

## ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертационную работу Мигдала Кирилла Петровича

«Термодинамические и кинетические свойства металлов с возбуждённой электронной подсистемой» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника

Диссертационная работа Мигдала К.П. посвящена задаче определения свойств электронной подсистемы металла, возбужденной ультракоротким лазерным импульсом умеренной интенсивности, важных с точки зрения предсказания дальнейшей эволюции приповерхностного слоя, включая абляцию и образование кратера глубиной десятки нанометров.

Диссертационная работа Мигдала К.П. содержит 238 страниц текста, 60 рисунков, 2 таблицы и состоит из введения, списка использованных сокращений, пяти глав, заключения, списка публикаций автора и списка литературы, содержащего 253 наименования.

Во **введении** автором дается общая постановка задачи и описываются диапазоны параметров рассматриваемого физического явления. Дается обоснование актуальности, научной новизны и практической значимости поставленной задачи, формулируются цели исследования, приведено обсуждение достоверности и обоснованности использованных в работе методов, указаны основные результаты работы.

В **первой главе** дан обзор основных результатов работ по изучению процессов, происходящих при умеренном субпикосекундном лазерном воздействии на металлическую мишень. Обзор состоит из разделов, посвященных четырем основным методам, применяемых в таких исследованиях. В разделе 1.1 приведено описание экспериментальных работ, структурированное по степени значимости результатов опытов, указана роль, которую играют эксперименты для обоснования теоретических положений, проверки результатов и построения моделей в диссертационной работе. В разделе 1.2 обсуждаются численные модели эволюции вещества на поверхности облучаемой ультракоротким лазерным импульсом мишени, делается сопоставление их условий применимости и достоверности получаемых результатов. В разделе 1.3 описываются методы расчётов электронных транспортных свойств, обсуждаются результаты наиболее значимых работ для каждого из перечисленных в этом разделе методов. В разделе 1.4 дано обсуждение принципиальных элементов метода функционала плотности, описываются ключевые моменты расчётов, проводимых автором данным методом.

Во **второй главе** дано обсуждение предложенной в работе аналитической модели описания плотности электронных состояний, приведены соотношения, с помощью которых модель может быть использована для расчёта электронных термодинамических характеристик (раздел 2.1), показано согласие результатов модели с расчётами,



выполненными с помощью апробированных вычислительных кодов VASP и Elk, в которых реализован метод функционала плотности (раздел 2.2). В разделе 2.3 отдельно рассмотрен метод расчёта электронного теплового давления для металлов со сложной электронной структурой на примере тантала.

**Третья глава** посвящена разработке уравнений состояния для термодинамических условий, соответствующих субпикосекундному лазерному нагреву, когда происходит нагрев электронов и ионов до десятков тысяч градусов Кельвина, и возникают тепловые вклады в давления с амплитудами в несколько десятков ГПа. В разделе 3.1 рассмотрено влияние гидростатических изменений объёма на плотность электронных состояний. В разделе 3.2 приведены результаты расчётов методом функционала плотности кривых холодного сжатия металлов. Влияние совокупного действия гидростатического сжатия и нагрева электронов на термодинамические характеристики и обсуждение применимости трехчленного уравнения состояния вещества приведены в разделе 3.3. Сопоставление результатов диссертационной работы с данными опубликованных исследований приведено в разделе 3.4.

В **четвёртой главе** дается рассмотрение методов и результатов расчёта электронных транспортных свойств. В разделе 4.1 обсуждаются основные предположения и модели, применяемых автором, и даны условия их применимости. В разделе 4.2 представлена схема расчёта электронного вклада в теплопроводность металлов с нагретыми электронами. В разделах 4.3 и 4.4 акценты сделаны на используемые подходы по учёту экранирования электрон-ионного и электрон-электронного взаимодействия, а также термоэлектрических вкладов в теплопроводность. Результаты расчёта электронной теплопроводности ряда металлов, включая благородные и переходные, приведены в разделе 4.5, где также проведено сравнение с данными расчётов, выполненных независимо другими исследователями «из первых принципов». Методика расчёта темпа электрон-фононного теплообмена, результаты для неё и сравнение с опубликованными экспериментальными и расчётными данными описаны в разделе 4.6.

**Пятая глава** содержит описание двух моделей, состоящих из полного набора термодинамических и кинетических характеристик, использованных для двухтемпературного гидродинамического моделирования стадии остывания электронной подсистемы. В разделе 5.1 рассмотрена задача о достаточно толстой по сравнению с характерными масштабами задачи никелевой мишени. Приведены данные модели, построенной автором, а также результаты для совокупности используемых в ряде современных работ выражений. Сделано сравнение полученных двумя путями результатов для длительности остывания электронной подсистемы и времени выхода ударной волны на заднюю поверхность мишени. Сравнением с результатом эксперимента и независимого молекулярно-динамического моделирования показана важность принимаемых во внимание автором эффектов, игнорируемых в соотношениях, взятых из неоднократно использованных в литературе источников. В разделе 5.2 схожее с предыдущим исследование проведено для тонкой медной фольги толщиной менее 100 нм, что существенно меняет задачу о распространении тепла, приводя к более медленной релаксации. Сравнение моделей, предложенной автором и составленной на основе взятых из высокоцитируемых работ соотношений показало, что более близкое соответствие



эксперименту по темпу остывания электронов в фольге происходит при использовании предлагаемой автором модели.

В **заключении** сформулированы основные научные результаты диссертационной работы, находящиеся в соответствии с научными положениями. Также приведён список работ автора.

#### **Замечания.**

1) Основным и единственно серьезным замечанием является явно недостаточное сопоставление теоретических исследований автора с экспериментом. Отчасти это объясняется отсутствием надежных экспериментальных данных в этой области. Однако, даже в тех случаях, где такие данные имеются, сравнение произведено далеко не должным образом. Например, на Рис. 4.23 дается сравнение различных теоретических кривых с результатами эксперимента Цуя и др. При этом масштаб по горизонтальной оси выбран таким образом, что все экспериментальные точки легли друг на друга и, фактически, превратились в единственную точку. Разумеется, о каком-либо сравнении поведения *кривых* с экспериментом в этом случае говорить не приходится.

2) Следует отметить также некоторую небрежность, допущенную в оформлении графиков и в тексте диссертации. В качестве типичного примера возьмем Рис. 3.7. На нем приведены три графика, два из которых в переменных плотность-давление, а третий в переменных объем-давление, что затрудняет их сравнение. Далее, на левом графике того же Рис. 3.7 приведены три монохромных линии – штриховая, штрихпунктирная и сплошная, которые настолько близки друг к другу, что различить их, практически, невозможно. Не представляло труда дать каждую из этих линий своим цветом, что сразу визуальное отделило бы их друг от друга.

В подписи к тому же Рис. 3.7 сказано «Давление в железе в диапазоне от *атомного объёма до мегабарного сжатия...*» Звучит примерно, как «от забора до полуночи». Разумеется, у меня не вызывает сомнения, что диссертант знает о невозможности сравнения физических величин, имеющих разные размерности, и физический смысл того, что он хочет сказать этой фразой совершенно ясен, но такого рода огрехи (а они встречаются довольно часто) создают неприятное впечатление.

Тем не менее, указанные недостатки не снижают высокого научного уровня работы, которая, безусловно, не только соответствует уровню, предъявляемому к кандидатским диссертациям, но намного превышает его.

**Актуальность темы диссертации.** Рассматриваемая в диссертационной работе Мигдала К.П. задача о поведении электронной подсистемы в условиях нагрева ультракоротким лазерным импульсом умеренной интенсивности представляет интерес как для фундаментальной науки, так и для практических применений. В результате совокупности процессов, следующих за релаксацией, вложенной в электронную подсистему электронах энергии лазерного импульса, при соблюдении некоторых условий происходит откол приповерхностного слоя, образование наночастиц и формирование поверхностных наноструктур. Эти процессы представляют интерес для задач наноплазмоники и нанофотоники, медицинской физики и сверхплотной записи



информации. Указанные направления являются одними из наиболее быстро развивающимися в течение последних десяти лет. Также здесь стоит отметить, что состояние вещества в возникающих условиях характеризуется сильной неидеальностью электронного газа металлов, что делает невозможным применение известных моделей Саха, Томаса-Ферми и других, где используется разложение энергии системы по малому параметру. Как следствие, рассматриваемая задача не имела адекватного решения в рамках имеющихся подходов, что означает необходимость поиска новых методов для изучения электронной термодинамики и переноса тепловой энергии.

**Научная новизна** диссертационной работы Мигдала К.П. обусловлена следующими впервые полученными результатами:

1) Аналитическая модель плотности электронных состояний металлов с различным числом зон вблизи энергии Ферми, учитывающая изменения, вызванные лазерным нагревом и пригодная для проведения оценок термодинамических потенциалов электронного газа и расчётов эффективных частот электронных столкновений в приближении времени релаксации;

2) Выявление роли электронов из разных энергетических зон в исследуемых свойствах электронной подсистемы с помощью, указанной в п.1 модели, а также методом функционала плотности;

3) Выделение вклада в термодинамические величины электронной подсистемы металла и характеристики электронного транспорта, обусловленного изменением электронной структуры металла при его лазерном нагреве.

**Теоретическая значимость** работы заключается в показанной возможности учета вклада нагретых электронов в уравнение состояния, как с помощью численных расчётов, так и с помощью предложенной аналитической модели плотности электронных состояний. Также стоит отметить предложенную схему расчёта электронной теплопроводности, учитывающей вклады разных типов электронных столкновений без привлечения полуэмпирических предположений.

**Практическая значимость** определяется возможностью использования представленных в диссертационной работе результатов для двухтемпературного моделирования субпикосекундной лазерной абляции, что может быть использовано для решения ряда прикладных задач в следующих организациях: ИПМ им. М.В. Келдыша, ИПХФ РАН, ИФТТ РАН, ИАП РАН, РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ им. академика Е.И. Забабахина, Университете ИТМО, МГУ им. М. В. Ломоносова и др.

Автореферат полностью и правильно отражает содержание диссертации. Название диссертации отражает суть работы. Содержание диссертации соответствует специальности 01.04.14– теплофизика и теоретическая теплотехника.

**Апробация** работы проведена с помощью докладов, представленных на 6 российских и 12 международных конференциях, начиная с 2012 года. **Список публикаций** Мигдала К.П. по теме диссертации содержит 14 работ в рецензируемых изданиях, включенных в перечень ВАК, 7 из которых опубликованы в журналах, входящих в международную базу цитирования Web of Science.



**Личный вклад** Мигдала К.П. в диссертационной работе определяется тем, что содержание диссертации, представленные результаты расчётов, выводы и положения, выносимые на защиту, сформулированы автором лично.

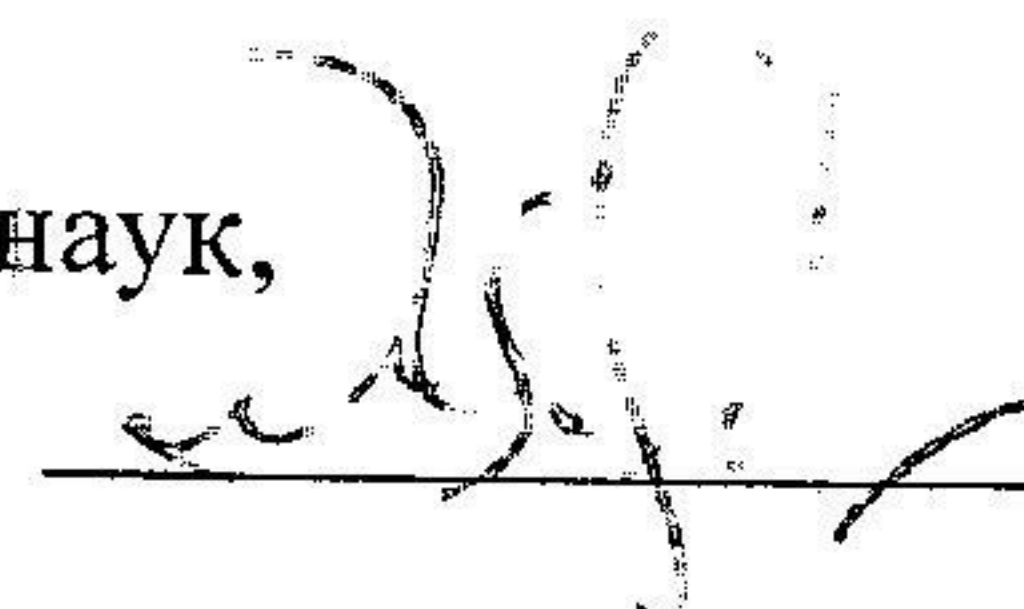
Резюмируя все сказанное ранее, следует отметить, что диссертация Мигдала К.П. является важным вкладом в описание воздействия коротких и ультракоротких лазерных импульсов на вещество. Не вызывает сомнения, что разработанные им методы и подходы будут активно использоваться в последующих исследованиях этих явлений, а сама диссертация не ляжет на полку мертвым грузом, а станет важным и полезным пособием для многих исследователей этой актуальной области физики лазерного взаимодействия.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертация «Термодинамические и кинетические свойства металлов с возбуждённой электронной подсистемой» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., а ее автор Мигдал Кирилл Петрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

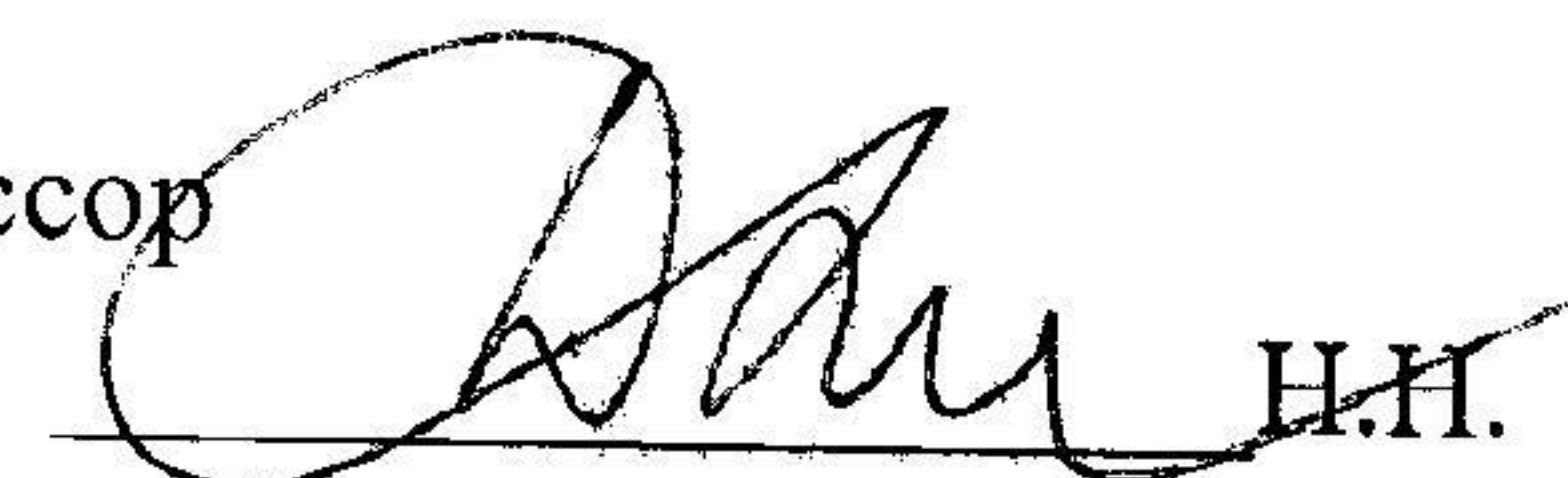
Доклад по материалам диссертационной работы был заслушан и обсужден на научном семинаре Кафедры физики полимеров и кристаллов Отделения физики твердого тела Физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова», что зафиксировано в протоколе № 2/01-18 от 26 января 2018 г.

Отзыв составил ведущий научный сотрудник Физического факультета, Отделения физики твердого тела, Кафедры физики полимеров и кристаллов ФГБОУВО «МГУ имени М.В. Ломоносова», д.ф.-м.н., профессор Трибельский Михаил Исаакович (119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, тел. (495)939-5156, e-mail: tribelsky@polly.phys.msu.ru).

Профессор, доктор физико-математических наук,  
ведущий научный сотрудник

 М.И. Трибельский

Подпись М.И. Трибельского удостоверяю.  
Декан Физического факультета МГУ,  
доктор физико-математических наук, профессор

 Н.Н. Сысоев

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова». 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2,  
Тел.: (495)939-10-00  
<http://www.msu.ru>  
e-mail: [info@rector.msu.ru](mailto:info@rector.msu.ru)