

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертационную работу Алексашкиной Анны Андреевны

«Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов импульсной лазерной абляции золота» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

1. Предсказательное моделирование известных материалов, а также перспективных новых материалов, в экстремальных условиях высоких температур и давлений недавно выдвинулось в первый ряд одних из самых востребованных средств для дальнейшего развития многих технологий, и в особенности нанотехнологий. При этом атомистические методы моделирования приобрели первостепенную важность с развитием новых межатомных потенциалов и ростом доступной вычислительной мощности в последнюю четверть века. В настоящее время стало возможным решать сложные задачи движения неравновесной сплошной среды с помощью метода классической молекулярной динамики на микрометровом масштабе в течение наносекунд без использования термодинамических и кинетических моделей. Однако реалистичность результатов такого моделирования зависит от качества используемых межатомных потенциалов, что обуславливает необходимость их всесторонней проверки в широком диапазоне темпов нагрева и деформаций моделируемого материала. Поэтому работа Алексашкиной А. А., посвященная разработке алгоритмов и компьютерных программ для тестирования нескольких известных потенциалов золота и меди с целью определения наиболее адекватных потенциалов, а также сравнительному моделированию лазерной абляции золота с этими потенциалами, **обладает необходимой актуальностью.**
2. Диссертационная работа Алексашкиной А. А. состоит из 110 страниц текста, 40 рисунков, 11 таблиц и состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованной литературы, содержащего 110 наименований.
 - А) во **введении** автором дается обоснование актуальности, научной новизны и практической значимости поставленных задач, формулируются цели исследования, дана информация о личном вкладе автора и апробации работы, собраны положения, выносимые на защиту.
 - Б) в **первой главе** сделан обзор работ по лазерной абляции металлов, изложены современные представления о теплофизических свойствах металлов и их критических параметрах. Обзор охватывает работы по лазерной абляции как длинными (наносекундными) импульсами, так и короткими (фемтосекундными) лазерными импульсами. Рассматриваются привлекаемые математические модели и методы моделирования, в частности двухтемпературная модель для электронной и решеточной температур в металлах (ТТМ), нагретых коротким импульсом. Указывается необходимость учёта скорости течения среды в уравнении энергии электронной подсистемы, записанного на эйлеровой пространственной сетке, что игнорируется в известных молекулярно-динамических работах, использующих ТТМ приближение.
 - В) во **второй главе** приведена математическая формулировка поставленных задач, выбраны потенциалы взаимодействия атомов, а также приведены полученные зависимости теплофизических свойств меди и золота (температуры плавления, теплоемкости, и др.) от температуры и давления.
 - Г) в **третьей главе** приведены результаты моделирования критических свойств меди и золота.

- Д) в **четвертой главе** описывается лазерная абляция золота ультракоротким лазерным импульсом. Представлен алгоритм численного решения комбинированной континуально-атомистической модели. Приведены результаты моделирования для двух исследуемых потенциалов золота, и полученные глубины абляции сравниваются с экспериментальными данными.
- Е) В **заключении** сформулированы основные научные результаты диссертационной работы Алексашкиной А. А., находящиеся в соответствии с научными положениями.

Название диссертации отражает суть работы. Содержание диссертации соответствует специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Автореферат корректно и полно отражает содержание диссертации.

3. Замечания:

- А) Заметное количество неточностей и стилистических ошибок обнаруживается в диссертации – однако большинство из них незначительные и не будут отмечены в этом отзыве.
- Б) В разделе «1.1. Лазерная абляция металлов» верно указывается, что «В широко известной ... ТТМ-МД модели ... В электронной подсистеме учёт движения среды отсутствует, поскольку описание всех процессов ограничивается одним уравнением нелинейной теплопроводности». Однако эта проблема возникает только при использовании эйлеровой пространственной сетки для безмассовой электронной подсистемы. В лагранжевой постановке перенос электронной подсистемы осуществляет ионная/атомарная среда из-за условия соблюдения полной электронной нейтральности.
- В) В разделе «1.3. Критические параметры металлов» написано, что «В работе [65] используется принцип соответственных состояний. В нем энергия межчастичного взаимодействия задается в виде (из Фортова)». Здесь вид энергии не представлен и/или ссылка на Фортова не определена. Ниже на этой же странице следует писать «линия Zeno» вместо “zeno-line”.
- Г) Рисунок без номера и подписи на стр. 27.
- Д) В разделе «2.4. Потенциалы взаимодействия частиц» утверждается, что «... парные потенциалы хорошо описывают простые жидкости, некоторые кристаллы ..., однако, они не учитывают электронную проводимость. Поэтому для описания свойств металлов и полупроводников необходимы другие виды потенциалов». На самом деле учет электронной проводимости невозможен никакой потенциальной функцией для атомов, так как классическая молекулярная динамика описывает только классическую механику движения тяжелых атомов при не слишком малой температуре, когда квантовая природа больше не может игнорироваться. Здесь следовало бы написать, что парные потенциалы не могут воспроизвести многочастичное взаимодействие атомов в металлах, которое соответствует металлическому типу связи.
- Е) В разделе «2.8. Барическая зависимость равновесной температуры плавления» написано, что «Фазовое состояние также контролировалось с помощью параметра порядка», однако определение параметра порядка или ссылка на него отсутствует в диссертации.
- Ж) Раздел «2.10. Теплопроводность.» следовало бы назвать «Фононная теплопроводность», так как рассчитывалась только решеточная (ионная) теплопроводность металлов, которая на порядки меньше электронной теплопроводности, определяющей экспериментальную теплопроводность металлов при нормальных условиях. Только в самом конце раздела

указано, что была получена «зависимость фононной теплопроводности с ростом температуры».

- З) В разделе «3.1. Определение критических параметров меди» расчёты проведены с довольно малым числом атомов и расчетная область вероятно слишком узка, всего 5.4 нм. Поэтому такие узкие периодические условия должны препятствовать достаточно точному определению критических параметров. К сожалению, в диссертации не обсуждаются указанные трудности, которые вероятно проявляются на Рис. 22, где жидкая и паровая ветки бинадали должны сомкнуться в критической точке при $T < 6500\text{K}$, что явно меньше $T_{cr} = 6550\text{K}$, определенной по кривой размера кластеров на Рис. 23. Кроме этого, кривая давления насыщенного пара не может уходить за T_{cr} , как показано на Рис. 24.
- И) Таблица 11 представляет критические параметры золота, а не меди как написано в заглавии.
- К) Рисунок 32 (и другие до 37) разорван и представлен на двух страницах, графики d) и e) не обозначены.

Сделанные замечания не влияют на основные результаты работы и не снижают ее научной значимости.

- 4. **Научная новизна** диссертационной работы Алексахкиной А. А. обусловлена следующими впервые разработанными методами и полученными результатами:
 - А) вычислены теплофизические свойства меди и золота в широком температурном диапазоне, включающем область фазового перехода в жидкое состояние;
 - Б) определены критические параметры меди и золота для исследуемых потенциалов;
 - В) исследованы потенциалы погруженного атома, использующиеся в моделировании механизмов ультракороткой лазерной абляции золота;
 - Г) модифицирована односкоростная неравновесная двухтемпературная комбинированная континуально-атомистическая модель;
 - Д) добавлен новый программный модуль в пакет LAMMPS, который реализует неявную разностную схему с автоматическим выбором шага по времени для электронной температуры в двухтемпературной комбинированной модели;
 - Е) получены и проанализированы основные механизмы ультракороткой лазерной абляции золота, в частности проведено сравнение результатов глубины абляции при моделировании с использованием двух потенциалов золота.
- 5. **Теоретическая значимость** работы заключается в определении температурных и барических зависимостей теплофизических свойств меди и золота в широком диапазоне температур и давлений, вплоть до критической точки, которые могут найти применение в теоретических исследованиях в различных областях, таких как материаловедение и нанотехнологии.
- 6. **Практическая значимость** работы определяется возможностью использования представленных в диссертационной работе основных механизмов откола: закритического разлета, фазового взрыва и механического откола, обнаруженных при моделировании ультракороткой лазерной абляции золота, для оптимизации параметров наночастиц и кластеров, формирующихся при лазерной абляции.
- 7. **Достоверность и обоснованность результатов и выводов** следует из корректности постановки задачи, использования общеизвестных двухтемпературной модели и метода классической молекулярной динамики, которые опубликованы и подтверждены ранее другими авторами, а также применения апробированных потенциалов взаимодействия атомов меди и золота. Достоверность результатов подтверждается согласованием с экспериментальными

данными и данными работ других авторов. Достоверность и обоснованность результатов и выводов сомнения не вызывает.

8. **Апробация** работы проведена с помощью докладов, представленных на 5 российских и 6 международных конференциях, начиная с 2018 года. **Список публикаций** Алексашкиной А. А. по теме диссертации содержит 11 работ в рецензируемых научных журналах, входящих в «Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук» ВАК.
9. **Личный вклад:** автором были проведены все представленные молекулярно-динамические расчеты. Все приведенные в диссертации результаты получены самим автором, либо в рамках сотрудничества. Все исследования и основные результаты, выносимые на защиту, показывают персональный вклад автора в опубликованные работы.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертация Алексашкиной Анны Андреевны представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует паспорту научной специальности 1.2.2. «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» и требованиям п.9 Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 №842 «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор Алексашкина Анна Андреевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Отзыв составил ведущий научный сотрудник отдела компьютерного моделирования Центра фундаментальных и прикладных исследований ФГУП «ВНИИА им. Н.Л. Духова», к.ф.-м.н., Жаховский Василий Викторович (127030, Москва, Сушевская улица, д. 22, тел. (499) 972-8499, e-mail: basilz@ya.ru).

В.В. (Жаховский В.В.) 19.08.2024

Подпись Жаховского В. В. заверяю
Ученый секретарь НТС ФГУП «ВНИИА» _____ Феоктистова Л. В.



Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова», Москва, ул. Сушевская, д. 22.

Тел.: +7(499)978-7803

<http://www.vniia.ru>

e-mail: vniia@vniia.ru