

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Алексашкиной Анны Андреевны**
«Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов
импульсной лазерной абляции золота»,
представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 1.2.2. – «Математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ»

В настоящее время все большее внимание уделяется исследованиям свойств наноматериалов, применяемых в различных областях науки и техники. Одним из самых перспективных способов синтеза наночастиц в металлах частиц является ультракороткая лазерная абляция. Стоит отметить, что получение экспериментальных данных для изучения механизмов абляции представляет собой довольно сложный, трудно оптимизируемый процесс, протекающий в условиях сильной термодинамической неравновесности. Разработка численных методов моделирования подобных процессов приобретает особое значение. Данными факторами обусловлена актуальность диссертационной работы Алексашкиной Анны Андреевны.

Структурно работа состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и списка использованной литературы.

В 1-ой главе приведен литературный обзор. Во 2-ой главе вычислены основные теплофизические и термодинамические свойства золота и меди в широком диапазоне температур и давлений, которые могут применяться для дальнейших исследований, как в контексте проблематики лазерной абляции, так и в других областях. Вычисленные в 3-ей главе критические параметры хорошо согласуются с данными работ других авторов.

В 4-ой главе проводится исследование механизмов лазерной абляции. Для математического моделирования этого процесса автором была модифицирована и применена неравновесная комбинированная

континуально-атомистическая модель, в которой континуальная составляющая описывает характеристики электронного ферми-газа, а атомистическая составляющая – характеристики тяжёлых частиц атомов и ионов. Данный подход позволил выделить и описать в процессе моделирования основные механизмы откола, которые проявляются при фемто-секундном лазерном воздействии на золото: закритический разлет, фазовый взрыв, механический откол.

В пакет LAMMPS автором был добавлен программный комплекс, позволяющий делать расчеты с двухтемпературной моделью, отдельно рассчитывая электронную и ионную составляющие. Результаты численного моделирования, полученные в рамках указанной математической модели, хорошо соотносятся с имеющимися экспериментальными данными.

Основные результаты работы представлены в 17 научных статьях, а также прошли апробацию на международных и всероссийских конференциях. Выводы, представленные в работе, согласуются с экспериментальными данными и результатами моделирования в работах других авторов и формируют полную и ясную картину проведенного исследования.

В целом, работа «Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов импульсной лазерной абляции золота» выполнена на высоком уровне и представляет собой завершённое исследование.

В качестве замечаний по автореферату можно отметить:

1. Не указаны параметры вычислительных ресурсов, используемых для моделирования.
2. Нет номера у формулы на стр. 16.
3. Надписи на графиках сделаны на английском языке при наличии устоявшихся русскоязычных терминов.

При этом, приведенные замечания не снижают научной ценности работы и не влияют на общую положительную оценку работы.

Считаю, что диссертационная работа Алексашкиной Анны Андреевны соответствует требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемых к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2. – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Ведущий специалист
Механико-математического факультета
Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
«Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова»

Кандидат физ.-мат. наук
Дьяков Павел Александрович



<17> ноября 2025 г.

Адрес: 119991 Москва, ГСП-1, Ленинские горы, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, д.1, Главное здание, механико-математический факультет.

Рабочий телефон: +7(915)0053298

Email : dyakov_pavel@bk.ru.

Я, Дьяков Павел Александрович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Алексашкиной Анны Андреевны и их дальнейшую обработку.

Подпись Дьякова П.А. заверяю

Чел. отделе Дьяков:

