

МИНИСТЕРСТВО
НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

**«Национальный
исследовательский ядерный
университет «МИФИ»
(НИЯУ МИФИ)»**

Каширское шоссе, д.31, г. Москва, 115409
Тел. (499) 324-77-77, факс (499) 324-21-11
<http://www.mephi.ru>
e-mail: info@mephi.ru

24.11.2025 № 97-9/25
На № _____ от _____

«УТВЕРЖДАЮ»

Первый проректор федерального
государственного автономного
образовательного учреждения высшего
образования «Национальный
исследовательский ядерный университет
«МИФИ»



доктор физико-математических наук,
профессор

О.В. Нагорнов

«24» ноября 2025 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
на диссертационную работу Алексашкиной Анны Андреевны
«Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов импульсной лазерной абляции золота», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Представленная диссертационная работа Алексашкиной Анны Андреевны посвящена разработке математических моделей и их программной реализации для математического моделирования свойств металлов и исследования фемтосекундной лазерной абляции.

Актуальность темы исследования.

Одним из методов синтеза наночастиц является лазерная абляция металлов импульсами ультракороткой (фемтосекундной) длительности. Использование фемтосекундных лазерных импульсов в качестве источника нагрева создает дополнительные возможности для практического применения процессов наноструктурирования, в том числе, генерации наночастиц и наноструктур для медицинских и биологических задач. Экспериментально-теоретические исследования фундаментальных свойств, лежащих в основе сверхкороткой лазерной абляции, создают перспективы внедрения прикладных приложений

При фемтосекундном воздействии на металлы длительность лазерных импульсов короче, чем время релаксации основных процессов. В этом случае поглощённая энергия импульса вначале сосредоточена в электронной компоненте, в то время как решётка остаётся холодной на время, необходимое для передачи энергии от нагретых электронов к решётке. Вследствие этого все процессы, вызываемые фемтосекундным излучением

(включая электронные, тепловые, гидродинамические явления и фазовые переходы), происходят в условиях выраженной неравновесности.

Исследования термодинамических и теплофизических свойств металлов (медь, золото) в широком диапазоне температур и давлений, а также механизмов фемтосекундной абляции, требуют применения современных методов моделирования и новых подходов в разработке вычислительных алгоритмов, в том числе атомистического и континуально-атомистического подходов.

Задача определения методами математического моделирования термодинамических и теплофизических свойств металлов меди и золота в широком диапазоне температур и давлений и исследование механизмов ультракороткой лазерной абляции золота является актуальной.

Научная новизна определяется комплексом решений (математических, алгоритмических и программных):

- предложенными алгоритмами, с помощью которых вычислены теплофизические свойства металлов (меди и золота) в широком температурном диапазоне, включающем область фазового перехода (плавление-кристаллизация), и околокритическую область, в которой определены параметры критической точки меди и золота;
- модификацией и расширением пакета молекулярной динамики Lammmps (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) посредством специально разработанного дополнительного модуля, реализующего комбинированную двухтемпературную модель с неявной разностной схемой с автоматическим выбором шага по времени для электронной температуры;
- применением односкоростной неравновесной двухтемпературной комбинированной континуально-атомистической модели для исследования механизмов ультракороткой лазерной абляции золота: закритического разлета, фазового взрыва и механического откола.

Теоретическая и практическая значимость полученных результатов.

Теоретическая значимость диссертационного исследования заключается в разработке вычислительных алгоритмов, построенных на основе методов молекулярной динамики, применяемых для исследования теплофизических и термодинамических свойств меди и золота в широком диапазоне температур и давлений.

Полученные результаты атомистического моделирования создают перспективы для практического применения в процессах, связанных с наноструктурированием и генерацией наночастиц при фемтосекундном лазерном воздействии на образцы золота. Результаты моделирования свойств меди и золота могут быть востребованы при разработке новых материалов с заданными свойствами в широкой области применений от материаловедения до биомедицины.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и заключений.

Обоснованность и достоверность применяемых в работе математических методов основываются на результатах верификации применяемых вычислительных алгоритмов и полученных с их помощью данных (теплофизические свойства и критические параметры) с известными результатами других авторов. Достоверность результатов математического моделирования фемтосекундной лазерной фрагментации золота основывается на сравнении известных экспериментальных данных о выносе вещества с данными моделирования.

Соответствие паспорту специальности ВАК.

Диссертационная работа Алексашкиной АА. полностью соответствует паспорту специальности ВАК 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Апробация.

Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на международных и российских конференциях, а также на научных семинарах. По теме диссертации опубликовано 17 работ, из которых 7 в изданиях из Перечня журналов, рекомендованных ВАК, и 10 в журналах, индексируемых в международных базах данных Scopus, Web of Science и Math Sci Net. Одна из статей опубликована без соавторов.

Личный вклад автора.

Почти все работы, кроме одной, написаны в соавторстве с научным руководителем и др. В диссертации и автореферате указано, что лично автором были проведены все молекулярно-динамические расчеты, а также расчеты с применением комбинированной континуально-атомистической модели и выполнена интерпретация полученных данных.

Содержание диссертации.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложения. Общий объем диссертации составляет 127 страниц, включая 44 рисунка. Библиографический список содержит 126 наименований.

Во введении обосновывается актуальность проводимых исследований, формулируются цель, задачи, научная новизна, теоретическая и практическая значимость представляемой работы, приведены положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена обзору научных работ по теме диссертации. Обзор литературы включает источники, в которых описываются достижения в области фундаментальных исследований процессов и свойств микроструктуры, термодинамических, теплофизических и кинетических свойств металлов, а также синтеза современных материалов. Отдельное внимание уделено фемтосекундному лазерному воздействию на металлы и анализу основных механизмов их абляции. Перечислены известные методы определения равновесной температуры плавления, теплоемкости и теплопроводности, а также параметров критической точки меди и золота с помощью моделирования. Из обзора следует, что благодаря прогрессу современной вычислительной техники и разработке новых алгоритмов и методов вычисления возможности атомистического моделирования сильно возросли.

Во второй главе описывается метод молекулярно-динамического моделирования. Представлена математическая формулировка атомистической модели, состоящая из системы обыкновенных дифференциальных уравнений, начальных и дополнительных условий для решения этой системы уравнений. Для описания взаимодействия частиц металлов выбран потенциал погруженного атома EAM. В дальнейшем система уравнений решается с помощью разностной схемы Верле. Для молекулярно-динамического моделирования используется пакет LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator).

Описаны алгоритмы расчета барических зависимостей равновесной температуры плавления, удельной теплоты плавления, а также температурных зависимостей энтальпии, теплоемкости, коэффициента линейного расширения, плотности и теплопроводности для двух металлов — меди и золота.

В третьей главе с помощью молекулярно-динамического моделирования выполнен расчет критических параметров металлов (меди и золота): критическая температура, критическая плотность и критическое давление. Верификация результатов моделирования

проводилась только с теоретическими данными, полученными другими авторами, из-за отсутствия экспериментальных данных по критическим параметрам меди и золота.

Четвертая глава посвящена исследованию механизмов фемтосекундной лазерной абляции золота и процессов, возникающих при воздействии лазерного излучения на металл с помощью комбинированной континуально-атомистической модели. Математическая модель состоит из двух подсистем, первая из которых (континуальная), используется для описания процессов в потоке коллективизированных электронов с учётом переноса вещества и переноса лазерного излучения (закон Бугера-Ламберта). Вторая же, атомистическая подсистема, отображает поведение тяжелых частиц (ионов) в кристаллическом, жидком и парогазовом состоянии. Для численного решения континуального уравнения применялся метод расщепления по физическим процессам: конвективного и диффузионного. Приведен алгоритм численного решения. Реализация вычислительного алгоритма на одном молекулярно-динамическом шаге моделирования проиллюстрирована блок-схемой. Выполнен детальный анализ механизмов абляции: закритический разлет, фазовый взрыв и фотомеханический откол. Приведено сравнение с результатами моделирования глубины абляции для двух моделей потенциала ЕАМ с экспериментальными данными, что позволило выбрать потенциал взаимодействия, с использованием которого результаты моделирования с хорошей точностью описывают экспериментальные данные по глубине абляции для золота в рассматриваемом режиме воздействия лазерного излучения.

В заключении приводятся основные результаты диссертационной работы и выводы.

Автореферат соответствует установленным требованиям и полностью отражает основное содержание диссертации.

По содержанию работы сделаны следующие замечания:

1. В диссертации отмечается, что «задачей моделирования является детальное воспроизведение всех существующих этапов лазерной абляции» стр. 82, однако в ней не указан этап, на котором возникает ударная волна в образце.

Можно предположить, что фазовый взрыв генерирует ударную волну, за которой следует волна разрежения, когда вещество начинает расширяться (разлетаться). Это подтверждают рис. 35 е) при $x = 2400$ нм и $P = 25$ ГПа, рис. 36 при $x = 2200$ нм, рис. 37 $x = 2300$ нм, на которых даже видны участки давлений с фронтами ударных волн.

2. Только один из используемых в расчетах потенциалов ЕАМ [79] был протестирован в главах 2 и 3 при определении теплофизических свойств и критических параметров золота.

3. На стр. 91 нет пояснения, почему на втором этапе решения исходного уравнения (24) путем расщепления по процессам при расчете конвективного переноса электронной энергии (31) за каждым ионом в j -ячейке закрепляется значение электронной энергии равно $E_e^{[j]} V_{cell} / N^{[j]}$.

4. В главе 4 при моделировании процесса лазерной абляции показано, что температура на поверхности решетки золота достигает 13 000 К. Учитывается ли в этом случае термическая ионизация при молекулярно-динамическом моделировании?

Эти замечания не уменьшают значимости представленных научных результатов, не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы Алексашкиной А.А. и не затрагивают её основных положений и выводов.

Заключение.

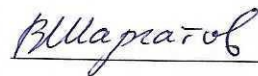
Диссертационная работа Алексашкиной А.А. является законченным научно-квалификационным исследованием, основные результаты которого в достаточной мере отражены в публикациях и изданиях из перечня ВАК и прошли апробацию на международных и всероссийских конференциях и семинарах. Работа ясно изложена, хорошо структурирована и оформлена.

Диссертационная работа Алексашкиной А. А. полностью соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённых постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842, предъявляемым ВАК России к кандидатским диссертациям, а её автор, Алексашкина Анна Андреевна, заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Отзыв ведущей организации обсужден и одобрен на научном семинаре института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ 06.11.2025 г.

Отзыв подготовили:


Заведующий кафедрой суперкомпьютерного моделирования инженерно-физических процессов Института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ
д. ф.-м. н., с.н.с.

 В.А. Шаргатов

Заведующий кафедрой химической физики Института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ
д. ф.-м. н., профессор

 С.А. Губин

Председатель совета по аттестации и подготовке научно-педагогических кадров НИЯУ МИФИ,
д. ф.-м. н., профессор

 Н.А. Кудряшов

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
Почтовый адрес: 115409, Москва, Каширское ш., 31
Телефон: +7 495 788 5699, +7 499 324 7777
Адрес электронной почты: info@mephi.ru
Адрес официального сайта в сети «Интернет»: <https://mephi.ru/>