

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.237.01,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УЧРЕЖДЕНИЯ  
«ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР ИНСТИТУТ  
ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМ. М.В. КЕЛДЫША РАН»  
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ  
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 11 декабря 2025 № 6

о присуждении **Алексашкиной Анне Андреевне**, гражданки Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов импульсной лазерной абляции золота» по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» принята к защите 02.10.25 (протокол заседания №6/пз) диссертационным советом 24.1.237.01, созданным на базе Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук» (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН), 125047, Москва, Миусская пл., д. 4. Диссертационный совет утвержден приказом Минобрнауки России №105/нк от 11 апреля 2012 года.

Соискатель **Алексашкина Анна Андреевна**, 1993 года рождения, в 2015 году окончила механико-математический факультет Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» по специальности «Математика» с присвоением квалификации – Математик.

С 2017 г. по 2021 г. соискатель освоила программу подготовки научно-педагогических кадров в очной аспирантуре ИПМ им. М.В. Келдыша РАН по направлению подготовки «09.06.01 Информатика и вычислительная техника».

Диссертация подготовлена в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН в период обучения в аспирантуре и дальнейшей работы. В настоящее время соискатель работает в должности младшего научного сотрудника в отделе №13 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

**Научный руководитель – Мажукин Владимир Иванович**, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник отдела №13 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

**Официальные оппоненты:**

**Колдоба Александр Васильевич**, доктор физико-математических наук (специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ), старший научный сотрудник, заведующий кафедрой моделирования и технологий разработки нефтяных месторождений Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»;

**Жаховский Василий Викторович**, кандидат физико-математических наук (специальность 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника), ведущий научный сотрудник центра фундаментальных и прикладных исследований Федерального государственного унитарного предприятия «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова»,

дали **положительные** отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» в своем **положительном** отзыве, подписанном **Шаргатовым Владимиром Анатольевичем**,

доктором физико-математических наук, старшим научным сотрудником, заведующим кафедрой суперкомпьютерного моделирования инженерно-физических процессов Института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ, **Губиным Сергеем Александровичем**, доктором физико-математических наук, профессором, заведующим кафедрой химической физики Института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ, **Кудряшовым Николаем Алексеевичем**, доктором физико-математических наук, профессором, председателем совета по аттестации и подготовке научно-педагогических кадров НИЯУ МИФИ, и утвержденным **Нагорновым Олегом Викторовичем**, доктором физико-математических наук, профессором, первым проректором «Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» указала, что работа посвящена разработке математических моделей и их программной реализации для математического моделирования свойств металлов и исследования фемтосекундной лазерной абляции. Теоретическая и практическая значимость полученных результатов заключается в разработке вычислительных алгоритмов на основе методов молекулярной динамики, применяемых для исследования теплофизических и термодинамических свойств меди и золота в широком диапазоне температур и давлений. Результаты моделирования свойств меди и золота могут быть востребованы при разработке новых материалов с заданными свойствами в широкой области применений от материаловедения до биомедицины. Диссертация Алексашкиной Анны Андреевны является законченным научным исследованием, содержание и результаты работы соответствуют 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 А.А., заслуживает присуждения ученой степени кандидата наук физико-математических наук по специальности 1.2.2.

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Соискатель имеет 16 опубликованных работ по теме диссертации, в том числе 7 публикаций в изданиях, входящих в перечень ВАК, 9 – в журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus и MathSciNet:

1. Алексашкина А.А., Демин М.М., Мажукин В.И. Молекулярно-динамическое моделирование теплофизических свойств меди в окрестности точки плавления. Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, №66, 2018. **(ВАК)**
2. V. I. Mazhukin, M. M. Demin, A. A. Aleksashkina, Atomistic Modeling of Thermophysical Properties of Copper in the Region of the Melting Point. *Mathematica Montisnigri*, 41, 2018. **(WoS)**
3. M.M. Demin, O.N. Koroleva, A.V. Shapranov, A.A. Aleksashkina, Atomistic modeling of the critical region of copper using a liquid-vapor coexistence curve. *Mathematica Montisnigri*, 46, 2019. **(WoS)**
4. A. A. Aleksashkina, M. M. Demin, V. I. Mazhukin, Molecular dynamic calculation of lattice thermal conductivity of gold in the melting crystallization region. *Mathematica Montisnigri*, 46, 2019. **(WoS)**
5. M.M. Demin, O.N. Koroleva, A.A. Aleksashkina, V.I. Mazhukin. Molecular-dynamic modeling of thermophysical properties of phonon subsystem of copper in wide temperature range. *Mathematica Montisnigri*, 47, 2020. **(WoS)**
6. М.М. Демин, О.Н. Королева, А.А. Алексашкина, В.И. Мажукин. Атомистическое моделирование характеристик фононной подсистемы меди в широком температурном диапазоне. Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, № 33, 2020. **(ВАК)**
7. Демин М.М., Алексашкина А.А., Королева О.Н. Атомистическое моделирование характеристик золота в области фазового перехода

- плавление–кристаллизация. Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, № 1, 2020. **(ВАК)**
8. В. И. Мажукин, О. Н. Королева, М. М. Демин, А. А. Алексашкина, Атомистическое моделирование параметров критической области золота с использованием кривой сосуществования жидкость–пар. Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, №83, 2021. **(ВАК)**
9. В. И. Мажукин, О. Н. Королева, А. В. Шапранов, А. А. Алексашкина, М. М. Демин, Молекулярно-динамическое моделирование термического гистерезиса золота. Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, №81, 2021. **(ВАК)**
10. Алексашкина А.А. Молекулярно-динамическое моделирование теплофизических свойств золота. Ученые записки физического факультета МГУ №1, 2022. **(ВАК, WoS)**
11. В.И. Мажукин, О.Н. Королева, А.В. Шапранов, М.М. Демин, А.А. Алексашкина Определение теплофизических свойств золота в области фазового перехода плавление-кристаллизация. Молекулярно-динамический подход. Математическое моделирование 34, №1, 2022. **(Scopus)**
12. В.И. Мажукин, О.Н. Королева, М.М. Демин, А.В. Шапранов, А.А. Алексашкина Атомистическое моделирование сосуществования фазовых состояний жидкость-пар для золота и определение критических параметров. Математическое моделирование, 34, №3, 2022. **(Scopus)**
13. В. И. Мажукин, О. Н. Королева, М. М. Демин, А. А. Алексашкина Неравновесные характеристики теплообмена меди в широком температурном диапазоне. Математическое моделирование, 34, №10, 2022. **(Scopus)** // Mathematical Models and Computer Simulations, 2023. **(Scopus)** (в автореферате перечислены как две отдельные работы, общее количество работ, указанных в автореферате - 17).
14. V. I. Mazhukin, O.N. Koroleva, A.V. Shapranov, M. M. Demin, A. A. Aleksashkina Molecular dynamics study of the thermal hysteresis during

melting-crystallization of noble metals, *Mathematica Montisnigri*, 53, 2022.

**(MathSciNet)**

15. V. I. Mazhukin, O.N. Koroleva, M. M. Demin, A. A. Aleksashkina Atomistic modeling of the properties of gold in the region of phase transitions of the first order, *Mathematica Montisnigri*, 55, 2022. **(MathSciNet)**

16. А. А. Алексахкина, В. И. Мажукин Молекулярно-динамическое исследование основных механизмов абляции золота ультракоротким лазерным воздействием. Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, №36, 2024.

**(BAK)**

В работах [1, 2, 4-11, 13-15] автором с помощью численного моделирования впервые определены теплофизические и термодинамические свойства меди и золота в широком диапазоне температур от 300 К до околоскритической области и давлений в диапазоне  $0 \div 100$  Кбар. Работы [3, 12] посвящены исследованию свойств металлов (меди и золота) в окрестности критической точки, определены критические параметры: температура, плотность и давление. В работе [16] автором с помощью модификации континуально-атомистической модели проведено исследование абляции при воздействии ультракороткого лазерного импульса на металл (золото). Осуществлена программная реализация комбинированной двухтемпературной континуально-атомистической модели, исследованы три режима абляции: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол. Проведено сравнение результатов количества удаленного вещества от флюенса лазерного излучения для двух потенциалов погруженного атома для золота с данными эксперимента. Работа [10] посвящена исследованию теплофизических свойств золота, для которых получены полиномиальные зависимости.

Научные статьи отражают основные результаты диссертационной работы. Сведения об опубликованных соискателем работах достоверны.

На диссертацию поступили отзывы ведущей организации и оппонентов, также поступил 1 отзыв на автореферат. Все отзывы положительные. В отзывах содержится ряд замечаний:

*В отзыве ведущей организации МИФИ:*

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.  
Скорее всего, фазовый взрыв генерирует ударную волну, за которой следует волна разрежения, когда вещество начинает расширяться (разлетаться). Это подтверждают рис. 35 е) при  $\lambda = 2400$  нм и  $P = 25$  ГПа, рис. 36 при  $\lambda = 2200$  нм, рис. 37  $\lambda = 2300$  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 – конвективный перенос электронной энергии (31) за каждым ионом в  $j$ -ячейке закрепляется значение электронной энергии равное  $E_e^{[j]} V_{cell} / N^{[j]}$ .
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?

*В отзыве официального оппонента, д.ф.-м.н. Колдобы А.В.:*

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  $\rho$  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? Как вычислялась электронная плотность в (27)?
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?

*В отзыве официального оппонента, к.ф.-м.н. Жаховского В.В.:*

1. В разделе «1.1. Лазерная абляция металлов» на стр. 17-18 верно указывается, что «В широко известной ... ТТМ-МД 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 электронной нейтральности.

2. 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  $T_m$ .
3. 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
4. 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.

*В отзыве на автореферат от Дьякова Павла Александровича, к.ф.-м.н., ведущего специалиста механико-математического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова имеются следующие замечания:*

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.

**Выбор официальных оппонентов и ведущей организации** обосновывается их широкой известностью и высоким уровнем компетентности по всем основным вопросам, рассмотренным в диссертации, включая изучение процессов ультракороткой лазерной абляции, разработку и анализ новых вычислительных алгоритмов, реализацию их в виде программного комплекса, применение методов и средств математического моделирования для решения сложных научно-практических задач, что подтверждается списком публикаций официальных оппонентов и сотрудников ведущей организации.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных исследований соискателем получены следующие результаты:**

1. В широком диапазоне температуры  $300K \leq T \leq 5700K$ , включающем фазовый переход плавления-кристаллизации и окологритическую область, и давления  $0 \leq P \leq 100$  кбар методом молекулярной динамики определены следующие теплофизические и термодинамические характеристики меди и золота:
  - a. барические зависимости удельной теплоты плавления  $L_m(P)$  и равновесной температуры плавления  $T_m(P)$ ;
  - b. температурные зависимости энтальпии  $H(T)$ , удельной теплоемкости  $C_p(T)$ , плотности  $\rho(T)$ , линейного размера  $\ell(T)$  и коэффициента линейного расширения  $\alpha(T)$ , теплопроводности  $\lambda(T)$ ;
  - c. впервые для выбранных потенциалов взаимодействия частиц для золота и меди молекулярно-динамическим моделированием получены параметры критических точек  $T_{cr}$ ,  $\rho_{cr}$ ,  $P_{cr}$  этих металлов.
2. Верификация и валидация результатов молекулярно-динамического моделирования показали, что используемые потенциалы взаимодействия

описывают свойства металлов (Cu, Au) с допустимой погрешностью, и позволили выявить потенциал, лучше согласующийся с экспериментальными данными по глубине абляции в рассматриваемом режиме воздействия.

3. С помощью разработанной односкоростной неравновесной двухтемпературной комбинированной континуально-атомистической модели были получены и проанализированы следующие механизмы ультракороткой лазерной абляции золота: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол. Удалось выявить основной механизм удаления вещества с поверхности.
4. **Осуществлена программная реализация** неравновесной двухтемпературной континуально-атомистической модели с применением метода расщепления исходного электронного уравнения на уравнения диффузии и конвекции, добавлен программный модуль в пакет LAMMPS.

**Теоретическая значимость исследования** состоит в том, что полученные температурные и барические зависимости теплофизических и термодинамических свойств меди и золота в широких диапазонах температур и давления, включающих околокритические зоны и зоны фазовых переходов, могут применяться в различных теоретических и прикладных исследованиях. В частности, в таких областях как материаловедение, нанотехнологии, биомедицина и др. Применяемые потенциалы погруженного атома меди и золота могут применяться для дальнейшего моделирования физических процессов.

**Практическое значение результатов исследования** заключается в проведенном детальном исследовании основных механизмов откола (закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол) с помощью модифицированной континуально-атомистической модели, и имеет большое значение для многих перспективных приложений в электронике, физике,

медицине и может способствовать оптимизации параметров лазерного синтеза наночастиц и нанокластеров.

**Оценка достоверности результатов** исследования выявила следующее: используются общепризнанные модели молекулярной динамики и известные потенциалы взаимодействия частиц (для меди и золота), а также двухтемпературные континуально-атомистические модели. Проводится сопоставление с экспериментальными данными и сравнение с результатами исследований других авторов, подтверждающее хорошее совпадение результатов.

**Личный вклад соискателя.** Алексашкиной А.А. были лично проведены все молекулярно-динамические расчеты для определения теплофизических и термодинамических свойств веществ. Выполнена программная реализация неравновесной двухтемпературной континуально-атомистической модели, с помощью которой исследованы процессы лазерной абляции золотой мишени. Проведен анализ полученных данных. Материалы из совместных публикаций, использованные в работе, содержат оригинальные результаты автора.

В ходе защиты диссертации вопросы соискателю задали члены диссертационного совета: д.ф.-м.н. Змитренко Н.В., д.ф.-м.н. Аристова Е.Н., д.ф.-м.н., академик РАН Четверушкин Б.Н., д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН Тишкин В.Ф., д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН Василевский Ю.В.

Н.В. Змитренко спросил, в чем заключается новизна в исследовании. Соискатель ответила, что удалось рассчитать свойства металлов в более широком диапазоне температур и давлений, чем известные экспериментальные данные; а также исследовать процессы, возникающие при ультракороткой лазерной абляции золота, определить критические параметры. Проведена модификация программного модуля пакета LAMMPS. Также Н.В. Змитренко задал вопрос про сохранение энергии при периодических «граничных» условиях. Соискатель объяснила, что энергия

сохраняется, так как скорость частицы и силы, действующие на частицу, вычисляются для всех соседей, и не изменяются при замене частицы. Е.Н. Аристова поинтересовалась, как вычислялась ошибка. Соискатель ответила, что вычислялась флуктуационная ошибка. Ошибка потенциала не учитывалась. Б.Н.Четверушкин спросил про время релаксации образца и дальнейшее время расчета. Соискатель пояснила, что для расчета теплофизических свойств время релаксации образца составляло 5-10 пс, шаг интегрирования был 1 фс. Для расчета равновесной температуры плавления время расчета составило несколько сотен пикосекунд. В.Ф. Тишкин задал вопрос о том, почему на графике осколки выглядят плоскими. Соискатель объяснила, как действует лазерный импульс и продемонстрировала, как образуется разлет частиц. Ю.В. Василевский спросил о роли моделирования в производстве наночастиц. Соискатель ответила, что с помощью выбора различных параметров в модели можно получать нано-частицы с заданными свойствами. В.Ф. Тишкин также поинтересовался, возникают ли быстрые электроны. Соискатель пояснила, что после окончания лазерного импульса вещество распыляется. Н.В. Змитренко добавил, что быстрых электронов при выбранной интенсивности лазерного излучения не может быть.

Во время дискуссии в поддержку диссертации выступил д.ф.-м.н. Четверушкин Б.Н. Все ответы соискателя и выступления участников заседания представлены в стенограмме заседания.

На заседании 11 декабря 2025 года диссертационный совет принял решение присудить Алексашкиной Анне Андреевне ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» за решение научной задачи, вносящей существенный вклад в развитие методов моделирования, разработку вычислительных алгоритмов и проведения на их основе моделирования процессов фемтосекундной лазерной абляции.

