаимодействует с подложкой (предметное стекло) через межатомный потенциал Леннарда–Джонса, где коэффициент связи золото–стекло (адгезия) был взят как 10 % от адгезии золото–золото. Моделирование проводилось для взаимодействия лазерного импульса длительностью $\tau_{\rm las} = 1$ пс с пленкой золота толщиной 20 нм для различных значений плотностей падающих энергий 0.5, 0.7, 1.0, и 1.5 Дж/см^2 (порог плавления 0.25 Дж/см^2 [30]).

Поглощение лазерного излучения,ввиду равномерного нагрева 20 нм пленки по всей ее толщине, было описано стандартным методом представления моделирования при заданном температурном режиме с помощью Беренсон термостата. При этом выделение тепловой энергии $E_{\Delta t}$ в образце за счет поглощения лазерного излучения за каждый шаг Δt задавалось Гауссианом по времени с длительностью импульса, соответствующей времени характерного нагрева кристаллической решетки за счет электрон-фононного взаимодействия τ_{e-ph}, а скорости всех частиц $V_{x,y,z}$ калибровались каждый шаг МД по следующему правилу:

$$V^{\rm new}_{x,y,z} = V^{\rm old}_{x,y,z} \times \xi, \text{ где } \xi = \sqrt{1 + \frac{E_{\Delta t}}{\Sigma_i Q_i}} \text{ и}$$

Q_i – кинетическая энергия i -го атома,

где выделение энергии в единице объема облучаемого образца за 1 МД шаг:

$$E_{\Delta t} = F_{\rm inc}(1 - R_{\rm int})\frac{1}{\tau_{\rm las}}\sqrt{\frac{\omega}{\pi}}\exp\left(-\omega\frac{(t-t_0)^2}{\tau^2_{\rm las}}\right) \times \Delta t$$
$$\text{и } t_0 = 2.5\tau_{\rm las},$$

$F_{\rm inc}$ – падающая плотность энергии (флюенс) и $R_{\rm int}$ интегральное значение отражения за время всего импульса, оцененного с помощью ДТМ, где отражающая функция была представлена моделью, учитывающей ее зависимость от электронной температуры [31].

Также в представленной модели не учитываются нелинейные эффекты, обусловленные прохождением лазерного излучения через слой воды. Тем не менее такой общий подход является важным промежуточным шагом при исследовании основных механизмов, ответственных за процесс формирования НЧ с помощью лазерной абляции в жидкой среде.

Результаты моделирования. Для демонстрации полученных результатов, ниже мы детально разбираем случай падающей плотности энергии 1 Дж/см^2, где формирование НЧ оказалось обусловленно максимально большим числом вовлеченных процессов. Требуемое время моделирования определялось окончанием активных процессов трансформации вещества и составляло 5–25 нс. При этом механизмы вовлеченных процессов изучались посредством визуализации атомных конфигураций и анализа динамики локальных термодинамических характеристик: температуры, давления и плотности.

На рисунке 2a изображена последовательность атомных конфигураций системы после ее облучения. Эволюция продуктов абляции разделяется на несколько значимых процессов, показанных с помощью визуализации только атомов золота на рис. 2b. Так, благодаря релаксации внутренних напряжений, вызванных быстрым лазерным нагревом мишени (быстрее, чем акустическая релаксация), мы можем наблюдать отрыв пленки от подложки уже через 50 пс после поглощения лазерного импульса. Далее, к 100 пс происходит разрушение самой пленки через механизм откола [32] с образованием расслоения и крупных отколов мишени. Однако, благодаря существенному механическому сопротивлению водной среды, в период времени 250–500 пс наблюдается ее повторное слияние. Далее, в верхней части абляционного столба, ввиду активного парообразования, вновь возникает избыточное давление, вызывающее движение аблированных продуктов обратно по направлению к подложке к моменту времени 1000 пс. Так же в период времени 1000–2500 пс мы можем наблюдать активное формирование гидродинамических неустойчивостей и их последующий распад на крупные НЧ. Наконец, в период 500–2000 пс за счет оттока тепла в теплоту парообразования воды (~ 40.7 кДж/моль) в верхней части абляционного столба мы наблюдаем постепенную конденсацию паров золота в мелкие (менее 5 нм) НЧ (рис. 3b).

В моделируемой ситуации нагрева мишени в течение 1 пс плотность падающей энергии 1 Дж/см^2 является достаточно большой по сравнению с ее пороговым значением для классического плавления, и равномерный нагрев тонкой мишени приводит к закритическим значениям ее температуры (~ 7000 K), что отражено на рис. 3a. Максимальная температура более чем 10000 K достигается к окончанию процесса нагрева мишени, предопределяя таким образом механизм абляции через фазовый взрыв. Такой режим абляции выгоден для формирования мелких НЧ одной фракции, благодаря активной конденсации металлического пара в верхней части абляционного столба, что отображено на рис. 3a резким падением его температуры в период 1000–3000 пс.

Также, в процессе резкого нагрева, из-за механического противодействия водного слоя, ограничивающего релаксацию внутренних напряжений, скорость расширения облученной мишени оказывается меньше, чем ее значение при аналогичных условиях в вакууме [33]. К концу нагрева это приводит к накоплению внутренних напряжений более 10 ГПа даже в тонкой пленке, результатом релаксации которых становится генерация ударной волны (рис. 3b), распространяющейся через всю расчетную ячейку и частично инициируя механизм извлечения вещества через откол и установлению мощных гидродинамических течений. Возникающие при таких течениях неустойчивости Рэлей–Тэйлора, вследствие их распада, определяют формирование крупной фракции получаемых НЧ. При этом формирующиеся крупные НЧ имеют явную тенденцию к переосаждению на остаточный после абляции материал на подложке.

Таким образом, эволюция облученной мишени определяется сочетанием механических процессов (ударная волна, гидродинамические неустойчивости) и термических эффектов (испарение, конденсация). Как было показано в наших недавних исследованиях [21], такие два механизма абляции облученной мишени неизбежно ведут к возникновению бимодального распределения получаемых НЧ, а возможность их управления для случая толстых мишеней была продемонстрирована в [22]. Поскольку электронная теплопроводность сильно зависит как от температуры электронов и решетки [34], так и от плотности материала [35], изменением параметров лазерного облучения можно подавить или изолировать тот или иной режим нагрева мишени для манипулирования конечными фракциями генерируемых НЧ. В частности, для металлов было обнаружено [25], что длинные нс импульсы (значительно более длинные, чем характерное время установления электрон-фононного равновесия ~ 1–30 пс [36]) приводят к постепенной релаксации внутренних напряжений уже во время распространения импульса, что позволяет исключить откольный механизм абляции, а следовательно, подавить возникновение

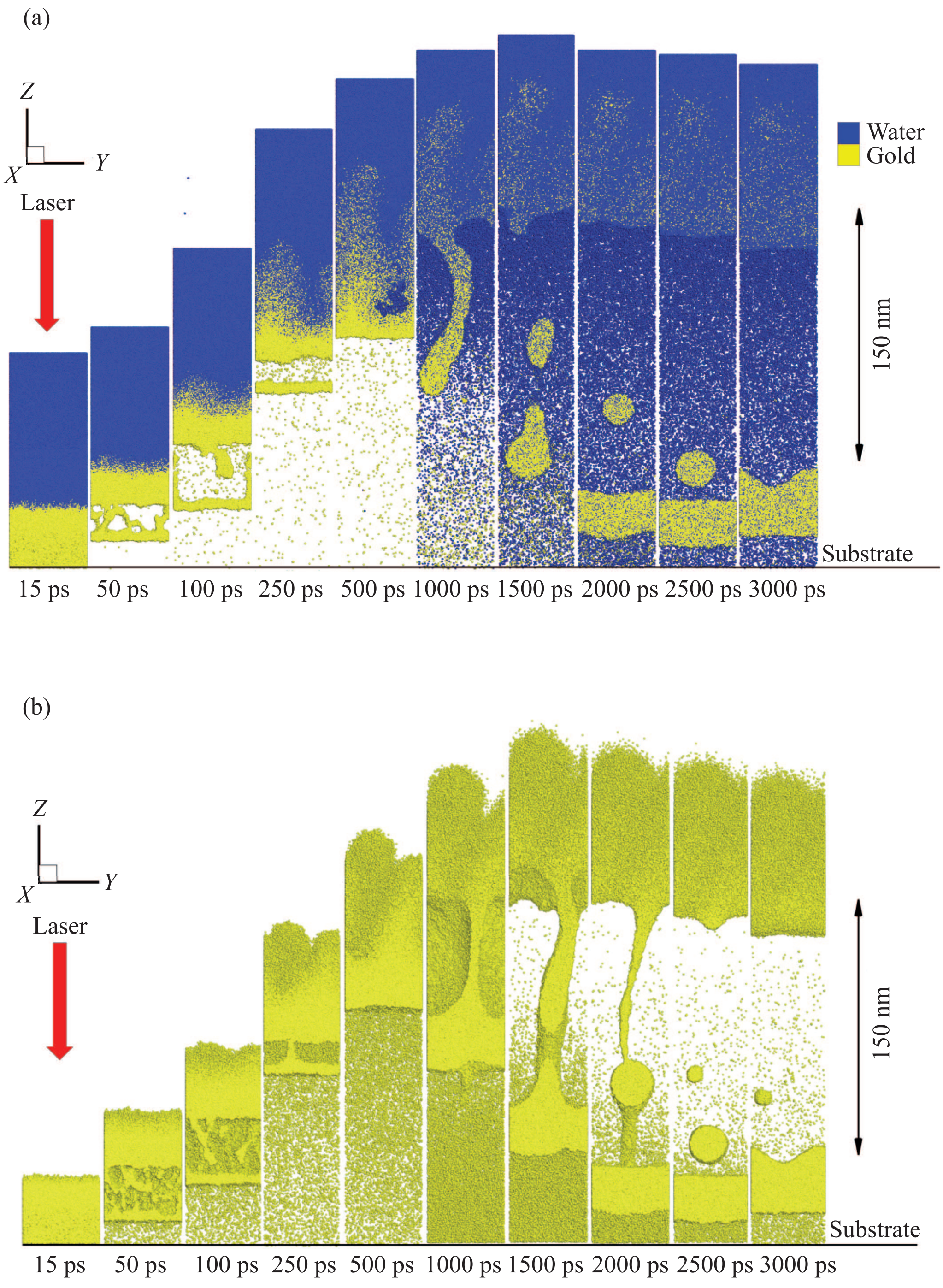

Рис. 2. (Цветной онлайн) Результаты моделирования взаимодействия 1 пс лазерного импульса с 20 нм пленкой золота в жидкой среде. (a) – Эволюция структуры облученной золотой пленки под слоем воды показана в виде последовательности атомных конфигураций системы в определенные моменты времени после начала импульса. (b) – Эволюция абляционных продуктов облученной мишени для детализации морфологических изменений. Жидкая среда не показана для лучшего визуального анализа

крупной фракции НЧ. Кроме того, если плотность падающей энергии достаточно большая и удовлетворяет режиму подавления канала электронной теплопроводности, тепло будет удерживаться вблизи поверхности облучаемого материала. В таких условиях абляция материала происходит по механизму взрывного кипения с образованием более мелкой фракции НЧ. Следовательно, использование тонких пле-

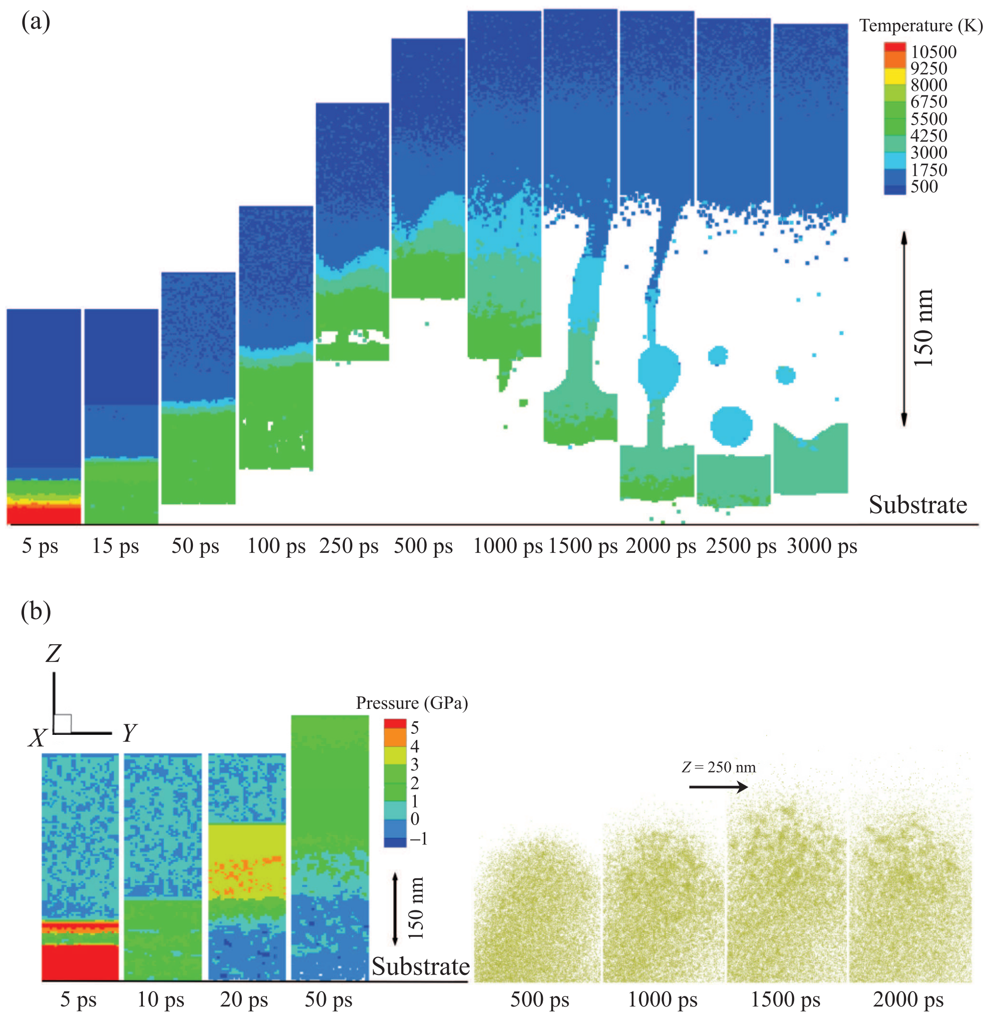

Рис. 3. (Цветной онлайн) Результаты моделирования взаимодействия 1 пс импульса с 20 нм пленкой золота в жидкой среде. (a) – Эволюция температурного поля моделируемой области показана для различных времен. Локальная температура в расчетной области градуирована цветовой шкалой. (b) – Динамика изменения локального давления (градуирована цветовой шкалой) и релаксация напряжений в системе "золотая пленка–водный слой" на начальных стадиях (5–50 пс). (c) – Эволюция верхней части абляционного столба, где атомы воды не показаны для лучшей визуализации формирования НЧ золота

нок для получения мелкой и единственной фракции НЧ за счет ИЛАЖ представляется более выгодным вследствие достижения закритических значений температур облученной мишени и ее последующей абляции, в значительной степени обусловленной фазовым взрывом.

Заключение. Методом МД в ее многопроцессорной реализации проведено моделирование взаимодействия 1 пс лазерного импульса с пленкой золота толщиной 20 нм для падающих плотностей энергий 0.5–1.5 Дж/см^2. Изучение динамики лазерно-индуцированных процессов в течение 3000 пс показали, что присутствуют два механизма, ответственных за формирование НЧ. Более крупная фракция НЧ возникает в нижней части абляционного столба в результате распада неустойчивостей Рэлея–Тейлора, тогда как более мелкая фракция, связанная с реализацией механизма фазового взрыва, формируется в его верхней части. При этом более крупная фракция имеет тенденцию к переосаждению на аблируемую мишень. Учитывая характер нагрева тонких пленок, их использование в ИЛАЖ для получения НЧ унимодальных мелких фракций, востребованных в биомедицинских приложениях, представляется более выгодным. Результаты данного моделирования планируется использовать для проведения серии экспериментов по абляции тонких нанометровых пленок золота наносекундными импульсами.

Работы по моделированию производились на кластерном суперкомпьютере Вычислительного Центра ФИАН.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках Соглашения # 075-15-2025-453.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

---

1. K. McNamara and S. A. M. Tofail, Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 27981 (2015); DOI: 10.1039/c5cp00831j.
2. M. Kim, J. H. Lee, and J. M. Nam, Adv. Sci. **6**, 1900471 (2019); DOI: 10.1002/advs.201900471.
3. M. V. Filimonova, D. D. Kolmanovich, G. V. Tikhonowski et al. (Collaboration), Doklady Biochemistry and Biophysics **516**, 111 (2024); DOI: 10.1134/S1607672924700819.
4. I. N. Zavestovskaya, A. I. Kasatova, D. A. Kasatov et al. (Collaboration), Int. J. Mol. Sci. **24**, 17088 (2023); DOI: 10.3390/ijms242317088.
5. A. V. Kabashin and V. Y. Timoshenko, Nanomedicine **11**, 2247 (2016); DOI: 10.2217/nnm-2016-0228.
6. A. V. Kabashin, A. Singh, M. T. Swihart, I. N. Zavestovskaya, and P. N. Prasad, ACS Nano **13**, 9841 (2019); DOI: 10.1021/acsnano.9b04610.
7. D. Zhang, B. Gökce, and S. Barcikowski, Chem. Rev. **117**, 3990 (2017); DOI: 10.1021/acs.chemrev.6b00468.
8. F. Mafuné, J. Kohno, Y. Takeda, T. Kondow, and H. Sawabe, J. Phys. Chem. B **105**, 5114 (2001); DOI: 10.1021/jp001803b.
9. A. V. Kabashin, M. Meunier, C. Kingston, and J. H. T. Luong, J. Chem.Phys. B **107**, 4527 (2003). https://doi.org/10.1021/JP034345Q
10. S. Uusitalo, A. Popov, Y. V. Ryabchikov, O. Bibikova, H.-L. Alakomi, R. Juvonen, V. Kontturi, S. Siitonen, A. Kabashin, I. Meglinski, J. Hiltunen, and A. Laitila, J. Food Eng. **212**, 47 (2017); 10.1016/j.jfoodeng.2017.05.007.
11. S. Barcikowski, A. Menendez-Manjon, B. Chichkov, M. Brikas, and G. Raciukaitis, Appl. Phys. Lett. **91**, 083113 (2007); https://doi.org/10.1063/1.2773937.
12. J. Bonse, S. Baudach, J. Krüger, W. Kautek, and M. Lenzner, Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process. **74**, 19 (2002); https://doi.org/10.1007/s003390100893.
13. G. Marzun, J. Nakamura, X. Zhang, S. Barcikowski, and P. Wagener, Appl. Surf. Sci. **348**, 75 (2015); https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.01.108.
14. D. Yang, S. Lee, B. Chen, and S. Nikumb, Journal of Laser Micro/Nanoengineering **3**, 3 (2008); https://doi.org/10.2961/JLMN.2008.03.0004.
15. J. P. Sylvestre, A. Kabashin, E. Sacher, and M. Meunier, Appl. Phys. **80**, 753 (2005); https://doi.org/10.1007/s00339-004-3081-4.
16. M.-R. Kalus, C. Rehbock, N. Barsch, and S. Barcikowski, Materials Today: Proceedings **4**, 93 (2017); https://doi.org/10.1007/978-3-030-63647-0_31.
17. D. M. Bubb, S. M. O'Malleyet, J. Schoeffling, R. Jimenez, B. Zinderman, and S. Y. Yi, Chem. Phys. Lett. **565**, 65 (2013); DOI: 10.1016/j.cplett.2013.01.002.
18. В. С. Жигарьков, Е. В. Ивановская, К. О. Айыыжы, А. В. Овчаров, Письма в журнал технической физики **22**, 31 (2023); DOI: 10.61011/PJTF.2023.22.56597.19649.
19. C.-Y. Shih, R. Streubel, J. Heberle, A. Letzel, N. V. Shugaev, C. Wu, M. Schmidt, B. Gokce, S. Barcikowski, L. V. Zhigilei, Nanoscale **10**, 6900 (2018); DOI: 10.1039/d0na00514b.
20. Ch.-Yu. Shih, M. V. Shugaev, Ch. Wu, and L. V. Zhigilei, J. Phys. Chem. C **121**, 16549 (2017); DOI: 10.1016/j.jcis.2016.10.029.
21. D. S. Ivanov, Th. Izgin, A. N. Mayorov, V. P. Veiko, B. Rethfeld, Y. I. Dombrovska, M. E. Garcia, I. N. Zavestovskaya, S. M. Klimentov, and A. V. Kabashin, Molecules **25**, 67 (2020); DOI: 10.3390/molecules25010067.
22. D. S. Ivanov, S. M. Klimentov, A. N. Mayorov, V. Y. Timoshenko, I. N. Zavestovskaya, B. Rethfeld, M. E. Garcia, A. Popov, P. Shakhov, and A. V. Kabashin, Applied Surface Science **643**, 158662 (2024); DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.158662.
23. Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov, V. V. Zhakhovsky, and N. A. Inogamov, Applied Surface Science **492**, 285 (2019); https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.05.325.
24. D. S. Ivanov and B. C. Rethfeld, Applied Surface Science **255**, 9724 (2009); https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2009.04.131.
25. M. Iqbal, S. A. Khan, D. S. Ivanov, R. A. Ganeev, V. V. Kim, G. S. Boltaev, N. A. Abbasi, S. Shaju, M. E. Garcia, B. Rethfeld, and A. S. Alnaser, Applied Surface Science **527**, 146702 (2020); DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.146702.
26. D. S. Ivanov and L. V. Zhigilei, Phys. Rev. B **68**, 064114 (2003); DOI: 10.1103/PHYSREVB.68.064114.
27. V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, Y. V. Petrov, S. I. Ashitkov, and K. Nishihara, Applied Surface Science **255**(24), 9592 (2009); DOI: 10.1016/j.apsusc.2009.04.082.

28. Development of Interatomic EAM Potentials. Available online (accessed on 30 November 2017), https://www.researchgate.net/project/Development-of-interatomic-EAM-potentials;
DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.14.
29. E. T. Karim, M. Shugaev, Ch. Wu, Zh. Lin, R. F. Hainsey, and L. V. Zhigilei, J. Appl. Phys. **115**, 183501 (2014);
DOI: 10.1063/1.4872245.
30. D. S. Ivanov, V. P. Lipp, A. Blumenstein, V. P. Veiko, E. B. Yakovlev, V. V. Roddatis, M. E. Garcia, B. Rethfeld, J. Ihlemann, and P. Simon, Phys. Rev. Appl. **4**, 064006 (2015);
DOI: 10.17586/2226-1494-2015-15-6-984-999.
31. A. Blumenstein, E. S. Zijlstra, D. S. Ivanov, S. T. Weber, T. Zier, F. Kleinwort, B. Rethfeld, J. Ihlemann, P. Simon, and M. E. Garcia, Phys. Rev. B **101**, 165140 (2020); DOI: 10.1103/physrevb.101.165140.
32. L. V. Zhigilei, Z. Lin, and D. S. Ivanov, J. Phys. Chem. **113**(27), 11892 (2009);
DOI: 10.1021/jp902294m.
33. M. Venkatesh, R. A. Ganeev, D. S. Ivanov, G. S. Boltaev, V. V. Kim, J. Liang, A. A. Samokhvalov, A. V. Kabashin, S. M. Klimentov, M. E. Garcia, and Ch. Guo, Nanomaterials **10**, 234 (2020);
https://doi.org/10.3390/nano10020234.
34. S. I. Anisimov and B. Rethfeld, Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng. **3093**, 192 (1997).
35. Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, K. P. Migdal, V. A. Khokhlov, and K. V. Khishchenko, J. Phys. Conf. Ser. **653**, 012087 (2015);
DOI: 10.1088/1742-6596/653/1/012087.
36. J. Hohlfeld, S.-S. Wellershoff, J. Gudde, U. Conrad, V. Jähnke, and E. Matthias, Chem. Phys. **251**, 237 (2000);
DOI: 10.1016/s0301-0104(99)00330-4.