

УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального  
государственного бюджетного  
учреждения науки Федерального  
исследовательского центра  
«Институт общей физики им.  
А.М. Прохорова Российской  
академии наук» (ИОФ РАН),  
член-корреспондент РАН, д.ф.-м.н.  
С.В. Гарнов



«13» августа 2024 г.

### ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу Алексашкиной Анны Андреевны «Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов импульсной лазерной абляции золота», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 - Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертационная работа Алексашкиной Анны Андреевны посвящена разработке и применению новых возможностей вычислительной математики, включая математические модели, вычислительные алгоритмы и их программную реализацию, необходимых для полноценного математического моделирования свойств и фемтосекундной абляции металлов, в рамках атомистического подхода.

#### **Актуальность избранной темы.**

Лазерная абляция металлов импульсами ультракороткой (фемто-пикосекундной) длительности является одним из наиболее перспективных методов синтеза наночастиц. Особенность фемтосекундного воздействия на металлы проявляется в длительности лазерных импульсов, которая оказывается короче времен релаксации всех основных процессов. В результате поглощенная энергия лазерного импульса выделяется в электронной компоненте, оставляя решетку холодной на время, необходимое для передачи энергии от нагретых электронов к решетке. По этой причине все процессы, индуцированные фемтосекундным излучением: электронные, тепловые, гидродинамические и, в том числе, фазовые превращения протекают в условиях сильной неравновесности, которые должны адекватно учитываться в математических моделях.

Динамический процесс фрагментации жидкой фазы металла приводит к образованию облака мелких капель расплава, выброшенных с высокой скоростью в окружающее пространство со стороны облучаемой поверхности. Использование

фемтосекундных лазерных импульсов в качестве источника нагрева открыло новые возможности для практического применения процессов наноструктурирования, в том числе, генерации наночастиц и наноструктур для нужд медицины и биологии. Быстрое внедрение прикладных приложений в свою очередь стимулирует дополнительный интерес к экспериментально-теоретическим исследованиям фундаментальных свойств, лежащих в основе сверхкороткой лазерной абляции.

Исследования термодинамических и теплофизических свойств металлов (медь, золото) в широком термобарическом диапазоне (от нормальных условий –  $T_0 = 300\text{K}$ ,  $P_0 = 1$  бар, до условий закритического разлета –  $T > T_{cr}$ ,  $P > P_{cr}$ ), а также механизмов фемтосекундной абляции, требуют применения передовых методов моделирования и новых подходов в разработке вычислительных алгоритмов. Математическое описание и детальное исследование свойств металлов и механизмов абляции осуществляется на основе атомистического подхода, позволяющего по новому взглянуть на термодинамические и кинетические свойства микроструктуры металлов и, в том числе, явлений фрагментации золота, которые развиваются после частичного или полного плавления образца.

Атомистическое моделирование динамической фрагментации золота, наночастицы которого обладают уникальными свойствами, оценка их геометрических и кинематических параметров являются актуальной проблемой, как для фундаментальной, так и прикладной науки. Результаты такого моделирования свойств металлов и лазерной фрагментации золота востребованы и актуальны в таких проблемах как разработка новых материалов и материалов с заданными свойствами.

Научная проблема, на решение которой направлена диссертационная работа, состоит в разработке и применении с использованием современных возможностей вычислительной математики полноценного математического моделирования свойств и фемтосекундной абляции металлов в рамках атомистического подхода.

#### **Новизна исследования и полученных результатов.**

Научная новизна исследования и полученных результатов определяется комплексом решений (математических, алгоритмических и программных):

- предложенным алгоритмом, с помощью которого вычислены теплофизические свойства металлов (меди и золота) в широком температурном диапазоне, включающем область фазового перехода (плавление-кристаллизация), и околокритическую область, в которой определены параметры критической точки меди и золота;

- модификацией односкоростной неравновесной двухтемпературной комбинированной континуально-атомистической модели для исследования механизмов ультракороткой лазерной фрагментации золота, в результате применения которой получены и проанализированы основные механизмы откола вещества: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол;

- модификацией/расширением пакета молекулярной динамики Lammmps (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) посредством специально разработанного дополнительного модуля, реализующего комбинированную двухтемпературную модель с

невной разностной схемой с автоматическим выбором шага по времени для электронной температуры.

### **Теоретическая и практическая значимость полученных результатов.**

Теоретическая значимость работы заключается в разработке вычислительных алгоритмов, построенных на основе методов молекулярной динамики, применяемых для исследования теплофизических и термодинамических свойств меди и золота в широком термобарическом диапазоне температур и давлений.

Практическая значимость (полученных) результатов атомистического моделирования может быть связана с процессами наноструктурирования и генерации наночастиц (и наноструктур) при фемтосекундном лазерном воздействии на образцы золота, наночастицы которого обладают уникальными свойствами. Результаты моделирования электронных и фононных свойств меди и золота могут быть востребованы при разработке новых материалов с заданными свойствами, для широкой области применений от материаловедения до биомедицины.

Результаты данной работы могут быть востребованы и полезны в следующих учреждениях науки и техники: Институте общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Физическом институте им. П.Н. Лебедева РАН, НИЯУ МИФИ, Объединенном институте высоких температур РАН, ВМК МГУ им. М.В.Ломоносова, Сколковском институте науки и технологий.

### **Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и заключений.**

Обоснованность и достоверность применяемых в работе математических методов основываются на результатах верификации применяемых вычислительных алгоритмов и полученных с помощью них данных (критических параметров золота и меди) с известными результатами других авторов. Достоверность результатов математического моделирования фемтосекундной лазерной фрагментации золота основывается на результатах валидации, полученной сравнением известных экспериментальных данных о выносе вещества с данными моделирования.

### **Соответствие паспорту специальности ВАК**

Диссертационная работа Алексашкиной А.А. полностью соответствует паспорту специальности ВАК 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, а именно пункту 1. Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений (физико-математические науки) и частично пунктам 2. Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий и 8. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

### **Апробация**

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на одиннадцати международных и российских конференциях, а также на научных семинарах. По теме диссертации опубликовано 17 работ, из которых 7 в изданиях из Перечня журналов, рекомендованных ВАК, и 11 в журналах, индексируемых в международных базах данных Scopus, Web of Science и MathSciNet.

### **Личный вклад автора.**

Почти все работы, кроме одной, написаны в соавторстве с научным руководителем и др., и в четырех из них Алексашкина А.А. является первым автором. Лично автором были проведены все молекулярно-динамические расчеты, а также расчеты с применением комбинированной континуально-атомистической модели и выполнена интерпретация полученных данных.

### **Содержание диссертации.**

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 110 страниц, включая 40 рисунков. Библиографический список содержит 110 наименований.

Во **введении** обосновывается актуальность проводимых исследований, формулируются цель, задачи, научная новизна, теоретическая и практическая значимость представляемой работы, приведены положения, выносимые на защиту.

**Первая глава** посвящена обзору работ по теме диссертации и состоит из трех частей. Обоснован выбор лазерной абляции как наиболее перспективного способа синтеза наночастиц. Описаны способы моделирования лазерной абляции и способы вычисления теплофизических свойств меди и золота. В третьей части главы перечислены известные методы, которые использовались для расчета критических параметров металлов.

Обзор последних достижений в области математического моделирования лазерной абляции включает 70 литературных источников, достаточно полно освещающих достижения моделирования в области фундаментальных исследований процессов и свойств микроструктуры, термодинамических, теплофизических и кинетических свойств металлов, а также синтеза современных материалов. Отдельное внимание уделено фемтосекундному лазерному воздействию на металлы и анализу основных механизмов их абляции. Перечислены известные методы определения равновесной температуры плавления, теплоемкости и теплопроводности, а также параметров критической точки меди и золота с помощью моделирования. Из обзора видно, что благодаря прогрессу современной вычислительной техники и разработке новых алгоритмов и методов вычисления возможности атомистического моделирования сильно возросли.

Во **второй главе** описывается метод молекулярно-динамического моделирования. Представлена математическая формулировка атомистической модели, состоящая из системы обыкновенных дифференциальных уравнений, начальных и дополнительных условий для решения этой системы уравнений. Выбирается потенциал взаимодействия частиц – для металлов потенциал погруженного атома EAM. В дальнейшем система уравнений решается с помощью разностной схемы Верле. Для молекулярно-динамического моделирования используется пакет Lammmps (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator).

Представлены численные алгоритмы определения барических зависимостей равновесной температуры плавления, удельной теплоты плавления, температурных зависимостей энтальпии, теплоемкости, коэффициента линейного расширения, плотности и теплопроводности для двух металлов — меди и золота.

В **третьей главе** с помощью молекулярно-динамического моделирования выполнен расчет критических параметров металлов, а именно, критическая температура, критическая плотность и критическое давление. В третьей главе проведено сравнение/верификация результатов проведенного моделирования с результатами работ других авторов. К сожалению, так как экспериментальных данных по определению критических параметров меди нет, то для меди сравнение проводилось только с теоретическими результатами других авторов.

**Четвертая глава** посвящена исследованию механизмов фемтосекундной лазерной абляции золота и процессов, возникающих при воздействии лазерного излучения на металл с помощью атомистического моделирования. Для учёта конвективного механизма переноса энергии в электронной подсистеме модифицируется односкоростная неравновесная комбинированная континуально-атомистическая модель. Математическая модель состоит из двух подсистем, первая из которых (континуальная), используется для описания процессов в потоке коллективизированных электронов с учётом переноса вещества и переноса лазерного излучения (закон Бугера-Ламберта). Вторая же, атомистическая подсистема, отображает поведение тяжелых частиц (ионов) в кристаллическом, жидком и парогазовом состоянии.

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 фотомеханический откол. Выполнено сравнение с экспериментальными данными результатов моделирования глубины абляции для двух ЕАМ потенциалов, предложенных в 2009 и 2018 годах группой Н.А. Иногамова. Это позволило определить потенциал взаимодействия, лучше согласующийся с экспериментальными данными по глубине абляции для золота в рассматриваемом режиме воздействия лазерного излучения.

В **заключении** приводятся основные результаты диссертационной работы и выводы.

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

По содержанию работы могут быть сделаны следующие замечания:

1. Основные положения совпадают дословно с основными результатами.
2. В главе 2, стр. 30 – 60, представлены результаты обширного атомистического моделирования термобарических зависимостей меди и золота в широком диапазоне давлений  $P$  и температур  $T$ : равновесной температуры плавления  $T_m(P)$  и удельной теплоты плавления  $L_m(P)$ , энтальпии  $\Delta H(T)$ , теплоемкости  $C_p(T)$ , коэффициента линейного расширения  $\alpha(T)$ , плотности  $\rho(T)$  и теплопроводности  $\lambda(T)$ . Все полученные зависимости прошли валидацию (сравнение с экспериментальными данными). Однако для валидации автор использовала сравнительно устаревшие данные [монографии 80 (1991г), 81(1989 г)]. В качестве примера современного постоянно обновляемого источника справочных данных нужно было использовать сайт [www.nist.gov](http://www.nist.gov) Национального института стандартов и технологий (NIST– National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce, USA).

3. В главе 3, стр. 30 – 71, представлены результаты атомистического моделирования критических параметров, к которым относятся – критическая температура  $T_{cr}$ , критическое давление  $P_{cr}$ , и критическая плотность  $\rho_{cr}$  – для двух металлов меди и золота. Полученные результаты были подвергнуты процедуре верификации, т.е. сравнению с теоретико-расчетными результатами других авторов. Автор работы сравнение выполнила с высокой тщательностью. Для каждого из металлов сравнение производилось не менее чем с 10 источниками. К сожалению, среди этих работ фактически полностью отсутствуют экспериментальные. Никаких пояснений такому выбору в работе не содержится.

4. В главе 4 автором разработана односкоростная неравновесная модель сверхбыстрого лазерного воздействия на металлическую мишень, состоящая из двух подсистем: континуальной (уравнение (7)), характеризующей перенос свободных электронов и атомистической (система уравнений (9)), отображающая поведение тяжёлых частиц (ионов). Общая гидродинамическая скорость  $u$  определяется осреднением скоростей ионов в каждой расчетной ячейке, из-за чего значение скорости  $u$  оказывается сильно флуктуирующей величиной, что затрудняет численное решение электронного уравнения (7). Применение метода расщепления по физическим процессам позволило упростить процесс электронного переноса количества движения представлением его в виде двух более простых механизмов переноса: диффузионного и конвективного. Соответственно уравнение (7) заменяется двумя более простыми уравнениями (13) и (14). Численное решение уравнения конвективного переноса (14) осуществлялось автором методом, аналогичным методу «частиц в ячейке», когда электронная энергия закрепляется за молекулярно-динамическими атомами и переносится ими через границы расчетных ячеек. Такой подход может приводить к появлению паразитной диффузии электронной

энергии, т.е. в правой части уравнения (14) паразитный член  $\chi \frac{\partial^2 E_e}{\partial x^2}$ , где  $\chi$  – некоторый коэффициент “паразитной” диффузии.

Было бы уместно привести в работе краткий анализ с определением погрешности вычислений для используемых параметров лазерного воздействия.

Высказанные вопросы и замечания не уменьшают значимости представленных научных результатов, не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы Алесашкиной А.А. и не затрагивают её основных положений и выводов.

### **Заключение**

Диссертационная работа Алесашкиной А.А. является законченным научно-квалификационным исследованием, основные результаты которого в достаточной мере отражены в публикациях и изданиях из перечня ВАК и прошли апробацию на международных и всероссийских конференциях и семинарах. Работа ясно изложена и хорошо оформлена. Автореферат диссертации полностью отражает её содержание и основные результаты.

Диссертационная работа Алексашкиной А. А. полностью соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённых постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842, предъявляемым ВАК России к кандидатским диссертациям, а её автор, Алексашкина Анна Андреевна, заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Отзыв составлен доктором физико-математических наук, профессором, главным научным сотрудником теоретического отдела Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Институт общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук Игнатовым Александром Михайловичем.

Отзыв обсужден и одобрен на заседании Ученого совета теоретического отдела ИОФ (Заседание № 7 от 10 июля 2024 года).

Гл.н.с, д.ф.-м. н., профессор



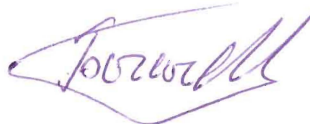
А.М. Игнатов

Зам. председателя Ученого совета теоретического отдела,  
д.ф.-м. н., профессор



А.М. Игнатов

Ученый секретарь Ученого совета теоретического отдела, к.ф.-м. н.,



Н.Н. Богачев