

## ОТЗЫВ

### официального оппонента

на диссертационную работу Алексашкиной Анны Андреевны

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

1. Предсказательное моделирование известных материалов, а также перспективных новых материалов, в экстремальных условиях высоких температур и давлений недавно выдвинулось в первый ряд одних из самых востребованных средств для дальнейшего развития многих технологий, и в особенности нанотехнологий. При этом атомистические методы моделирования приобрели первостепенную важность с развитием новых межатомных потенциалов и ростом доступной вычислительной мощности в последнюю четверть века. В настоящее время стало возможным решать сложные задачи движения неравновесной сплошной среды с помощью метода классической молекулярной динамики на микрометровом масштабе в течение наносекунд без использования термодинамических и кинетических моделей. Однако реалистичность результатов такого моделирования зависит от качества используемых межатомных потенциалов, что обуславливает необходимость их всесторонней проверки в широком диапазоне темпов нагрева и деформаций моделируемого материала. Поэтому работа Алексашкиной А. А., посвященная разработке алгоритмов и компьютерных программ для тестирования нескольких известных потенциалов золота и меди с целью определения наиболее адекватных потенциалов, а также сравнительному моделированию лазерной абляции золота с этими потенциалами, **обладает необходимой актуальностью.**
2. Диссертационная работа Алексашкиной А. А. состоит из 127 страниц текста, 44 рисунка, 20 таблиц и состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения, и списка использованной литературы, содержащего 126 наименований.
  - А) во **введении** автором дается обоснование актуальности, научной новизны и практической значимости поставленных задач, формулируются цели исследования, дана информация о личном вкладе автора и апробации работы, собраны положения, выносимые на защиту.
  - Б) в **первой главе** сделан обзор работ по лазерной абляции металлов, изложены современные представления о теплофизических свойствах металлов и их критических параметрах. Обзор охватывает работы по лазерной абляции как длинными (наносекундными) импульсами, так и короткими (фемтосекундными) лазерными импульсами. Рассматриваются привлекаемые математические модели и методы моделирования, в частности двухтемпературная модель для электронной и решеточной температур в металлах (ТТМ), нагретых коротким импульсом. Указывается необходимость учёта скорости течения среды в уравнении энергии электронной подсистемы, записанного на эйлеровой пространственной сетке, что обычно игнорируется в молекулярно-динамических работах, использующих ТТМ приближение.
  - В) во **второй главе** приведена математическая формулировка поставленных задач, выбраны потенциалы взаимодействия атомов, а также приведены полученные зависимости теплофизических свойств меди и золота (температуры плавления, теплоемкости, и др.) от температуры и давления.
  - Г) в **третьей главе** приведены результаты моделирования критических свойств меди и золота.

Д) в четвертой главе описывается лазерная абляция золота ультракоротким лазерным импульсом. Представлен алгоритм численного решения комбинированной континуально-атомистической модели. Приведены результаты моделирования для двух исследуемых потенциалов золота, и полученные глубины абляции сравниваются с экспериментальными данными.

Е) В заключении сформулированы основные научные результаты диссертационной работы Алексашкиной А. А., находящиеся в соответствии с научными положениями.

Название диссертации отражает суть работы. Содержание диссертации соответствует специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Автореферат корректно и полно отражает содержание диссертации.

### 3. Замечания:

А) В разделе «1.1. Лазерная абляция металлов» на стр. 17-18 верно указывается, что «В широко известной ... ТТМ-MD модели [34,35,36]... В электронной подсистеме учёт движения среды отсутствует, поскольку описание всех процессов ограничивается одним уравнением нелинейной теплопроводности». Однако эта проблема возникает только при использовании эйлеровой пространственной сетки для безмассовой электронной подсистемы. В лагранжевой постановке перенос электронной подсистемы осуществляет ионная/атомарная среда из-за условия соблюдения полной электронейтральности.

Б) В разделе «2.8.1 Определение равновесной температуры плавления меди» на стр. 31 приведено отличие экспериментальной температуры плавления меди от расчетной в 1.9% при нулевом давлении, а в Табл. 1 приведена оценка ошибки 2.4% для этого же давления. Однако я не нашел в работе описания метода получения оценки ошибки моделирования. Также непонятна величина (она вероятно абсолютная в градусах, а не в процентах) погрешности аппроксимации  $\Delta(P_m(P_j), y_j)$  в Табл. 2 и далее, в частности здесь, вероятно, опечатка и должно быть  $T_m$

В) В разделе «2.10.1 Теплопроводность меди» Рис.17 вероятно соответствует  $T=400\text{K}$  а не  $300\text{K}$  (или возможно показана теплопроводность золота как на Рис. 20), так как он не согласован с обратной теплопроводностью равной 0.086 «для бесконечной длины области моделирования», как написано на стр.60

Г) В разделе «4.6. Результаты моделирования» на стр. 95 искаженно описывается процесс откола следующим образом: «Механический откол сопровождается отрицательным давлением. В веществе зарождается полость, которая под действием отрицательного давления расширяется». На самом деле откол вызывается отрицательным давлением при превышении прочности вещества на разрыв. В процессе зарождения полости (с пустотой внутри) на её краях давление подскакивает от окружающего отрицательного давления до нуля. Этот скачок давления (откольный импульс), распространяясь от полости, придает веществу скорость, что и приводит к расширению полости.

**Сделанные замечания не влияют на основные результаты работы и не снижают ее научной значимости.**

4. **Научная новизна** диссертационной работы Алексашкиной А. А. обусловлена следующими впервые разработанными методами и полученными результатами:

А) вычислены теплофизические свойства меди и золота в широком температурном диапазоне, включающем область фазового перехода в жидкое состояние;

Б) определены критические параметры меди и золота для исследуемых потенциалов;

- В) исследованы потенциалы погруженного атома, использующиеся в моделировании механизмов ультракороткой лазерной абляции золота;
- Г) получены в моделировании и проанализированы основные механизмы ультракороткой лазерной абляции металлов на примере золота: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол. Проведено сравнение результатов моделирования глубины абляции с экспериментальными данными;
- Д) добавлен новый программный модуль в пакет LAMMPS, который реализует неявную разностную схему с автоматическим выбором шага по времени для электронной температуры в двухтемпературной комбинированной модели;
5. **Теоретическая значимость** работы заключается в определении температурных и барических зависимостей теплофизических свойств меди и золота в широком диапазоне температур и давлений, вплоть до критической точки, которые могут найти применение в теоретических исследованиях в различных областях, таких как материаловедение и нанотехнологии.
6. **Практическая значимость** работы определяется возможностью использования представленных в диссертационной работе основных механизмов откола: закритического разлета, фазового взрыва и механического откола, обнаруженных при моделировании ультракороткой лазерной абляции золота, для оптимизации параметров наночастиц и кластеров, формирующихся при лазерной абляции.
7. **Достоверность и обоснованность результатов и выводов** следует из корректности постановки задачи, использования общеизвестных двухтемпературной модели и метода классической молекулярной динамики, которые опубликованы и подтверждены ранее другими авторами, а также применения апробированных потенциалов взаимодействия атомов меди и золота. Достоверность результатов подтверждается согласованием с экспериментальными данными и данными работ других авторов. Достоверность и обоснованность результатов и выводов сомнения не вызывает.
8. **Апробация** работы проведена с помощью докладов, представленных на 5 российских и 5 международных конференциях, начиная с 2018 года. **Список публикаций** Алексашкиной А. А. по теме диссертации содержит 7 работ в рецензируемых научных журналах, входящих в «Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук» ВАК.
9. **Личный вклад:** автором были проведены все представленные молекулярно-динамические расчеты. Все приведенные в диссертации результаты получены самим автором, либо в рамках сотрудничества с соавторами. Все исследования и основные результаты, выносимые на защиту, показывают персональный вклад автора в опубликованные работы.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертация Алексашкиной Анны Андреевны представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует паспорту научной специальности 1.2.2. «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» и требованиям п.9 Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 №842 «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор Алексашкина Анна Андреевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Отзыв составил ведущий научный сотрудник отдела компьютерного моделирования Центра фундаментальных и прикладных исследований ФГУП «ВНИИА им. Н.Л. Духова», к.ф.-м.н., Жаховский Василий Викторович (127030, Москва, Сущевская улица, д. 22, тел. (499) 972-8499, e-mail: [basilz@ya.ru](mailto:basilz@ya.ru)).

*В.В. Жаховский* (Жаховский В.В.) 21 ноября 2025

Подпись Жаховского В. В. заверяю  
Ученый секретарь НТС ФГУП «ВНИИА»



Феоктистова Л. В.

21.11.2025

Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова», Москва, ул. Сущевская, д. 22.

Тел.: +7(499)978-7803

<http://www.vniia.ru>

e-mail: [vniia@vniia.ru](mailto:vniia@vniia.ru)