

ОТЗЫВ

официального оппонента доктора физико-математических наук, старшего научного сотрудника Колдобы Александра Васильевича на диссертационную работу Алексашкиной Анны Андреевны «Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов импульсной лазерной абляции золота» на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Представленная диссертационная работа Алексашкиной Анны Андреевны посвящена развитию и применению методов молекулярной динамики для решения ряда задач: исследованию термодинамических и теплофизических свойств металлов в широком термобарическом диапазоне и определению неравновесных механизмов абляции золота при сверхбыстром лазерном воздействии.

Актуальность работы.

Применение нанотехнологий и наноматериалов в различных областях науки и техники вызывает значительный как теоретический, так и практический интерес. В настоящее время все более актуальным направлением исследований становится моделирование импульсной лазерной абляции для производства наночастиц. Процессы, индуцированные фемтосекундным излучением, включая тепловые, электронные и гидродинамические явления, фазовые переходы, происходят в условиях сильной неравновесности. Развитие математических моделей этих процессов и реализующих эти модели вычислительных алгоритмов имеет важное значение.

Научная новизна работы.

С помощью атомистического моделирования получены теплофизические и термодинамические характеристики некоторых металлов (медь, золото) в широком диапазоне термобарических условий, включающем околокритическую область.

Установлены критические параметры меди и золота: температура, плотность и давление, проведено их сравнение с экспериментальными данными.

Расширены возможности пакета LAMMPS посредством разработки и внедрения модуля, реализующего комбинированную двухтемпературную модель частично ионизированной плазмы. Соответствующая численная модель основана на неявной разностной схеме с автоматическим выбором шага по времени.

Практическая значимость.

Важным достижением работы является детальное исследование процессов, протекающих при воздействии лазерного импульса на золото. Показано, что основным механизмом удаления вещества является механический откол, при котором откалывается около 95% от всего количества удаленного вещества. Оставшиеся 5% приходятся на механизмы закритического разлета и фазового взрыва. Вычисленная глубина абляции соответствует экспериментальным данным. Полученные результаты могут быть использованы для совместного расчетно-экспериментального анализа режимов лазерной абляции золота. Разработанные методы и комплексы программ могут в дальнейшем использоваться для моделирования и оптимизации параметров лазерного синтеза наночастиц.

Степень обоснованности и достоверности

В работе автор применяет современные подходы для физической и математической постановки задач, демонстрируя глубокое понимание в данной области. Численные методы, используемые в работе, апробированы ранее. Достоверность и обоснованность результатов подтверждаются соответствием результатов расчетов экспериментальным данным, а также соответствием результатов численного моделирования с аналогичными расчетами, проведенными другими авторами.

Структура диссертации.

Диссертация содержит 127 страниц, включая 44 рисунка, введение, четыре главы, заключение, приложение и список литературы, содержащий 126 источников.

Содержание диссертационной работы

Во введении обосновывается актуальность темы, формулируются цели и задачи работы, обосновываются теоретическая и практическая значимость и научная новизна диссертации, а также указываются основные положения, выносимые на защиту. Указаны международные и российские конференции и семинары, на которых были представлены результаты диссертации.

В первой главе приведен обзор литературы, представлены и проанализированы результаты исследований в данном научном направлении, полученные другими авторами. Рассмотрены основные методы синтеза наночастиц, обоснован выбор лазерной абляции в качестве одного из наиболее перспективных подходов для получения наночастиц и нанокластеров. Для моделирования лазерной абляции применяются два основных подхода: атомистический и континуальный. Атомистический подход, основанный на молекулярной динамике, позволяет детально исследовать процессы на атомарном уровне, включая кинетику и термодинамику абляции. Континуальный подход, в свою очередь, рассматривает материал как непрерывную среду и использует уравнения

гидродинамики для моделирования процессов абляции. Перечислены известные подходы для определения равновесной температуры плавления, теплоемкости и теплопроводности. Показаны методы для оценки параметров критической точки меди и золота.

Вторая глава посвящена математической формулировке задачи. Определение теплофизических свойств проводилось на основе метода молекулярной динамики, в котором взаимодействие атомов между собой, а также их перемещение в пространстве подчиняются классическим уравнениям Ньютона. Объекту, состоящему из N атомов, соответствует система из $2N$ обыкновенных дифференциальных уравнений, дополненная потенциалом межчастичного взаимодействия. Для металлов (меди и золота) используются потенциалы погруженного атома. Описаны алгоритмы для определения в широком диапазоне температур и давлений барических зависимостей равновесной температуры плавления и удельной теплоты плавления, а также температурные зависимости энтальпии, теплоемкости, коэффициента линейного расширения, плотности и теплопроводности меди и золота. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

В третьей главе представлен алгоритм расчета параметров критической точки для меди и золота с помощью атомистического моделирования. Получены критические величины температуры, плотности и давления. Показаны температурные зависимости плотности жидкости и насыщенного пара. Проведена верификация полученных результатов с данными других авторов.

Четвертая глава посвящена абляции золота и исследованию ее основных механизмов с помощью атомистического моделирования. Физическая постановка задачи лазерного воздействия на металл представляется в следующем виде. На поверхность золотой мишени, помещенной в вакуум, падает поток лазерного излучения гауссовской формы по временной координате t , длиной волны λ , максимальной интенсивностью G_0 , достигающей на полуширине импульса τ . Часть излучения отражается поверхностью ($0 < R < 1$, R – коэффициент отражения). Оставшаяся доля излучения $A = (1-R)$ поглощается электронной компонентой металла по пространственной координате x по закону Бугера-Ламберта. Описана модификация односкоростной неравновесной комбинированной континуально-атомистической модели, применяющаяся для исследования. Моделирование проводилось с двумя потенциалами межчастичного взаимодействия. Для численного решения континуального уравнения применялся метод расщепления по двум физическим процессам: диффузии и конвекции. Решение системы уравнений комбинированной модели проводилось с помощью расширения пакета LAMMPS. Приведена блок-схема, демонстрирующая реализацию вычислительного алгоритма на одном молекулярно-динамическом шаге. Детально проанализированы механизмы абляции: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол. Приведены пространственные распределения частиц, температуры, давления,

плотности и скорости. Механический откол выделен как основной механизм откола вещества. Выполнена валидация результатов моделирования глубины абляции с экспериментальными данными для двух потенциалов.

В заключении сформулированы основные выводы и результаты работы.

Подтверждения опубликованных основных результатов диссертации в научной печати.

Результаты диссертации опубликованы в 17 работах, из которых 7 в изданиях, рекомендованных ВАК, и 11 в других индексируемых базах данных (Scopus, Web of Science, MathSciNet). Одна работа написана Алексашкиной А.А. без соавторов.

Автореферат полностью и точно отражает содержание диссертации.

Высоко оценивая диссертационную работу в целом, необходимо отметить следующие замечания:

1. В формуле (5) очевидно опечатка, хотелось бы получить комментарий.
2. Из сказанного как в главе 2, так и в главе 4 не ясно, скорость частиц имеет все три компоненты, что подразумевается векторной формой записи уравнений, или только одну, так как написано, что интегрируется $2N$ уравнений для описания динамики N частиц (стр.24 и 86). В связи с этим, как понимать формулировку: «В направлениях Y и Z наложены периодические граничные условия, благодаря чему 3-D молекулярная динамика сведена к 1-D задаче по X » (стр.87)?
3. В комментариях к системе (21)-(23) и далее термины «тяжелые частицы», «атомы», «ионы» обозначают одно и то же? Присутствует опечатка в выражении для электронного теплового потока. Величина ρ в уравнения не входит. Те же замечания относятся и к системе (24)-(26).
4. Учитывались ли вариации степени ионизации или заряды всех ионов считались фиксированными?
5. Следовало бы привести выражения для неравновесных частей электронного давления и электронной плотности энергии, а также уравнения состояния металлов (если это возможно).
6. Не ясно, какую роль в модели играет длина волны лазерного излучения.
7. При вычислении линейного расширения считалось, что напряжения по ортогональным направлениям фиксированы, или фиксированы размеры образца в этих направлениях?

Высказанные замечания не уменьшают значимости представленных научных результатов и не изменяют общую положительную оценку диссертационной работы Алексашкиной А.А.

Заключение

Диссертационная работа Алексашкиной Анны Андреевны является законченной научно-исследовательской работой, выполненной на высоком научном уровне. Достоверность полученных расчетных данных подтверждается использованием сравнением с экспериментальными данными и данными работ других авторов. Основные результаты диссертации прошли апробацию на международных и всероссийских конференциях и в должной мере отражены в научных публикациях, включая издания из перечня ВАК.

Считаю, что представленная диссертация соответствует квалификационным требованиям, предъявляемым ВАК России к кандидатским диссертациям. В том числе соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Алексашкина Анна Андреевна, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент

А.В. Колдоба

19 ноября 2025 г.

Подпись официального оппонента заведующего кафедрой МиТРНМ МФТИ Колдобы Александра Васильевича заверяю.

Ученый секретарь ученого совета МФТИ (НИУ)

к.ф.-м.н.



Евсеев Е.Г.

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.