

## Отзыв

Официального оппонента доктора физико-математических наук, профессора Киселева Сергея Петровича на диссертационную работу Алексашкиной Анны Андреевны «Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов импульсной лазерной абляции золота» на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Представленная работа посвящена развитию математических моделей, в том числе неравновесных, методов молекулярной динамики, численных алгоритмов и атомистического моделирования на их основе ряда задач. К ним относятся проблемы исследования термодинамических и теплофизических свойств металлов в широком термобарическом диапазоне и определению неравновесных механизмов абляции золота при сверхбыстром лазерном воздействии.

Использование нанотехнологий во многих отраслях научных исследований и инновационных технологических приложениях вызывает теоретический и практический интерес исследователей. Благодаря возрастающим возможностям импульсной лазерной абляции в производстве наночастиц это направление становится все более привлекательным и для фундаментальных исследований.

**Актуальность диссертационной работы** заключается в необходимости дальнейшего развития математических моделей, совершенствования и повышения точности численных методов и алгоритмов, применяемых для решения классических задач молекулярной динамики и комбинированных континуально-атомистических моделей, в которых все процессы, индуцированные фемтосекундным излучением: электронные, тепловые, фазовые превращения и гидродинамические протекают в условиях сильной неравновесности, что намного усложняет как постановку задачи, так и методы её решения.

### **Научная новизна работы**

Научная новизна диссертационной работы состоит в полученных результатах атомистического моделирования теплофизических и термодинамических характеристик металлов (медь, золото) в широком термобарическом диапазоне температур и давлений, включающем околокритическую область.

С помощью атомистических моделей различного уровня сложности получен ряд научных результатов, к которым относятся: определение теплофизических и термодинамических характеристик металлов (медь, золото) в широком термобарическом диапазоне, включающим околокритическую область; определение критических параметров меди и

золота – температуры, плотности и давления, с последующей их верификацией; расширение возможностей пакета LAMMPS посредством введения модуля, реализующего комбинированную двухтемпературную модель с неявной разностной схемой и автоматическим выбором шага по времени для электронной температуры.

### **Практическая значимость.**

Практическое значение имеют результаты исследования основных механизмов абляции золота сверхкоротким лазерным воздействием. Установлено, что основным механизмом удаления вещества является фотомеханический откол ~ 93.3%. Оставшиеся 6.7% приходятся на механизмы закритического разлёта и фазового взрыва. Общее количество удаленного вещества показало хорошее совпадение с экспериментальными данными. Полученные результаты могут быть использованы для совместного расчетно-экспериментального анализа режимов лазерной абляции золота.

### **Степень обоснованности и достоверности**

В диссертации автором использованы современные подходы для физической и математической постановки задач, а также численные методы хорошей апробацией. Достоверность и обоснованность результатов подтверждаются верификацией расчетов с аналогичными расчётами, полученными с применением других алгоритмов, а также валидацией результатов расчетов с экспериментальными данными.

### **Содержание диссертационной работы**

Диссертация содержит 110 страниц, включая 40 рисунков, введение, четыре главы, заключение, список литературы, в котором 110 источников.

**Во введении** обосновывается актуальность темы, формулируются цели и задачи работы, обосновываются теоретическая и практическая значимость и научная новизна диссертации, а также указываются основные положения, выносимые на защиту. Обоснована достоверность результатов работы, представлен список опубликованных работ автора и данные апробации результатов диссертации на международных и российских конференциях и семинарах.

**В первой главе** приведен краткий обзор литературы, представлены и проанализированы результаты исследований в данном научном направлении, полученные другими авторами. Показаны основные методы получения наночастиц, обоснован выбор лазерной абляции как наиболее перспективного способа синтеза наночастиц и нанокластеров. Описаны основные подходы моделирования лазерной абляции: атомистические и континуальные, указаны их преимущества и недостатки. Перечислены известные методы определения равновесной температуры плавления,

теплоемкости и теплопроводности, а также параметров критической точки меди и золота с помощью атомистического моделирования.

**Вторая глава** посвящена математической постановке на основе классической атомистической модели, в которой взаимодействие атомов между собой, а также их перемещение в пространстве подчиняются классическим уравнениям Гамильтона. Объекту, состоящему из  $N$  атомов, соответствует система из  $2N$  обыкновенных дифференциальных уравнений дополненная потенциалом межчастичного взаимодействия. Для металлов, как правило, применяются "потенциалы погруженного атома". Численный алгоритм основывается на конечно-разностной схеме Верле. С помощью представленных численных алгоритмов были определены в широком термобарическом диапазоне барические зависимости равновесной температуры плавления, удельной теплоты плавления, а также температурные зависимости энтальпии, теплоемкости, коэффициента линейного расширения, плотности и теплопроводности меди и золота.

**В третьей главе** приведены результаты атомистического моделирования параметров критической точки для меди и золота. Получены критические величины температуры, плотности и давления. Выполнена верификация полученных результатов с данными других авторов.

**Четвертая глава** посвящена атомистическому моделированию абляции золота и исследованию её основных механизмов. Физическая постановка задачи лазерного воздействия на металл представляется в следующем виде. На поверхность металлической (Au) мишени, помещенной в вакуум, падает поток лазерного излучения гауссовской формы по временной координате  $t$ , длиной волны  $\lambda$ , максимальной интенсивностью  $G_0$ , достигающей на полуширине импульса  $\tau$ . Часть излучения отражается поверхностью ( $0 < R < 1$ ,  $R$  – коэффициент отражения). Оставшаяся доля излучения  $A = (1-R)$  поглощается электронной компонентой металла по пространственной координате  $x$  по закону Бугера-Ламберта. Полная математическая постановка представлена в виде односкоростной неравновесной комбинированной континуально-атомистической модели с двумя потенциалами межчастичного взаимодействия и граничными условиями. Приведен алгоритм численного решения полученной системы уравнений и блок-схема, демонстрирующая реализацию вычислительного алгоритма на одном молекулярно-динамическом шаге. Детально проанализированы механизмы абляции: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол. Выполнена валидация результатов моделирования глубины абляции с экспериментальными данными для двух потенциалов.

**В заключении** сформулированы основные выводы и результаты работы.

**Структура диссертации и объем работы.** Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка литературы из 110 источников. Диссертация изложена на 110 страницах и содержит 40 рисунков.

**Подтверждения опубликованных основных результатов диссертации в научной печати.**

По теме диссертации опубликовано 17 работ, из которых 11 в изданиях, рекомендованных ВАК или индексируемых в базах данных (Scopus, Web of Science)

**Автореферат полностью и точно отражает содержание диссертации.**

**Высоко оценивая диссертационную работу в целом, необходимо отметить следующие замечания:**

1. При определении теплопроводности меди и золота вычисляется градиент температуры по стационарным зависимостям температуры от продольной координаты. Из рис. 15, 18 видно, что зависимость температуры от продольной координаты является нелинейной. Какова причина возникновения нелинейности в распределении температуры? Какова ошибка в определении коэффициента теплопроводности?

2. Для расчета лазерной абляции диссертантом предложена континуально – атомистическая модель. При расчете энергии электронов используется континуальное уравнение типа диффузии (7), в которое добавлено новое конвективное слагаемое. Однако, из текста работы не ясно влияние этого слагаемого на абляцию мишени при интенсивном лазерном облучении. Для оценки необходимо было выполнить численные расчеты без учета и с учетом конвективного слагаемого.

3. Для расчета движения ионов используется открытый пакет LAMMPS, в котором реализован метод молекулярной динамики. Для учета обмена тепловой энергией между ионами и электронами, в уравнение движения ионов (9) добавлена дополнительная сила  $\vec{F}_j^{heat}$ . В диссертации приведена формула для этой силы и ее выражение при численной реализации в программе (15), однако отсутствует вывод этой формулы. Можно показать, что эти формулы получаются из балансового уравнения, описывающего изменение тепловой энергии ионов за счет электронов, при условии, что все ионы обладают одинаковой скоростью теплового движения. Поскольку реально тепловые скорости ионов имеют максвелловское распределение, то в результате усреднения по этому распределению, перед силой  $\vec{F}_j^{heat}$  должен появиться некоторый коэффициент. В работе этот коэффициент отсутствует, и никак не обсуждается вывод формулы (9).

4. Формула (15), которая используется при численном счете, отличается от формулы (9) и переходит в нее только при условии малого потока энергии от электронов к ионам по сравнению с тепловой энергией ионов. Из текста диссертации не ясно, удовлетворяются ли эти условия при численном счете.

5. При переходе от дискретного к континуальному описанию создаются слоистые ячейки толщиной 2 – 2.5 размера атомной ячейки. Какое число ионов попадает в ячейки? Поскольку размеры ячейки малы, то средние параметры могут испытывать большие флуктуации при переходе от одной ячейки к другой. Достаточно ли их число при использовании континуального приближения для скорости ионов?

6. При множественных отколах возникает большое число свободных поверхностей (см. рис. 35, 36), на которых нужно менять граничные условия в континуальных уравнениях. Из текста диссертации не ясно, как это делается в работе?

Высказанные замечания не уменьшают значимости представленных научных результатов и не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы Алексашкиной А.А.

### **Заключение**

Диссертационная работа Алексашкиной Анны Андреевны является законченной научно-исследовательской работой, выполненной на высоком научном уровне. Полученные автором результаты достоверны, выводы из заключения обоснованы. Основные результаты диссертации прошли апробацию на международных и всероссийских конференциях и в должной мере отражены в научных публикациях, включая издания из перечня ВАК. Автореферат в полной мере отражает содержание диссертации.

Основываясь на сказанном, считаю, что представленная диссертация по объему и глубине проработки, новизне и достоверности ее результатов соответствует квалификационным требованиям, предъявляемым ВАК России к кандидатским диссертациям, в том числе соответствует требованиям п.9

“Положения о присуждении ученых степеней”, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Алексашкина Анна Андреевна, безусловно, заслуживает присуждения ей искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 - “Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ”.

Официальный оппонент

Киселев Сергей Петрович

доктор физико-математических наук, профессор;

специальность 01.02.05 – Механика жидкости газа и плазмы; 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела; ведущий научный сотрудник.

