

Отзыв научного руководителя
о диссертационной работе Алексашкиной Анны Андреевны
«Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и
механизмов импульсной лазерной абляции золота», представленной на
соискание учёной степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.2.2 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Алексашкина Анна Андреевна в 2015 году закончила механико-математический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, отделение математики, кафедру теории чисел. В 2017. году поступила в аспирантуру ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, которую успешно закончила в июне 2021 г., защитив выпускную квалификационную работу на отлично.

В аспирантуре А. А. Алексашкина занималась исследованием термодинамических и теплофизических свойств меди и золота с применением метода молекулярной динамики, в широком диапазоне температур и давлений. Большое внимание также уделялось методам моделирования механизмов ультракороткой лазерной абляции золота. Математическая формулировка сверхбыстрого лазерного воздействия на металлическую мишень (Au), с её последующей фрагментацией, осуществлялась на основе односкоростной неравновесной комбинированной континуально-атомистической модели.

В диссертации Алексашкиной А.А. представлены вычислительные алгоритмы, построенные на основе методов молекулярной динамики необходимых для определения теплофизических и термодинамических свойств меди и золота. Полученные в результате вычислений температурные и барические зависимости свойств меди и золота в широком диапазоне температуры и давления были подвергнуты процедуре тщательной верификации и валидации с определёнными ранее теоретическими и экспериментальными результатами.

Диссертационная работа Алексашкиной А.А. затрагивает некоторые вопросы численного моделирования весьма важной и сложной проблемы, связанной с определением значений температуры, давления и плотности металлов в окрестности критической точки. На примере определения параметров критической точки для меди и золота для осуществления молекулярно-динамического моделирования были разработаны методы получения кривой сосуществования жидкость-пар. Из-за ограниченности экспериментальных данных полученные результаты сравнивались с результатами других исследований. Для получения свойств металлов и параметров критической точки использовался пакет Lammmps.

В заключительной главе диссертации автором представлено исследование механизмов фемтосекундной лазерной абляции. В рассмотрение включены такие механизмы лазерной абляции, как закритический разлет, фазовый взрыв, высокоскоростное плавление и механический откол жидкой и твердой фазы. Для исследования этих явлений Алексашкина А.А. провела детальный обзор имеющихся в литературе моделей атомистического моделирования и численных методов молекулярной динамики, широко используемых для решения неравновесных комбинированных континуально-атомистических моделей. Автором была предложена модификация модели, состоящая в учёте конвективного механизма переноса энергии в электронной подсистеме. Было проведено сравнение результатов моделирования глубины абляции в зависимости от флюенса и экспериментальных данных. Получено хорошее согласование с экспериментом по глубине абляции в рассматриваемых режимах. Для применения односкоростной неравновесной комбинированной континуально-атомистической модели в пакет Lammmps был добавлен модуль, реализующий неявную разностную схему с автоматическим выбором шага по времени для электронной температуры.

Диссертационная работа написана на высоком научном уровне, ясно изложена и иллюстрирована. В работе обоснована актуальность исследуемой проблемы, сформулированы основные цели и задачи работы, показана теоретическая и практическая значимость.

На основании вышесказанного считаю, что диссертационная работа Анны Андреевны Алексашкиной соответствует всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», а её автор заслуживает присуждения ей степени кандидата физико-математических наук по указанной специальности.

Научный руководитель,
Доктор физико-математических наук, профессор
Главный научный сотрудник 13 отдела
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

 В.И. Мажукин

Подпись В.И. Мажукина удостоверяю:
ученый секретарь ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
кандидат физико-математических наук

« 02 _____ » 2025 г.



А.А. Давыдов