

УТВЕРЖДАЮ:

директор ИПМ им.М.В. Келдыша РАН
член-кор., доктор физ-мат наук

Аптекарев А.И.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного учреждения "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук".

Диссертация «Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов импульсной лазерной абляции золота» выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук».

В период подготовки диссертации соискатель Алексашкина Анна Андреевна работала в отделе № 13 в Федеральном государственном учреждении «Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» в должности младшего научного сотрудника.

В 2015 г. окончила Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова» по специальности «Математика». В 2021 г. закончила очную аспирантуру ИПМ им. М.В. Келдыша РАН по направлению подготовки 09.06.01 Информатика и вычислительная техника.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2024 г. в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук».

Научный руководитель - доктор физико-математических наук, профессор Мажукин Владимир Иванович работает в отделе № 13 в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» в должности главного научного сотрудника.

По итогам обсуждения диссертации «Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов импульсной лазерной абляции золота» **принято следующее заключение:**

Тема диссертации является актуальной, поскольку работа посвящена разработке численной модели, алгоритмов и программных кодов для решения задач, имеющих теоретическое и прикладное значение. Она содержит новые результаты в области математического моделирования получения металлических наночастиц. Автором получены свойства металлов в широком диапазоне температур и давлений. С использованием континуально-атомистической модели исследованы механизмы получения наночастиц с помощью ультракороткого лазерного воздействия на металл, а также разработана программная реализация на основе пакета молекулярной динамики LAMMPS, которая может быть использована для решения конкретных прикладных задач.

Целью настоящей работы ставится определение методом молекулярной динамики термодинамических и теплофизических свойств металлов Au и Cu в широком диапазоне

температур ($T_0 = 300\text{K} \leq T \leq T_{cr}$) и давлений ($0 \text{ Бар} \leq P \leq 100 \text{ кБар}$). Молекулярно-динамическое моделирование ультракороткой лазерной абляции золотой мишени.

Для достижения цели работы решаются следующие задачи:

1. Определению подлежат следующие характеристики Au и Cu: барические зависимости температуры плавления $T_m(P)$ и удельной теплоты плавления $L_m(P)$ в диапазоне $0 \text{ Бар} \leq P \leq 100 \text{ кБар}$; температурные зависимости энтальпии $H(T)$, удельной теплоемкости $C_p(T)$, плотности $\rho(T)$, линейного размера $l(T)$, коэффициента линейного расширения $\alpha(T)$, теплопроводности $\lambda(T)$ в диапазоне $300\text{K} \leq T \leq 6000\text{K}$; критические параметры T_{cr} , P_{cr} , ρ_{cr} . Верификация и валидация полученных результатов.
2. Исследование основных механизмов удаления вещества под действием лазерного импульса: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол с помощью комбинированной континуально-атомистической модели.
3. Вычисление количества удаленного вещества при разных механизмах откола.
4. МДМ процессов абляции металлической (золото) мишени с применением двух различных потенциалов взаимодействия частиц. Осуществление валидации результатов моделирования для каждого из используемых потенциалов взаимодействия.

Основные результаты диссертации:

1. Методом молекулярной динамики впервые определены следующие теплофизические и термодинамические характеристики меди и золота:
 - а) барические зависимости удельной теплоты плавления $L_m(P)$ и равновесной температуры плавления $T_m(P)$ в диапазоне давлений от нуля до 100 кБар;
 - б) температурные зависимости энтальпии $H(T)$, удельной теплоемкости $C_p(T)$, плотности $\rho(T)$, линейного размера $l(T)$ и коэффициента линейного расширения $\alpha(T)$, теплопроводности $\lambda(T)$ в широком температурном диапазоне от 300К до 6000К, включающем фазовый переход плавления-кристаллизации и околокритическую область.
2. Впервые МДМ получены параметры критической точки T_{cr} , ρ_{cr} , P_{cr} золота и меди для выбранных потенциалов взаимодействия частиц.
3. Верификация и валидация результатов МДМ показали, что используемые потенциалы взаимодействия позволяют описывать свойства металлов (Cu, Au) с допустимой погрешностью.
4. Впервые применение континуально-атомистической модели позволило установить следующие механизмы абляции при ультракоротком лазерном воздействии: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол. Моделирование показало, что в фемтосекундном диапазоне воздействия основным механизмом абляции является фрагментация вещества в гидродинамической волне разрежения (механический откол).
5. Валидация результатов моделирования, полученных с применением двух различных потенциалов, позволила определить потенциал, лучше согласующийся с экспериментальными данными по глубине абляции, в рассматриваемом режиме воздействия.

Все результаты диссертации получены лично соискателем при научном руководстве Мажукина Владимира Ивановича.

Научная новизна работы включает комплекс решений (математических, алгоритмических и программных), а также результаты расчетов, обеспечивающих достижение цели работы.

1. Вычислены теплофизические свойства металлов (меди и золота) в широком температурном диапазоне, включающем область фазового перехода (плавление-кристаллизация), а также околокритическую область.
2. Исследованы ЕАМ потенциалы для меди и золота для определения параметров критической точки с помощью моделирования.

3. В результате моделирования ультракороткой лазерной абляции выделены и описаны основные механизмы откола вещества: закритический разлет, фазовый взрыв и механический откол. Проведено сравнение результатов глубины абляции при моделировании с использованием двух потенциалов и экспериментальными данными.

Научная и практическая ценность работы заключается в том, что металлы широко применяются в различных областях, поэтому знание температурных и барических зависимостей теплофизических и термодинамических свойств металлов может помочь оптимизировать их производство и расширить применение.

Лазерная абляция является известным методом синтеза для создания металлических наночастиц, и понимание фундаментальных процессов, возникающих при воздействии импульса на металл, может привести к разработке более эффективных и экономичных методов синтеза.

В целом, это исследование имеет большое значение для разработки новых материалов и технологий с потенциальными приложениями в таких областях, как медицина, электроника и материаловедение.

Достоверность результатов следует из корректности постановки задачи, использования общеизвестной модели молекулярной динамики, двухтемпературной модели, которые опубликованы ранее другими авторами, а также применения апробированных потенциалов взаимодействия частиц для меди и золота. Достоверность результатов подтверждается согласованием с экспериментальными данными и данными работ других авторов.

Материалы диссертации полно представлены в работах, опубликованных соискателем.

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в следующих рецензируемых научных журналах:

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) [12]
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) [8]
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) [6]
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) [10]
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. Алексахкина, М. М. Демин, Молекулярно-динамическое моделирование термического гистерезиса золота. Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, №81, 2021. (ВАК)
10. Алексахкина 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. Алексахкина Определение теплофизических свойств золота в области фазового перехода плавление-кристаллизация. Молекулярно-динамический подход. Математическое моделирование 34, №1, 2022 (Scopus, Q3) [1].
12. В.И. Мажукин, О.Н. Королева, М.М. Демин, А.В. Шапранов, А.А. Алексахкина Атомистическое моделирование сосуществования фазовых состояний жидкость-пар для золота и определение критических параметров. Математическое моделирование, 34, №3, 2022. (Scopus, Q3)
13. В. И. Мажукин, О. Н. Королева, М. М. Демин, А. А. Алексахкина Неравновесные характеристики теплообмена меди в широком температурном диапазоне. Математическое моделирование, 34, №10, 2022. (Scopus, Q3)
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. V. I. Mazhukin, O.N. Koroleva, M. M. Demin, A. A. Aleksashkina Nonequilibrium Characteristics of Heat Transfer of Copper in a Wide Temperature Range, Mathematical Models and Computer Simulations, 2023. (Scopus, Q3)
17. А. А. Алексахкина, В. И. Мажукин Молекулярно-динамическое исследование основных механизмов абляции золота ультракоротким лазерным воздействием. Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, №36, 2024 (ВАК)

Личный вклад соискателя заключается в том, что все численные исследования, результаты которых изложены в диссертационной работе, проведены лично автором в процессе его научной деятельности. Материалы из совместных публикаций, использованные в работе, содержат оригинальные результаты автора. Автором были проведены все молекулярно-динамические расчеты, а также расчеты с применением комбинированной континуально-атомистической модели и выполнена интерпретация полученных данных.

Диссертация «Молекулярно-динамическое моделирование свойств металлов и механизмов импульсной лазерной абляции золота» Алексахкиной Анны Андреевны рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Заключение принято на заседании научного семинара 15-го и 16-го отделов ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Присутствовало на заседании 22 чел.

Выступили с положительной оценкой диссертации: Тишкин В.Ф., Кулешов А.А.

Результаты голосования: "за" - 22 чел., "против" - 0 чел., "воздержалось" - 0 чел., протокол N 9 от "7" декабря 2023 г.


Тишкин Владимир Федорович
член-корр. РАН, д.ф.-м.н., зав. отд. №15


Кулешов Андрей Александрович
д.ф.-м.н., г.н.с. отд. №15