

Сведения о диссертации*

Алексашкина Анна Андреевна

Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов
и механизмов импульсной лазерной абляции золота.

Диссертация

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

по специальности 1.2.2. – «Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ»

Дата принятия к защите: 04.07.2024

Дата защиты: 12.09.2024

* Состав сведений, размещаемых на официальном сайте организации, определяется приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 326 от 16 апреля 2014 г. «Об утверждении Порядка размещения в информационно-телекоммуникационной сети Интернет информации, необходимой для обеспечения порядка присуждения ученых степеней» (с изменениями и дополнениями от 27 ноября 2017 г.).

1. Сведения о диссертационном совете:

Диссертационный совет 24.1.237.01 создан на базе Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» (ИПМ имени М.В. Келдыша РАН), приказ Минобрнауки России №105/нк от 11 апреля 2012 года.

Адрес: 125047, Москва, Миусская площадь, д.4.

2. Сведения о председателе диссертационного совета:

Фамилия, имя, отчество: Четверушкин Борис Николаевич

Ученая степень, звание: доктор физико-математических наук, профессор, академик РАН

Место работы: ИПМ имени М.В. Келдыша РАН

Должность: научный руководитель института

3. Сведения о соискателе:

Фамилия, имя, отчество: Алексашкина Анна Андреевна

Ученая степень: нет

Место работы: ИПМ имени М.В. Келдыша РАН

Должность: младший научный сотрудник

4. Сведения о диссертации:

Тема диссертации: Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов импульсной лазерной абляции золота.

Тип диссертации: кандидатская

Отрасль науки: физико-математические науки

Шифр(ы) специальности: 1.2.2. – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Место выполнения диссертации: ИПМ имени М.В. Келдыша РАН

Представлено к защите: рукопись

Диссертация принята к защите 04.07.2024, протокол №4/пз.

Дата защиты: 12.09.2024

Адрес объявления на сайте института: <https://keldysh.ru/council/3/D00202403/defence3.htm>.

Члены комиссии по приему диссертации к защите (ФИО, место работы, должность):

Кулешов Андрей Александрович, д.ф.-м.н., ИПМ имени М.В. Келдыша РАН, г.н.с.;

Орлов Юрий Николаевич, д.ф.-м.н., ИПМ имени М.В. Келдыша РАН, г.н.с.;

Козлов Андрей Николаевич, д.ф.-м.н., ИПМ имени М.В. Келдыша РАН, г.н.с.

5. Сведения о научных руководителях (научных консультантах) соискателя:

Фамилия, имя, отчество: Мажукин Владимир Иванович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Место работы: ИПМ имени М.В. Келдыша РАН

Должность: главный научный сотрудник

6. Сведения о лице, утвердившем заключение организации, где подготавливалась диссертация:

Фамилия, имя, отчество: Аптекарев Александр Иванович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Место работы: ИПМ имени М.В. Келдыша РАН

Должность: директор

7. Сведения о ведущей организации:

Полное наименование: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук»

Адрес местонахождения: 119991 ГСП-1, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38.

Почтовый адрес: 119991 ГСП-1, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38.

Веб-сайт: <https://www.gpi.ru/>

E-mail: office@gpi.ru

Тел.: +7 (499) 503-8734.

Отзыв на диссертацию составили:

Игнатов Александр Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, зам. председателя Ученого совета теоретического отдела ИОФ РАН.

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

Список основных публикаций работников ведущей организации по теме рецензируемой диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. Kononenko V.V., Zavedeev E.V., Arutyunyan N.R., Ashikkalieva K.K., Kononenko T.V., Konov V.I. Laser trapping of cavitation bubbles in liquids. *Optics & Laser Technology*, 2024, 171, 110422. <https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2023.110422>
2. Pimenov S.M., Zavedeev E.V., Jaeggi B., Neuenschwander B. "Femtosecond Laser-Induced Periodic Surface Structures in Titanium-Doped Diamond-like Nanocomposite Films: Effects of the Beam Polarization Rotation", *Materials*, vol. 16, no. 2, p. 795 (2023) doi:10.3390/ma16020795
3. Kononenko V., Ashikkalieva K., Arutyunyan N., Romshin A., Kononenko T., Konov V. "Femtosecond laser-produced plasma driven nanoparticle formation in gold aqueous

- solution", Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, vol. 426, p. 113709 (2022) doi:10.1016/j.jphotochem.2021.113709
4. Pimenov, S.M.; Zavedeev, E.V.; Jaeggi, B.; Zuercher, J.; Neuenschwander, B. Sub-Threshold Fabrication of Laser-Induced Periodic Surface Structures on Diamond-like Nanocomposite Films with IR Femtosecond Pulses. *Materials* 2022, 15, 4506. <https://doi.org/10.3390/ma15134506>
 5. Kononenko, V.V.; Zavedeev, E.V.; Kononenko, T.V.; Bukin, V.V.; Konov, V.I. Cleavage-Driven Laser Writing in Monocrystalline Diamond. *Photonics*, 2023, 10, 43. <https://doi.org/10.3390/photonics10010043>
 6. Kononenko, V., Dezhkina, M., Kononenko, T. et al. Study of Intense Femtosecond Radiation Scattering during Optical Breakdown of Water. *Bull. Lebedev Phys. Inst.* 50 (Suppl 10), S1092–S1099 (2023). <https://doi.org/10.3103/S1068335623220062>
 7. Simakina, A.V., Baimler, I.V., Smirnova, V.V., Uvarov O.V., Kozlov V.A. & Gudkov S.V. Evolution of the Size Distribution of Gold Nanoparticles under Laser Irradiation. *Phys. Wave Phenom.* 29(2), 102–107 (2021). <https://doi.org/10.3103/S1541308X21020126>
 8. Samokhin, A.A., Pivovarov, P.A. Effect of the Metal–Nonmetal Transition on the Pressure Pulse in Laser Ablation of Mercury. *Phys. Wave Phen.* 30, 364–369 (2022). <https://doi.org/10.3103/S1541308X22060061>
 9. Zhilnikova M., Barmina E., Shafeev G., Vasiliev A., Pavlov I. Laser fragmentation of Ag₂O micropowder in water. *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* 2022. T. 160. C. 110356. <https://doi.org/10.1016/j.jpics.2021.110356>
 10. Kudryashov S.I., Pivovarov P.A., Priklonskii V.I., Samokhin A.A., Umanskaya S.Ph., Tcherniega N.V., Pressure Pulses in Metal under Picosecond Laser Ablation. *Bulletin of the Lebedev Physics Institute.* 2024, V. 51, p. 52–56. DOI:10.3103/S1068335623602455.
 11. Pridvorova S.M., Zhilnikova M.I., Barmina E.V., Shafeev G.A. Laser Ablation of Ag in Aqueous Solution of H₂O₂ and Formation of Ag₂O Nanoparticles. *Physics of Wave Phenomena*, 2021, Vol. 29, No. 1, pp. 47–49. DOI: 10.3103/S1541308X21010052
 12. Samokhin A.A., Pivovarov P.A., Galkin A.L. Modeling of transducer calibration for pressure measurement in nanosecond laser ablation, *Mathematica Montisnigri* 2020, v.48, 58-69. DOI:10.20948/mathmontis-2020-48-6

Сведения о лице, утвердившем отзыв ведущей организации на диссертацию:

Фамилия, имя, отчество: Гарнов Сергей Владимирович

Ученая степень: доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, профессор

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук»

Должность: директор

8. Сведения об официальных оппонентах:

1. Официальный оппонент: Киселев Сергей Петрович

Ученая степень, шифр специальности: профессор, доктор физико-математических наук (специальность 01.02.05 – Механика жидкости газа и плазмы; 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела).

Место работы, подразделение: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук (ИТПМ СО РАН).

Должность: ведущий научный сотрудник

Список основных публикаций по теме рецензируемой диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. Vorozhtsov E. V., Kiselev S.P. An efficient method of finding new symplectic schemes for Hamiltonian mechanics problems with the aid of parametric Grobner bases // Journal of Computational Physics. – 2024. – Vol. 496. – 112601. – 38 p. – <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.112601>.
2. Белай О.В., Киселев С.П., Киселев В.П. Численное моделирование методом молекулярной динамики соударения наночастицы с преградой в условиях холодного газодинамического напыления // ПМТФ. 2023. Т. 64, № 6. DOI: 10.15372/PMTF202315303.
3. Vorozhtsov E. V. Kiselev S.P. Higher-order symplectic integration techniques for molecular dynamics problems // Journal of Computational Physics. – 2022. – Vol. 452. – 110905. – 35 p. – URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999121008007?via%3Dihub>. – DOI: 10.1016/j.jcp.2021.110905.
4. Киселев С. П. Численное моделирование разрушения нанокристаллов титана и алюминия методом молекулярной динамики / С. П. Киселев, В. П. Киселев // Физика горения и взрыва. – 2021. – Т. 57, № 4. – С. 115–129.
5. Киселев С. П. Численное моделирование методом молекулярной динамики разрушения нанокристаллов интерметаллида TiAl3 / С. П. Киселев // Прикладная механика и техническая физика. – 2021. – Т. 62, № 3. – С. 71–79.
6. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. (2020) Comparative study of the accuracy of higher-order difference schemes for molecular dynamics problems using the computer algebra means. In: Boulier F., England M., Sadykov T.M., Vorozhtsov E.V. (eds) Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2020. Lecture Notes in Computer Science, vol 12291. Springer, Cham, 2020, p. 600-620. https://doi.org/10.1007/978-3-030-60026-6_35.

2. Официальный оппонент: Жаховский Василий Викторович

Ученая степень, шифр специальности: кандидат физико-математических наук (специальность 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника)

Место работы, подразделение: Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова»

Должность: ведущий научный сотрудник

Список основных публикаций по теме рецензируемой диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. Zhakhovsky V. et al. Shock-induced melting and crystallization in titanium irradiated by ultrashort laser pulse // Physics of Fluids. – 2023. – Т. 35. – № 9. – С. 096104.

2. Makarov S. et al. Direct imaging of shock wave splitting in diamond at Mbar pressure // *Matter and Radiation at Extremes*. — 2023. — T. 8. — № 6. — C. 066601.
3. Shepelev V. V. et al. Attenuation and inflection of initially planar shock wave generated by femtosecond laser pulse // *Optics & Laser Technology*. — 2022. — T. 152. — C. 108100.
4. Grigoryev S. Yu. et al. Jet effusion from a metal droplet irradiated by a polarized ultrashort laser pulse // *Phys. Rev. Applied*. — 2022. — T. 18. — C. 024072.
5. Khokhlov V. A. et al. Melting of titanium by a shock wave generated by an intense femtosecond laser pulse // *JETP Letters*. — 2022. — T. 115. — № 2. — C. 523-530.
6. Inogamov N. A. et al. Laser shock wave: the plasticity and thickness of the residual deformation layer and the transition from the elastoplastic to elastic propagation mode // *JETP Letters*. — 2022. — T. 115. — №2. — C. 71-78.
7. Murzov S. A. et al. Elastoplastic and polymorphic transformations in iron films loaded by ultrashort laser shock waves // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2022. — T. 134. — № 3. — C. 263-276.
8. Romashevskiy S. A. et al. Femtosecond laser irradiation of a multilayer metal- metal nanostructure // *JETP Letters*. — 2021 — T. 113. — № 5. — C. 308-316.
9. Milov I. et al. Two-level ablation and damage morphology of Ru films under femtosecond extreme UV irradiation // *Applied Surface Science*, — 2020. — T. 528. — C.146952.
10. Zhukhovitskii D. and Zhakhovsky V. Thermodynamics and the structure of clusters in the dense Au vapor from molecular dynamics simulation // *The Journal of Chemical Physics*. — 2020. — T. 152. — C. 224705.
11. Milov I. et al. Similarity in ruthenium damage induced by photons with different energies: From visible light to hard X-rays // *Applied Surface Science*, — 2020. — T. 501. — C.143973.
12. Inogamov N. A. et al. Laser Ablation: Physical Concept and Application (Review) // *High Temperature*. — 2020. — T. 58. — №4. — C. 632-646.