

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета Д 002.110.02 на базе
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2)
от 21 марта 2018 г. (протокол № 2)

Защита диссертации **Мигдала Кирилла Петровича**
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
**«Термодинамические и кинетические свойства металлов с возбуждённой
электронной подсистемой»**

Специальность 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника

г. Москва

2018 год

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета Д 002.110.02 на базе
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2)
Протокол № 2 от 21марта 2018 г.

Диссертационный совет Д 002.110.02 утвержден Приказом Министерства образования и науки РФ от 11.04.2012 г. № 105/нк в составе 31 человека. На заседании присутствуют 23 человек, из них 11 докторов наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы и 12 докторов наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Дополнительно введены на разовую защиту 0 человек. Кворум имеется.

Председатель – зам.председателя диссертационного совета
Д002.110.02 д.ф.-м.н., профессор Андреев Н.Е.

Ученый секретарь – ВРИО ученого секретаря диссертационного совета
Д002.110.02 д.ф.-м.н. Василяк Л.М.

1	Фортов В.Е.	Академик, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует
2	Канель Г.И.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
3	Андреев Н.Е.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
4	Василяк Л.М.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
5	Васильев М.М.	К.ф.-м.н.	01.04.08	Присутствует
6	Агранат М.Б.	Д.ф.-м.н., с.н.с.	01.04.14	Присутствует
7	Амиров Р.Х.	Д.ф.-м.н., с.н.с.	01.04.08	Присутствует
8	Баженова Т.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
4	Вараксин А.Ю.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
9	Васильев М.М.	К.ф.-м.н.	01.04.08	Отсутствует
10	Васильев М.Н.	Д.т.н., профессор	01.04.14	Присутствует
11	Воробьев В.С.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
12	Голуб В.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
13	Гордон Е.Б.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует
14	Грязнов В.К.	Д.ф.-м.н.	01.04.14	Присутствует
15	Дьячков Л.Г.	Д.ф.-м.н.	01.04.08	Присутствует
16	Зейгарник Ю.А.	Д.т.н., с.н.с.	01.04.14	Присутствует
17	Еремин А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
18	Иванов М.Ф.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Отсутствует
19	Иосилевский И.Л.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
20	Кириллин А.В.	Д.ф.-м.н.	01.04.14	Присутствует
21	Лагарьков А.Н.	Академик, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует
22	Ломоносов И.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
23	Медин С.А.	Д.т.н., профессор	01.04.14	Отсутствует
24	Норман Г.Э.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует
25	Петров О.Ф.	Академик, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
26	Полежаев Ю.В.	Чл.-корр. РАН, д.т.н., профессор	01.04.14	Отсутствует
27	Савватимский А.И.	Д.т.н.	01.04.14	Присутствует
28	Сон Э.Е.	Академик, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
29	Старостин А.Н.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
30	Храпак А.Г.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
31	Якубов И.Т.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует

ПОВЕСТКА ДНЯ

На повестке дня защита диссертации старшего научного сотрудника Отдела компьютерного материаловедения Центра фундаментальных и прикладных исследований Федерального государственного унитарного предприятия Всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Н.Л. Духова Государственной корпорации «Росатом» (ФГУП "ВНИИА им. Н.Л. Духова") **Мигдала Кирилла Петровича** на тему «Термодинамические и кинетические свойства металлов с возбуждённой электронной подсистемой». Диссертация впервые представлена на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Диссертация выполнена в отделе компьютерного материаловедения Центра фундаментальных и прикладных исследований Федерального государственного унитарного предприятия Всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Н.Л. Духова Государственной корпорации «Росатом» (127055, г. Москва, ул. Суцневская, д. 22, www.vniia.ru).

Научный руководитель:

Научный руководитель – доктор физико-математических наук Иногамов Наиль Алимович, ведущий научный сотрудник сектора плазмы и лазеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук, г. Черноголовка.

Официальные оппоненты:

Трибельский Михаил Исаакович, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник Физического факультета, Отделения физики твердого тела, Кафедры физики полимеров и кристаллов Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова» (119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, тел.: (495)939-1000, msu.ru, e-mail: info@rector.msu.ru);

Канавин Андрей Павлович, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Сектора теории взаимодействия излучения с веществом Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (г. Москва Ленинский пр-т. 53, корп. 1 к. 758, тел.: (499) 132-4262, lebedev.ru, e-mail: postmaster@lebedev.ru)

Ведущая организация:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики»(пр-кт Кронверкский, 49, Санкт-Петербург, 197101, тел.: (812) 232-9704, ifmo.ru, e-mail: vasilev@mail.ifmo.ru).

На заседании присутствуют официальные оппоненты д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник Трибельский М.И. и к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник Канавин А.П., научный руководитель Мигдала К.П.д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник Иногамов Н.А.

СТЕНОГРАММА

Председатель: Мы должны принять к сведению заявление Михаила Михайловича Васильева, который просил временно освободить его от работы в диссертационном совете по личным обстоятельствам и на четыре месяца приблизительно Леонид Михайлович будет у нас исполнять обязанности секретаря. Если нет никаких принципиальных возражений, давайте перейдём к делу. Тема нашей повестки – это защита диссертации Кирилла Петровича Мигдала, и Леонид Михайлович, наверное, ознакомит с имеющимися в связи этим документами.

Ученый секретарь: В совет поступило заявление от Мигдала Кирилла Петровича о принятии к защите диссертации на соискание кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – «Теплофизика и теоретическая теплотехника» на тему «Термодинамические и кинетические коэффициенты металлов с возбуждённой электронной подсистемой». Весь пакет необходимых документов в деле имеется. Кирилл Петрович закончил МИФИ в 2011 году. Работает во ВНИИ автоматики имени Н.Л. Духова. Если есть вопросы, касающиеся личных данных, можно уточнить.

Председатель: Есть вопросы? Если нет, то мы можем начать. Кирилл Петрович, пожалуйста, у вас 20 минут по регламенту.

К.П. Мигдал: Понял, спасибо. Здравствуйте, уважаемые члены комиссии, здравствуйте, уважаемый председатель, я хочу рассказать о своей работе, которая называется «Термодинамические и кинетические свойства металлов с возбуждённой электронной подсистемой». Моя работа выполнена под руководством моего научного руководителя – Наиля Алимовича Иногамова из Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау в Черногловке.

Актуальность моей работы состоит в том, что в последнее время возросло число работ, посвященных практическому применению фемтосекундной лазерной абляции. Среди таких работ я хочу отметить проведенные в нашей стране. Это работы Сергея Игоревича Ашиткова из ОИВТ РАН, Александра Кучмижака из Дальневосточного государственного университета и Сергея Кудряшова из Физического института Российской академии наук. При этом, когда проводятся такие исследования, необходимо принимать во внимание при фемтосекундном облучении двухтемпературной стадии. Для её описания тогда, когда началась моя работа, использовались достаточно простые модели, в которых использовались допущения, достоверность которых вызывала вопросы. Поэтому целью моей работы была, во-первых, была разработка аналитической модели электронной термодинамики и кинетики для металла с возбужденной электронной подсистемой. Во-вторых, обеспечение данными для зависимостей электронных термодинамических и кинетических величин в тех состояниях, которые воспроизводятся методом двухтемпературной гидродинамики. И, наконец, вывод о том, какие из обнаруженных эффектов оказывают влияние на дальнейшую динамику процессов в мишени, облученную фемтосекундным лазерным импульсом.

Итак, несколько слов о том процессе, изучению которого посвящена моя работа. Как видно на изображенной $x-t$ -диаграмме, двухтемпературная стадия занимает сравнительно небольшой её участок. Это красный стержень, изображенный в левом нижнем углу. Двухтемпературная стадия длится порядка одной-десяти пикосекунд, и формируется слой прогрева, который в зависимости от металла, который меняет свою глубину от нескольких десятков до сотни нанометров. После того, как двухтемпературная стадия заканчивается, начинается гидродинамическая разгрузка мишени, возникновение ударных волн и волны разрежения, после которых в минимуме волны разрежения происходит откол поверхностного слоя с той стороны мишени, с которой она была облучена. При этом, в течение двухтемпературной стадии возникают достаточно высокие электронные температуры, в зависимости от того, какие вложены энергии, и возникают

достаточно высокие давления в основном за счёт нагрева электронов, которые могут достигать сотни ГПа. В этой работе я буду говорить о простых, благородных и переходных металлах.

Для исследования процессов, происходящих в мишени, используется модель двухтемпературной гидродинамики, предложенная в 1974 году Сергеем Ивановичем Анисимовым, а также его соавторами Б.Л. Капелиовичем и Т.Л. Перельманом. Здесь вы видите основные уравнения этой модели, два из которых описывают перенос энергии в электронной и ионной подсистемах. Мы видим, что некоторые из величин, входящих в уравнения, выделены красным. Эти величины заранее мы не знаем, и нам нужно их определить. Эти величины являются темой моей работы. Величины, показанные синим, относятся свойствам ионной подсистемы при ее нагреве, и в данной работе они обсуждаться не будут.

Перейду к обсуждению построения аналитической модели для изучения электронных термодинамических и кинетических свойств. Для того, чтобы правильно рассмотреть свойства электронной структуры, я использовал метод функционала плотности, основные уравнения которого – это уравнения Кона-Шэма, а также запись для потенциала взаимодействия электрона с учетом хартриевского члена, а также обменно-корреляционного приведены здесь. Вверху показаны распределения электронной плотности в меди. В левом углу – в решётки, а в правом углу – срез вдоль направления вектора $[001]$. При этом мы принимали во внимание тот факт, что с нагревом с точки зрения электронной плотности, а значит, и плотности электронных состояний, свойства металлов будут меняться.

Суть вводимой двухпараболической модели состоит в том, что мы рассматриваем каждую из электронных валентных зон с помощью закона дисперсии, подобного закону для свободных электронов, принимая во внимание ширину зоны и ее характерную высоту с помощью эффективной массы и с помощью начальной энергии, в общем случае, а также верхней энергии в случае зон конечной ширины, таких как d-зона. Общая картина представлена на рисунке справа, где мы видим плотность электронных состояний в золоте. Здесь красным показана плотность состояний для s-электронов, а синим – для d-электронов. Полная плотность состояния показана внизу слайда. Она может быть разделена на вклады отдельных электронных зон, и, соответственно, мы можем определить вклады в термодинамические характеристики отдельных зон, выполняя вычисление электронных термодинамических потенциалов.

На этом графике приведены результаты расчётов для тантала. На левом из них приведены результаты расчётов для электронного теплового давления в зависимости от электронной температуры в сравнении с данными расчётов методом функционала плотности. Мы видим, что здесь имеется достаточно удовлетворительное согласие между моделью и первопринципными расчётом. На правой картинке показано, как меняется электронная теплоемкость. Здесь стоит отметить, что в тантале оказывает влияние на электронную теплоемкость при высоких температурах заполненная полувалентная $4f_{14}$ зона. Ее можно учесть в первопринципных расчётах только полноэлектронными методами, как например, в коде Elk, для которого показан результат на правом рисунке. Мы видим, что при температурах выше 30000 К теплоемкость начинает заметно расти по сравнению с расчётом, где только s- и d-зоны вблизи энергии Ферми принимались во внимание. В нашей модели также $4f$ зона также воспроизводилась путем добавления f-параболы с учетом заполнения этой зоны. Кроме того, с помощью в данном случае уже 4-параболической модели, которая учитывала также tg-еграсщепление d-зоны по магнитному квантовому числу, мы смогли оценить то, насколько разные электронные зоны вносят вклад в общую электронную теплоемкость. И мы видим, что при росте температуры до 50000 вклад f-зоны становится таким же, как вклад s-электронов, который доминирует на большей части диапазона температур.

Перейдем к описанию кинетических свойств в модели. Описание строилось на использовании кинетического уравнения Больцмана, которое записывалось в приближении времени релаксации. Формулировка дисперсионных законов для электронов без зависимости волнового вектора от направления позволяла нам использовать данное приближение, как и то, что характерная толщина значительно больше, чем длина пробега электрона. Итак, решение для электрон-электронного вклада в теплопроводность изображена в верхней части слайда. Мы принимали во внимание не только основной вклад, но и термоэлектрические эффекты, отраженные во втором слагаемом в скобке. Для описания столкновений электронов с ионами использовалась интерпретация экспериментов для удельного электросопротивления в модели Друде, где для выражения парциальных вкладов в теплопроводности мы использовали наши данные для парциальной электронной теплоёмкости C_{si} среднего квадрата скорости s -электронов. Наконец, полная теплопроводность определялась по правилу Матиссена, при этом переносчиками тепла рассматривались только s -электроны, поскольку вклад d -электронов оказался ничтожно мал во всех рассмотренных случаях.

Результаты расчётов электронной для теплопроводности с первопринципными расчётами методом Кубо-Гринвуда. Здесь приведены результаты сравнения для алюминия и золота. На рисунке для алюминия мы привели результаты сравнения с работой Вичека, где рассматривались однотемпературная теплопроводность до 10000 К при различных плотностях. Мы видим, что хотя наклон наших кривых немного отличается от того, что предсказывается в расчётах методом Кубо-Гринвуда, тем не менее наши данные качественно сходятся с этим расчётом. На правом рисунке приведено сравнение результатов расчётов, проведённого в группе Генри Эдгаровича Нормана Петром Жилиевым. Мы видим, что при высоких электронных температурах, когда вклады электрон-электронных столкновений доминируют по сравнению с электрон-ионным, результаты наших работ находятся в согласии.

Наконец, в двухпараболической модели были проведены расчёты темпа переноса энергии от электронов к ионам. Этот процесс обеспечивает выравнивание температур двух подсистем. Здесь записаны вверху основные уравнения модели Каганова-Лифшица-Танатарова, которую мы модифицировали таким образом, что вместо модели идеального Ферми-газа использовали дисперсионный закон согласно нашей двухпараболической модели. На рисунке внизу показаны результаты для 6 металлов. Здесь видно, что основная группа металлов, среди которых простой металл алюминий и благородные медь и золото имеют достаточно электрон-фононный теплообмен, особенно при низких электронных температурах, в то время, как переходные металлы железо и никель имеют достаточно высокий темп переноса энергии к ионной подсистеме за счёт d -зоны. Т.е. этот эффект обусловлен именно незаполненной d -зоной. В золоте было показано, что вклад d -электронов начинает при высоких температурах играть основную роль, но вблизи нуля температур электрон-фононный теплообмен обусловлен s -электронами. Наконец, также для золота, было проведено сравнение с различными моделями и экспериментом, имеющимся для низких температур. При анализе наших результатов мы учли роль электронной экранировки в электрон-ионном взаимодействии. Было показано, что согласие с экспериментом по величине электрон-фононного теплообмена достигается тогда, когда мы принимаем во внимание обменно-корреляционное взаимодействие. В то же время, использование более грубого приближения случайных фаз приводит к двукратному завышению электрон-фононного теплообмена по сравнению с экспериментом. Результаты достаточно известной модели Аллена-Даунера, примененной в работе Жигилея, согласуются с данными, где мы используем приближение случайных фаз. Более точные наши расчёты показывают, что коэффициент электрон-фононного теплообмена в золоте должен быть ниже во всем рассматриваемом диапазоне.

Перейду к второй основной части своей работы. Это расчёт двухтемпературных уравнений состояния методом функционала плотности. В расчёте мы использовали так называемое трехчленное разложение для энергии металла. Мы рассматривали энергию и давление как сумму вкладов холодного сжатия-растяжения, вклада со стороны однотемпературного нагрева, который учитывается широкодиапазонные уравнениях состояния, которые разрабатываются, в том числе и здесь, в ОИВТ. И, наконец, добавок со стороны нагретых электронов, которого вычитается вклад электронов с температурой для однотемпературного вклада.

Применимость данного подхода является предметом обсуждения в данной работе. Для того, чтобы быть уверенным в таком подходе, мы рассмотрели, с одной стороны, влияние электронного нагрева на ионные свойства, в данном случае, на продольную скорость звука в золоте и показали, что при различных степенях сжатия, которые возникают при гидродинамической разгрузке в мишенях после фемтосекундной абляции, скорость звука при нагреве электронов начинает меняться, начиная с 30000 К. То есть, это означает, что независимость вклада ионной подсистемы от электронного нагрева следует ограничить в золоте указанной температурой. Во-вторых, мы изучили влияние на плотность электронных состояний сначала при плавлении. Показали, что этот вклад пренебрежимо мал. Как показано на правом рисунке, где показаны результаты для холодной меди приведены черной линией, а расплава – в нашей работе – зеленой линией. Результаты, проведенные исследователями из Ливерморской национальной лаборатории, приведены синей и красной линиями. Мы видим, что все плотности электронных состояний согласуются между собой. Если же мы приведём дополнительно к нагреву ионов до 2000 К ещё и нагрев электронов до 55000 К, то тогда плотность электронных состояний, как показано на правом рисунке оранжевой линией уже будет отличаться от той, что была получена для меди с холодными ионами с нагретыми до 55000 К электронами.

Результаты расчётов той части двухтемпературного уравнения состояния, которая состоит из холодного вклада и нагрева электрона показан на данном слайде. Здесь показаны результаты для меди, железа и тантала. Для железа также был принят во внимание тот факт, что имеется при 10 ГПа и нулевой температуре полиморфный ОЦК-ГПУ переход. Мы показали, что при сохранении объёма за счёт изменения вклада электронов этот переход будет смещаться в сторону низких давлений. При 7500 К уже ГПУ фаза будет более стабильной.

Наконец, расчёты, проведённые для холодного сжатия и одноосного сжатия в металлах были использованы Василием Викторовичем Жаховским при построении межатомного взаимодействия методом погруженного атома при моделировании методом классической молекулярной динамики. С помощью его была проведена проверка этого потенциала для ударной адиабаты тантала. В качестве экспериментов изображены знаменитые результаты Крупникова, Трунина и Неллиса, и мы видим, что результат, полученный с помощью потенциала, находится в хорошем согласии с этими экспериментами.

Наконец, перейду к прямому сравнению результатов, полученных при помощи двухтемпературного гидродинамического моделирования согласно тем моделям, которые я разработал. Само моделирование проводил мой коллега Денис Ильницкий. Мы рассматривали два эксперимента. Первой из них был проведён для толстой фольги из никеля. При моделировании мы рассматривали нашу модель, а также популярную модель Иванова-Жигилея 2003 года, где зависимости электронной теплоемкости от температуры берется линейной, коэффициент электрон-фононного теплообмена берётся по модифицированной формуле Аллена в общем случае, и теплопроводность электронов берётся по закону «5/4». В эксперименте измерялось время выхода ударной волны на заднюю поверхность. При этом, при сравнении результатов двух моделей мы выяснили, что при одной и той же вложенной энергии максимальный нагрев в нашей модели, и в модели Иванова-Жигилея отличается в два раза. Если же говорить о сравнении с экспериментом на правом рисунке, то наша модель находится в

хорошем согласии с экспериментом и результатом моделирования, проведенного классической молекулярной динамикой Василием Викторовичем. В случае же модели Иванова-Жигилея есть задержка относительно эксперимента на 6 пикосекунд. Если мы будем рассматривать фольгу толщиной 300 нм или менее, то такая ошибка в определении времени выхода ударной волны на заднюю поверхность может привести к тому, что мы не сможем различить выход упругого предвестника и пластической ударной волны, поскольку разница между ними будет не более 6 пикосекунд.

Второй эксперимент был проведен для тонкой медной пленки. Здесь проводилось рентгеновское просвечивание, что позволяло определить температуру по всему прогретому слою тонкой фольги. Поэтому такая интегральная температура была вычислена с учётом массового коэффициента поглощения согласно формуле в правой части этого слайда. Мы по-прежнему проводили сравнение результатов нашей модели с моделью Иванова-Жигилея. В данном случае, мы видим, что в случае использования модели Иванова-Жигилея температуры электронов спадают медленнее, чем на эксперименте, в то время, как наша модель, показанная красными ромбами, более близко описывает экспериментальные данные. Нужно отметить, что основным успех нашей модели определялся тем, что мы предсказали более высокую величину коэффициента электрон-фононного теплообмена, чем в модели Иванова-Жигилея, что обусловило более быстрый темп электрон-ионной релаксации.

Итак, к основным результатам данной работы относятся: полученная двухпараболическая модель электронных термодинамических и кинетических характеристик; введение в данной модели эффективной массы электроны, которая позволяет применять кинетическое уравнение Больцмана для изучения процессов электрон-электронных и электрон-ионных столкновений; получение базы данных для проведения двухтемпературных гидродинамических расчётов для семи металлов; расчёт вкладов холодного сжатия и электронного нагрева в двухтемпературные уравнения состояния и вывод о пригодности разработанной модели для проведения двухтемпературных гидродинамических расчётов.

На защиту выносятся следующие положения. Это сама двухпараболическая модель для расчёта электронных термодинамических и кинетических свойств металлов. Также изменение электронной плотности состояний при нагреве электронной подсистемы. В-третьих, расширения двухпараболической модели на случаи металлов со сложной электронной структурой, таких как тантал с tg -еграссцеплением, приводящим к появлению двух частей d -зоны с разными магнитными квантовыми числами, а также с наличием полувалентных электронных зон. Наконец, трехчленная модель уравнения состояния металла с горячими электронами при вложениях лазерной энергии вблизи порога лазерной абляции.

Спасибо за внимание!

Н. Е. Андреев: Спасибо, Кирилл Петрович. У нас время для вопросов соискателю. Пожалуйста, Игорь Львович.

И.Л. Иосилевский: У меня вопрос к слайду, где давление для трех металлов показано. Это полное давление? Я вижу, что здесь для всех трех металлов есть обширные куски, где давление отрицательно. Как это понимать?

К.П. Мигдал: Во-первых, я должен сказать, что это не полное давление. Это только два вклада в трехчленное уравнение состояния, то есть здесь нет ионного теплового вклада, который мы берём, тогда, когда он нужен, из широкодиапазонных уравнений состояний.

И.Л. Иосилевский: А это электронный вклад?

К.П. Мигдал: Да.

И.Л. Иосилевский: Тогда прокомментируйте, почему электронный вклад оказывается отрицательным?

К.П. Мигдал: Электронный вклад не может быть отрицательным. Это вклад отрицательных давлений при холодном растяжении, который не компенсируется при низких электронных температурах, и сумма двух вкладов становится отрицательной.

Председатель: Еще вопросы, пожалуйста.

В.С. Воробьев: Осталось неясным, как ваша модель соотносится с ранее разработанными моделями Новикова-Никифорова и с массой ячеечных модель, где ещё важную роль играют граничные условия на границе ячейки. Как у вас происходит решение этой проблемы? То есть у вас есть ячейка или нет? Сколько электронов вы учитываете в том же тантале? Что это за электроны, все или только валентные?

К.П. Мигдал: Нет, как правило, не все.

В.С. Воробьев: Но вы об этом ничего не сказали.

К.П. Мигдал: Я действительно ничего об этом не сказал. Эта часть относится к описанию расчётов методом функционала плотности. Как правило, если мы не рассматриваем какие-то деформации решётки одноосные, мы рассматриваем элементарную ячейку. Для кубических решёток она имеет только один атом. Если мы рассматриваем простые, благородные металлы, мы рассматриваем только две зоны: s- и d-электронов, если же мы рассматриваем такие металлы, как тантал, то мы дополнительно рассматриваем заполненную 4f14 зону. Учёт производится путем полноэлектронного расчёта, то есть в этом случае значительная часть электронов рассматривается напрямую. При этом максимальное число электронов, рассматриваемых нами, достигает в танталe 19.

В.С. Воробьев: А релятивистские эффекты там рассматриваются?

К.П. Мигдал: Релятивистские эффекты тоже принимаются во внимание в рамках метода функционала плотности.

Председатель: Владимир Сергеевич, вы удовлетворены ответом, мы можем переходить к следующему вопросу?

В.С. Воробьев: Можем.

Председатель: К следующему переходите.

А.И. Савватимский: При меньших скоростях лазерного нагрева существенным становится тепловыделение по пятну нагрева. В ваших расчетах это не существенно, вы считаете, что у вас выделение в точке происходит?

К.П. Мигдал: Нет, выделение, конечно, не в точке происходит. Тепловыделение происходит в пятне шириной несколько десятков микрометров вдоль поверхности, а толщиной – не более сотни нанометров. Поэтому при рассмотрении двухтемпературной стадии задача действительно сводится к одномерной. То есть мы рассматриваем только поток тепла вглубь мишени. Тогда, когда происходит облучение не с помощью оптического импульса, а рентгеновского, то есть, пятно меньше, или когда рассматриваем более длинные временные масштабы, тогда нужно принимать во внимание распространение тепла вдоль поверхности мишени.

А.И. Савватимский: То есть можно сказать, что у вас считается равномерным распределение тепла по указанному вами пятну.

К.П. Мигдал: Да.

А.И. Савватимский: Спасибо.

Председатель: Дальше вопросы.

И. В. Ломоносов: Скажите, пожалуйста, вы при выборе потенциала взаимодействия при расчёте свойств металла привлекали еще какие-либо данные кроме главной адиабаты и изотермы. Ещё есть, могу пояснить, большой массив данных для пористого вещества. Там очень много данных и для меди, и для тантала. Там несколько другая область фазовой диаграммы, которая позволяет уже более надежно верифицировать потенциал.

К.П. Мигдал: Разработку таких потенциалов я вел совместно с Василием Викторовичем Жаховским. Поскольку в тех задачах, про которые я сейчас говорил, речь идет о сплошном металле, мы ограничивались только ударной адиабатой, а также кривыми изотермического сжатия. Короче говоря, теми данными по сжатию сплошного вещества, которые существуют.

Председатель: Ответ получен. Сейчас вопрос от Эдуарда Евгеньевича.

Э.Е. Сон: Скажите, пожалуйста, в вашем подходе эффективная масса электрона – как она определялась? И это одна и та же величина для расчётов термодинамических и кинетических свойств?

К.П. Мигдал: Сразу отвечу на второй вопрос. Эффективная масса, будучи один раз определённой, использовалась одинаковой и в термодинамических расчётах, и в кинетических. Она определялась с помощью плотности электронных состояний, посчитанной в методе функционала плотности. Если у нас возникали дополнительные вопросы, то мы проводили полноэлектронный расчёт, где она определялась по определению из дисперсионных кривых о зависимости одноэлектронной энергии от волнового вектора.

Э.Е. Сон: По величине это сколько, если отнести к массе электрона в вакууме?

К.П. Мигдал: Если говорить об s-электроне, то она почти всегда была близка к массе свободного электрона, кроме благородных металлов, у которых масса s-электрона была даже ниже, чем у свободного электрона, составляя от 0.6 до 0.8 массы электрона в вакууме. Если говорить об эффективной массе d-электрона, то она была значительно выше массы s-электрона и составляла от 3 до 7 масс электрона в вакууме.

Э.Е. Сон: Это и в зоне проводимости?

К.П. Мигдал: Да, да.

Э.Е. Сон: Но ведь транспортные свойства могли отличаться? Масса могла быть совсем другой. Вы могли бы решать в этом приближении не термодинамическую задачу, а кинетическую.

К.П. Мигдал: Я понимаю, но наша модель работала с таким упрощением, что s-электроны имеют постоянную эффективную массу на всей ширине этой зоны.

Председатель: Вот так. Виктор Константинович, пожалуйста.

В.К. Грязнов: Насчёт метода функционала плотности. У вас по крайней мере приведено два вида обменно-корреляционной энергии. Во-первых, что вы конкретно использовали? И второе – у вас приведены результаты по нескольким пакетам – какие пакеты когда вы использовали и какие результаты получены с помощью них?

К.П. Мигдал: В основном я использовал обменно-корреляционный функционал в параметризации Пердью-Бурке-Эрнзерхофа. Это один из видов обобщенно-градиентного приближения, кроме золота, для которого использовалось приближение локальной плотности, поскольку для него в нем более правильно предсказывается равновесный объём. Если же говорить о кодах, то в

основном использовался пакет VASP тогда, когда не возникало необходимости проводить расчёты для металлов с полувалентными зонами, такими как тантал. Тогда использовался пакет Elk, в котором реализован метод LAPW – линейризованныхприсоединенных плоских волн.

В. К. Грязнов: А ABINITу вас где использовался?

К.П. Мигдал: ABINITиспользовался в начале моей работы для ряда металлов. Можно вернуться к тому результату, который был здесь представлен для тантала. Он почти не отличается от результата, полученному в расчёте с помощью VASP. Как видно на правом рисунке, синяя линия – это расчёт электронной теплоёмкости с помощью VASP и фиолетовый – результат, полученный с помощью ABINIT. То есть, основное отличие между ними только в выборе псевдопотенциала, потому что в VASPсвоя проприетарная библиотека, а в ABINITэнтузиасты разрабатывают самостоятельно несколько видов псевдопотенциалов.

Председатель: Виктор Константинович, все нормально? Может быть кто-нибудь хочет ещё что-нибудь спросить? Тогда Наиль Алимович, мы хотим услышать несколько слов, только не о работе, а о соискателе.

Н.А. Иногамов: Кирилл Петрович работает с нами уже не первый день. Это вообще-то работа достаточно многолетняя. Мы с ним встретились летом 2011 года, то есть скоро уже будет 7 лет. Это большой труд, у него много публикаций. Я хочу сказать, что мне повезло с таким аспирантом, поскольку он очень самостоятельный, очень одаренный, все быстро понимает, схватывает, и главное, он не ленится изучать мануалы, потому что чтобы пользоваться с легкостью DFTкодами, а потом, он освоил также квантовую молекулярную динамику. Это все непросто. Свою молодую энергию он направил на это, и, по-моему, очень хорошо справился. Мы работаем вместе с вашим институтом, здесь тоже такие работы ведутся. А стране, пожалуй, таких работ и нет. А вот за рубежом это очень популярная тематика. В общем, я призываю проголосовать, поддержать, поскольку Кирилл – человек молодой, энергичный, талантливый, создает нужное нам подспорье в ближайшее время. Вот, пожалуй, и всё.

Председатель: Спасибо, Наиль Алимович. Я так понимаю, что ваша оценка исключительно положительная. Если к Наилю Алимовичу нет вопросу, к характеристике соискателя? Тогда спасибо большое! Тогда мы переходим к поступившим в совет заключениям. Заключение ведущей организации сначала.

Ученый секретарь: На диссертацию поступил отзыв ведущей организации. В данном случае ведущая организация – это ИТМО – Санкт-Петербургский университет информационных технологий, механики и оптики. Отзыв положительный. Имеются замечания. С разрешения ученого совета весь отзыв я не буду зачитывать, поскольку он положительный, зачитаю замечания.

Первое. В третьей главе дано обсуждение условий применимости использованного уравнения состояния для металла на двухтемпературной стадии. К сожалению, оно ограничено рассмотрением влияния электронного нагрева на ионные свойства, а равно и ионного нагрева на электронные на ионные свойства, которые не используются непосредственно в двухтемпературном гидродинамическом моделировании. Безусловно, продольная скорость звука и плотность электронных состояний являются теми параметрами, которые можно использовать для характеристики применимости такого разложения. Однако для решения практических задач было бы полезно знать области на фазовой диаграмме для объёмов и температур обеих подсистем, где вносимая трехчленным разложением ошибка в энергиях и давлениях будет требовать учёта в уравнении состояния.

Всего три замечания. Второе замечание. В четвёртой главе приводится обсуждение результатов электрон-фононного теплообмена в металлах в твёрдом состоянии. При этом известно, что значительную часть приповерхностного слоя при завершении двухтемпературной стадии составляет расплав [N.A. Inogamov et al, Proc. SPIE, 9065, (2013)]. Было бы полезным указать, насколько применим используемый автором подход, основанный на модели Каганова-Лифшица-Танатарова.

Третье замечание. В пятой главе даны два примера использования результатов двухпараболического приближения для моделирования методом двухтемпературной гидродинамики. Примеры относятся к металлам разного типа (переходной/благородный), и различной геометрии мишени (полубесконечный слой/пленка). Было бы полезнее сравнить результаты двухпараболического приближения либо для одного металла с разной геометрией мишени, либо для одинаковых мишеней из разных металлов.

Председатель: Давайте послушаем поступившие отзывы на автореферат.

Ученый секретарь: Кроме отзыва ведущей организации поступили отзывы на автореферат. Всего пять отзывов, все они положительные.

Первый отзыв получен из Института электрофизики УО РАН. Отзыв подписан д.ф.-м.н. Волковым Николаем Борисовичем, заведующим Лабораторией нелинейной динамики. В отзыве одно замечание: в автореферате отсутствуют описания существа предложенных диссертантом физических моделей, в частности, двухпараболической модели металла и ее обобщения на переходные и редкоземельные металлы.

Следующий отзыв. Объединённый институт высоких температур. Лаборатория 4.3.1. Отзыв подписан к.ф.-м. н. Апфельбаумом Евгением Михайловичем. Отзыв положительный. Имеются замечания. Замечание первое. В автореферате не указана характерная интенсивность излучения, для которой и рассматриваются изучаемые процессы. Сказано, что она «умеренная» и что «Рассмотрены лазерные импульсы с энергиями, вкладываемыми на единицу площади мишеней, около порогов плавления и абляции». Но можно было бы для примера привести и характерные значения интенсивности падающего и поглощенного излучения. Следующее замечание. В автореферате сказано, что третья диссертации посвящена двухтемпературному уравнению состояния, т.е. изучению и ионной системы тоже. И на рис. 3 представлены результаты расчётов по полученному в этой работе двухтемпературному УРС. Но ничего не сказано о методах, которые применялись для изучения ионной подсистемы, в отличие от электронной. Третье замечание следующее. Помимо электронной теплопроводности в рамках данной модели кажется возможным расчёт и электропроводности. Это было бы интересно, учитывая что данных по электропроводности (как экспериментальных, так и электрических) обычно существенно больше, чем для теплопроводности.

Следующий отзыв из МФТИ, подписан д.ф.-м.н. Ткаченко Светланой Ивановной. Без замечаний.

Четвёртый отзыв – Институт теплофизики СО РАН им. С.С. Кутателадзе. Подписан д.ф.-м.н., г.н.с. Лаборатории разреженных газов Булгаковой Надеждой Михайловной. Отзыв положительный, с замечаниями. Суть ряда основных разработок полученных результатов представлена скупой, что заставляет при прочтении автореферата обращаться к публикациям автора. Так, при описании содержания второй главы было бы уместным представить суть двухпараболической модели. На Рис. 2, справа даны результаты расчёта химического потенциала тантала, где показано, что результаты моделирования в значительной степени зависят от предположений модели. Однако нет вывода о том, какой подход к моделированию является более корректным. Следующее замечание, здесь несколько замечаний. Отмечено, что в параграфе 4.6 «дана формулировка модифицированного подхода» для описания электрон-фононного энергообмена в металлах. Однако не поясняется, почему модификация потребовалась и в чем ее суть. Следующее замечание. На Рис. 4 справа следовало бы пояснить термин «интегральная электронная температура». Интегральная по пятну облучения, по толщине пленки? Почему выбран столь большой коэффициент экстинкции при моделировании? Как он соотносится с экспериментально определённым коэффициентом поглощения? Не понятно, где, как утверждается при описании параграфа 5.2, на Рис. 4, справа даны результаты квантовой молекулярной динамики по описанию экспериментов Choetal, 2011, Phys.Rev.Lett. 106, 167001 и кто их выполнял. Следующее замечание.

В основных результатах и выводах работы появляется понятие эффективной массы электрона. Однако в тексте автореферата нет упоминания об этом параметре, которому посвящён отдельный пункт выводов. И последнее замечание следующее. Для лучшего представления результатов работы было бы не лишним ввести используемые аббревиатуры (МФП, ПЭС, УВ, МД).

Последний отзыв на автореферат. Физический институт им. П.Н. Лебедева. Подписан к.ф.-м.н., с.н.с. Лаборатории газовых лазеров Кудряшовым Сергеем Ивановичем.

Замечание первое. По тексту автореферата не отмечено проявление эффектов квантовой кинетики испускания акустических фотонов в металлах с нагретой электронной подсистемой в их термодинамических и кинетических свойствах. Следующее замечание. Данная в параграфе 4.6 формулировка модифицированного подхода, основанного на положениях теории Каганова-Лифшица-Танатарова и предназначенного для описания явления электрон-фононного теплообмена в металлах с нагретой электронной подсистемой, не учитывает эффекта решеточной температуры и не дается оценки его величины, что в совокупности с исследованным эффектом электронной температуры позволило бы предложить самое передовое описание электрон-фононного теплообмена в металлах. И последнее замечание. По тексту встречаются отдельные неудачные выражения типа «Зависимость плотности электронных состояний благородных металлов от электронной температуры» (степени заполнения?) и опечатки.

Председатель: Это все, да? Спасибо большое.

Кирилл Петрович, тут в замечаниях перечислено довольно много, часть из них мы уже обсуждали, поэтому я вас прошу сконцентрироваться на том, что является тут новым, и, по возможности их сгруппировать.

К.П. Мигдал: Хорошо, хорошо. Если говорить о замечаниях ведущей организации, то все они достаточно весомые и связаны с теми физическими моделями, которые я рассматриваю. В первом случае речь идёт о том, насколько применимо трехчленное уравнение состояния. Здесь я вернусь к тому слайду, который был уже в основной части моей презентации. Если говорить о границах применимости, то Владимир Леонидович прав. Тут конечно следовало провести не для двух, а для все семи металлов такое исследование. Но качественно, как мне кажется, можно указать на то, что ионная подсистема начинает испытывать влияние нагретых электронов с 30000 К, а в случае электронной подсистемы мы должны принимать во внимание эффект расположения ионов на электронные свойства тогда, когда имеются сильные электронные нагревы и вещество уже в расплавленном состоянии. Если говорить о том, что эти эффекты должны быть учтены уже при гидродинамическом моделировании, то такая задача не ставилась. В этом смысле замечание принимается, так как такая задача будет задачей «на вырост».

Если говорить о втором замечании, касающемся использования теории Каганова-Лифшица-Танатарова для жидкого металла, то нужно сразу оговориться, что формально использовать ее для жидкости нельзя, потому что в жидкости никаких фононов нет. Однако, мы рассматриваем процесс, в котором сохраняется объём системы и рассматриваются те же температуры, что и для твердого вещества. При этом насколько мы знаем из обработки экспериментальных результатов по модели Друде, частота столкновений электронов с ионами существенно не меняется, за исключением только золота. Поэтому мы полагаем, что качественно предсказания нашей модели, основанной на теории Каганова-Лифшица-Танатарова, должны работать и в этом случае. В качестве аргумента за я могу предложить результат сравнения с экспериментом, о котором я уже говорил. Здесь дополнительно к поведению электронной температуры в слое мишени показано поведение ионной температуры. Здесь, во-первых, видно, что согласуется с экспериментом поведением электронной температуры, во-вторых, в течение 15 пс происходит выравнивание электронной и ионной температуры. При этом речь идёт о тонкой пленке меди 70 нм, которая достаточно быстро расплавилась, то есть значительная часть моделирования была проведена уже для жидкости, что видно уже на следующем слайде. Здесь приведен, во-первых, график сравнения результатов двухтемпературного гидродинамического моделирования, проведенного с помощью предложенной мной моделью, во-вторых показана та же зависимость для скорости разлетающейся пленки на одной из ее границ, полученная с помощью классической молекулярной динамики и выполненная Василием Викторовичем Жаховским. В верхней части рисунка показан разрез из молекулярно-динамического моделирования, где видно, что не только произошло плавление, но и в области разрыва произошла кавитация. Наконец, нельзя не сказать,

почему мы используем такую достаточно старую теорию Каганова-Лифшица-Танатарова, если есть достаточно известная модель Аллена-Даунера, которую в частности использует Леонид Жигилей. Здесь нужно сказать, что сама по себе работа Аллена 1987 года дает точное решение для однозонного металла, каким является алюминий, с одной лишь оговоркой, что для точного ответа необходимо знать точную функцию Элиашберга. Когда мы рассматриваем металл с нагретыми электронами, определить эту функцию, особенно ранее, когда не было значительных вычислительных мощностей, было весьма сложно. Поэтому Даунер в 1994 году предложил разложение функции Элиашберга, где энергия теплового движения электрона по отношению к энергии Ферми рассматривалась как малый параметр.

Председатель: Кирилл Петрович, извините, пожалуйста. Я думаю, что ответ на данный вопрос получен.

К.П. Мигдал: Хорошо. Теперь по поводу третьего замечания. Здесь ответ достаточно простой. Мы рады описать эксперименты, которые позволили бы провести прямое релевантное сравнение для всех экспериментов, но таких экспериментов, которые позволили бы использовать динамически снятые данные в технике *rimp-rprobe*, а во-вторых, в которых бы рассматривались такие условия, либо долго держится высокая электронная температура, либо мишени из переходного металла, для которого предсказания двух моделей сильно различаются, совсем немного. Поэтому мы были вынуждены провести сравнение для никеля и для меди, а не для одного металла с разными геометриями мишеней, как предлагает Владимир Леонидович. Здесь слово за экспериментом. Как только будут два эксперимента для разных геометрий в одном металле, мы сможем провести такое сравнение.

Перейду к ответам на замечания на автореферат. Первое замечание стоит принять, я считаю, с одной лишь оговоркой, что автореферат достаточно краткое произведение, которое при всем желании не могло бы включить все, что я хотел бы. В данном случае пришлось пожертвовать описанием физических моделей, которые присутствуют в диссертации.

По поводу первого замечания, сделанного Евгением Михайловичем. Я принимаю это замечание. В диссертации об этом сказано, в автореферате, к сожалению, нет.

К второму замечанию я приведу картинку, на которую ссылался Евгений Михайлович. Здесь приводятся только вклады в давление в железе с холодными ионами. То есть никакого ионного теплового давления здесь нет, и поэтому я о нем не говорю.

Теперь по поводу расчета электропроводности, упомянутом в третьем замечании. На самом деле, такие расчёты выполнялись Юрием Васильевичем Петровым в его работе 2013 года в Письмах в ЖЭТФ, где им был рассмотрен вклад в удельное сопротивление за счёт электрон-фононных столкновений путем решения кинетического уравнения Больцмана. Со своей стороны, я могу добавить, что я рассчитывал вклад в сопротивление со стороны межзонных столкновений в модели Друде. Есть работа, представленная на конференции на Эльбрусе в 2016 году, в которой показано, что при высоких температурах электронов этот вклад является одним из основных. Включать эту работу в диссертацию я не стал, поскольку другой вклад в электросопротивление был рассчитан методом квантовой молекулярной динамики, и эту часть я решил в свою работу не включать.

Первое замечание Надежды Михайловны Булгаковой аналогично замечанию Николая Борисовича, поэтому я его опущу, кроме второй его части, где комментируется один из рисунков. Здесь я должен сказать, что более точной является $Zr+f$ модель, то есть 1 s-зона, 2 d-зоны и 1 f-зона, которая наиболее согласуется с полноэлектронным расчётом. Действительно, я об этом прямо не сказал, но на мой взгляд, это достаточно очевидно.

По поводу модификации модели Каганова-Лифшица-Танатарова я должен уточнить, поскольку не смог описать в автореферате суть вводимой модели в виде непосредственного перехода от одной формулы к другой. Сделаю это сейчас. Суть в том, что мы имеем описание темпа переноса энергии от электронов к ионам. В этой формуле возникает статистическая сумма, в которой возникают распределения электронов и фононов по импульсам. При описании распределения электронного распределения по импульсам мы должны предложить какой-нибудь дисперсионный закон. В модели Каганова-Лифшица-Танатарова используется достаточно простое для идеального Ферми-газа, в нашем случае мы используем двухпараболическое приближение, которое позволяет разделить вклады в электрон-фононный теплообмен от s- и d-электронов.

Четвертое замечание принимается, поскольку кроме ссылки на сам эксперимент, поскольку нужно было указать кроме ссылки на сам эксперимент, нужно было бы указать, что кроме оптического греющего импульса, в эксперименте используется рентгеновский диагностический импульс для которого можно ввести длину экстинкции 125 нм.

В том числе мы проводили расчёт температуры электронов с помощью этой длины экстинкции, и его результаты оказались достаточно близки к результатам, которые мы рассчитывали с помощью коэффициента массового поглощения, учитывая распределение плотности в нагретом слое. Поэтому этот менее точный результат, согласующийся с более точным мы решили далее не приводить.

Об эффективной массе я не смог сказать по той же причине, что не привел...

Председатель: Кирилл Петрович, но этот вопрос уже обсуждался.

К.П. Мигдал: Да, этот вопрос сводится к первому замечанию Николая Борисовича.

По поводу пятого замечания. И аббревиатуры в тексте вводятся, может быть, стоило указать их список в начале автореферата, но этот вопрос опять же сводится к первому замечанию.

Теперь по поводу замечаний, которые сделал Сергей Иванович. В тексте, который был сейчас зачитан, говорилось о фотонах. Я ему перезвонил, и уточнил, что речь конечно шла о фононах. Электроны испускают фононы. Речь шла о том, что из автореферата не было понятно, учитываются ли процессы вынужденного испускания. Естественно, они учитываются. Как показано на слайде в формуле для статистической суммы, первый вклад, отделенный красной линией, - это спонтанное испускание фонона электроном, а второй вклад – это вынужденное испускание за вычетом вынужденного поглощения, которые определяются множителем $N(q)$, соответствующим статистике Бозе-Эйнштейна. То есть эти эффекты на самом деле учитываются.

По второму замечанию. Влияние ионной подсистемы на темп электрон-фононного теплообмена не рассматривалось по той причине, что мы рассматриваем достаточно высокие ионные температуры, не ниже температуры Дебая, когда ионная подсистема выходит на насыщение. Учитывать же какие-то тонкие эффекты, вроде ангармонизма, для простых металлов мы не видим большого смысла, поскольку это выход за точность нашей модели.

И по поводу третьего замечания должен сказать, что первая часть его – это не моя ошибка. Речь действительно идет о том, что плотность состояний, а не только степень заполнения меняется с электронным нагревом. Это одно из положений, выносимых на защиту. По поводу опечаток, тут я, конечно, принимаю замечание. Они кое-где были.

Председатель: Спасибо, Кирилл Петрович. Мы переходим к заслушиванию оппонентов, которые у нас присутствуют. Первое слово предоставляется Михаилу Исааковичу Трибельскому. Пожалуйста.

М.И. Трибельский: Здравствуйте, уважаемые члены совета. Позвольте, я предварю конкретное обсуждение работы некоторыми краткими общими словами.

Если брать кандидатские диссертации, успешно защищаемые, то их можно разделить на две, к сожалению, очень неравные группы. Большая часть составляет собой такую добротную квалификационную работу, где автор демонстрирует владение материалом, квалификацию, защищает ее, получает диплом. Диссертация становится на полку и стоит там вечно, обрастает паутиной, пылью, никогда уже с этой полки не снимается, разве что для того, чтобы показать гостям. И есть другая незначительная группа работ, которые на полку не становятся, которые после защиты лежат на рабочем столе не только диссертанта, но и его коллег, которые с ним сотрудничают, которые ею пользуются. В этих диссертациях создается что-то новое, что-то важное и они дорогого стоят. И эта диссертация, по моему мнению, как раз относится к этой второй группе.

Полученные результаты, как по количеству, что тоже немало важно, так и по качеству, с моей точки зрения, существенно превышают те требования, которые обычно предъявляются к кандидатским диссертациям. Но даже объем, пять глав, это уже в общем случае, докторская диссертация. И это главы не пустые, это не трюнда-брында, это главы, которые содержат существенную и важную информацию. Подводя итог, я хочу сказать, что автором проделана очень большая работа для кандидатской диссертации, да даже если говорить безотносительно диссертации, просто большая работа, которая относится к самому переднему краю современной науки, описывает процессы релаксации, происходящие в сильнонеравновесных системах при коротких временах лазерного воздействия. Уже здесь отмечалось, что к несчастью в нашей стране существует всего две группы,

которые занимаются такими работами, несмотря на то, что на Западе это направление активно развивается.

Я не буду занимать ваше внимание, пересказывая существо работы, поскольку автор это достаточно хорошо сделал. Я хочу сказать, что прежде дать согласие на оппонирование к этой работе, как обычно, я припросил автора выступить у нас на семинара. Семинар у нас довольно жёсткий, то есть докладчика прессуют по полной. И Кирилл Петрович прошел через всю эту мясорубку, причем было очень много вопросов. Семинар занял вместо положенных полутора часов три часа обсуждения. На все вопросы он ответил, произвел очень хорошее впечатление. Я с большим удовольствием согласился здесь выступить.

Несколько слов, переходя к конкретным замечаниям. Чем больше сделано автором, тем больше можно сделать замечаний. Я не пошел по этому пути, поскольку такие замечания были бы достаточно формальными. У меня есть два принципиальных замечания, которые я хотел бы сообщить.

Первое замечание, которое проходит через всю диссертацию, относится ко всей диссертации в целом. Первое замечание может даже в каком-то смысле рассматриваться как похвала работе. Мало сравнения с экспериментом. С одной стороны, это объясняется тем, что, как я уже сказал, работа лежит на переднем крае, эксперимент трудный, и эта работа может стимулировать экспериментаторов провести дополнительный эксперимент. Трудно найти подходящий эксперимент для сравнения. Но, к сожалению, даже там, где они есть, автор проводит сравнение не лучшим образом. Например, даже в презентации фигурировал слайд, он существует в качестве рисунка в диссертации, где производится сравнение с экспериментом Цуя, и там приведена достаточно большая область теоретических кривых, а весь эксперимент сжался в одну-единственную точку. Я понимаю. Что автору хочется большой объём результатов, что он получил, но ведь этот материал приводится для сравнения этих результатов с экспериментов, поэтому основное внимание нужно уделить как раз сравнению с экспериментальным результатом. Вот он как раз на экране. Весь эксперимент – это красный квадратик. Правда, довольно большой. К сожалению, это смыкается с другим общим недостатком работы. Это тоже уже отмечавшаяся сегодня, и, к сожалению, я уже обратил внимание, присутствовавшая на слайдах, некоторая небрежность как в оформлении графиков, так и в тексте диссертации.

Я приведу несколько конкретных примеров. Например, рисунок 3.7 в диссертации. На этом рисунке приведено 3 графика. Поскольку 3 графика приведены на одном рисунке, то предполагается, что все графики можно сравнить между собой. И опять же, ожидается, что все три графика изображают величины в одних и тех же осях. Не тут то было. Два графика изображаются в осях плотность-давление, а третий – объём-давление. Но ведь нетрудно было бы пересчитать. Такие графики затрудняют сравнение и затрудняют понимание диссертации. Опять же на том же самом рисунке 3.7, на левом графике приведены три линии: штриховая, штрих-пунктирная и сплошная. Приведены в монохромной гамме, то есть, они просто черные. Эти линии невозможно различить. То есть у меня был не печатный текст диссертации, а файл, и я делал пятикратное увеличение. И только тогда я смог различить их между собой. Но ничего же не мешало сделать их разноцветными.

Я не буду перечислять, таких примеров, к сожалению, довольно много. Тут был слайд, на котором были не закрыты скобки и т.д. То же самое в тексте диссертации, опять же, в том же многострадальном рисунке 3.7, в подписи сказано: «Давление в железе в диапазоне от атомного объёма до мегабарного сжатия». Звучит примерно так, как «от забора до полуночи». Я конечно понимаю, что автор знает, что нельзя сравнивать физические величины, имеющие разную размерность. Но читая этот текст, можно сделать вывод, что именно этого он не знает. Все это, казалось бы, мелочи, но в действительности это – культура представления научных результатов, которая очень важна и отсутствие которой могло бы снизить очень хорошее впечатление о работе. К счастью, этого не произошло. Я считаю, что Кирилл Петрович еще молодой ученый, ему есть куда совершенствоваться. Я думаю, что со временем эта небрежность будет изжита. А в целом работа производит чрезвычайно хорошее впечатление, и я призываю всех членов ученого совета единогласно голосовать за присуждение искомой степени. Спасибо большое.

Председатель: Спасибо большое, Михаил Исаакович. Я думаю, вопросов нет никаких, поскольку мы услышали квалифицированную и полную оценку диссертации. Спасибо. Кирилл Петрович, я бы на вашем месте согласился бы со всеми замечаниями к диссертации.

К.П. Мигдал: Да, я согласен.

Председатель: Тогда мы перейдем ко второму оппоненту. Это Андрей Павлович Канавин. Пожалуйста.

А.П. Канавин: Добрый день. Поскольку было сделано достаточно убедительное выступление диссертанта и его оппонента, я хочу добавить следующее. Когда изучаются такие вещи, вы вкладываете несколько десятков или несколько сотен миллиДжоулей за сто фемтосекунд, электроны нагреваются практически до температуры ферми, а ионы еще не успели совершить ни одного колебания. Это по существу новое состояние вещества, которые мы обычно не наблюдаем. Потом начинается всё остальное: разгрузки, разлет и т.д. Мне кажется, что самое важное сделал Кирилл Петрович – он предложил такие модели, достаточно простые, которыми можно пользоваться аналитически. Обосновал их, нашел все константы с помощью метода функционала плотности и, тем самым, как бы приблизил, дал возможность пользоваться привычными уравнениями, с чего начинал Сергей Иванович Анисимов, когда развивал свою двухтемпературную модель для расчёта конкретных задач. Это очень важный шаг. Замечательно, что это было сделано у нас в стране, потому, что до этого все расчёты делались за рубежом. Если можно не читать все заключение...

Председатель: Можно.

А.П. Канавин: В заключении я хотел бы сказать, что диссертационная работа безусловно представляет собой законченную научно-квалификационную работу. Диссертант заслуживает присуждения ему степени. Диссертант выступал в Физическом институте с докладом. Доклад прошел с большим успехом. Все.

Председатель: Спасибо! Спасибо, Андрей Павлович. Кирилл Петрович, я думаю, что вам и тут нечего сказать.

К.П. Мигдал: Да.

Председатель: Спасибо, тогда мы переходим к дискуссии, которая должна завершить обсуждение этой работы, которая выставлена на соискание. Кто хочет высказаться?

Э.Е. Сон: Я очень коротко скажу. Тут говорилось о том, что работа не будет лежать на полке. Могу сказать, что недавно мы написали с Игорем Львовичем Иосилевским, В.Е. Фортовым написали книгу, и результаты Кирилла Петровича упоминаются в этой книге, в главе «Термодинамика и транспорт неидеальной плазмы».

Председатель. Спасибо! Спасибо за дополнительную информацию, которая, на мой взгляд, только сможет помочь всем членам совета принять правильное решение в отношении данной работы. Я не вижу необходимости и желающих дискутировать, поскольку, мне кажется, вопрос достаточно ясный. Поэтому мы можем только заключительное слово соискателю предоставить. Фактически к выборам комиссии мы готовы. Вы хотите что-то сказать, Кирилл Петрович?

К.П. Мигдал: Да, я хочу.

Председатель: Пожалуйста.

К.П. Мигдал: В завершающем своем слове я хотел бы поблагодарить, во-первых, своего научного руководителя Наиля Алимовича Иногамова, с которым мы начали эту работу достаточно давно. И поблагодарить также наш институт автоматизики, который создал для нас достаточно хорошие условия, чтобы мы могли такой работой заниматься. Я закончил.

Председатель: Спасибо. Для того, чтобы нам завершить рассмотрение этой работы, нам нужна счётная комиссия. И есть предложение - три кандидатуры у нас для комиссии – Ломоносов, Кириллин, Грязнов. Какие будут возражения? Нет возражений. Прошу принять эту комиссию. Давайте преступим к голосованию.

Уважаемые члены совета, прошу голосовать!

И.В. Ломоносов: Уважаемые члены совета! Уважаемый председатель совета! На заседании присутствовало 23 члена совета, роздано 23 бюллетеня, осталось нерозданных – 8, оказалось в урне – 23. Результаты голосования по поводу присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук Мигдалу Кириллу Петровичу: за – 22, против – 0, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель. Спасибо! Мы поздравляем и одновременно утверждаем тем самым. Есть ли замечания по заключению? Кто имеет замечания по заключению, уважаемые коллеги? Ждем ваших комментариев.

В.В. Голуб: В заключении замечается «важность аккуратного воспроизведения электронных свойств». Я считаю, что «аккуратное воспроизведение» нужно заменить более корректным выражением.

Председатель: Антинаучные какие-то утверждения! Так, а кто-нибудь отмечает? Кирилл Петрович?

К.П. Мигдал: Я пытаюсь на диктофон записать.

Председатель: Попробуйте, не пропустите ничего.

П.Ю. Кортаев: Отмечаем, отмечаем.

Председатель: Замечательно. Да, Владимир Сергеевич?

В.С. Воробьев: Просто неудачная фраза? «Соискатель имеет 27 опубликованных работ», а через одну строчку – «опубликовано пятнадцать...».

Председатель: Наверное, на тему диссертации?

В.С. Воробьев: Нет, там сказано, что из Перечня ВАК. Сформулировано неудачно, бросается в глаза. Надо написать более четко.

К.П. Мигдал: Понял.

Председатель: Несомненно, чтобы не бросалось в глаза противоречие.

Да, Леонид Михайлович, пожалуйста.

Ученый секретарь: Вот мне не нравится, как здесь сформулировано: «Оценка достоверности результатов выявила». Дальше идет некое перечисление, а что выявило – не сказано. С моей точки зрения, нужно сделать так, как мы делали традиционно. Нужно написать, что «достоверность результатов подтверждается тем, что...»

К.П. Мигдал: Понял.

Председатель: Поработайте с текстом.

Ученый секретарь: Еще упоминается непринятый отзыв Стегайлова. Его нужно убрать.

К.П. Мигдал: Да, упоминание об этом отзыве надо убрать.

Н.Е. Андреев: Так, это интересно. Мы действительно не слышали Стегайлова. Уважаемые коллеги, здесь упоминается на один отзыв на автореферат больше, про который мы реально не слышали. Следовательно, не забудьте, что из заключения его нужно убрать.

Хорошо, еще есть какие-нибудь замечания, пожелания? Если нет тогда давайте примем в целом наше заключение с теми замечаниями, которые, надеюсь, будут исправлены. Кто за?

Воздержался? Против? Таких нет. Отлично. Мы единогласно приняли заключение по этой диссертации. На этом защита первой диссертации закончена.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.110.02, СОЗДАННОГО НА
БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
НАУКИ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР РОССИЙСКОЙ
АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 21.03.2018 протокол № 2

О присуждении Мигдалу Кириллу Петровичу, гражданину Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Термодинамические и кинетические свойства металлов с возбуждённой электронной подсистемой» в виде рукописи по специальности 01.04.14 - Теплофизика и теоретическая теплотехника, принята к защите 27.10.2017 г., протокол № 23, диссертационным советом Д 002.110.02, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр.2, iht.ru, (495) 485-8345), утвержденным Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 11.04.2012г. № 105/нк.

Соискатель Мигдал Кирилл Петрович 1988 года рождения, в 2011 году окончил Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ».

В 2014 году окончил очную аспирантуру Всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Н.Л. Духова (ГК «Росатом»).

Работает старшим научным сотрудником Отдела компьютерного материаловедения Центра фундаментальных и прикладных исследований Федерального государственного унитарного предприятия Всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Н.Л. Духова Государственной корпорации «Росатом».

Диссертация выполнена в отделе компьютерного материаловедения Центра фундаментальных и прикладных исследований Федерального государственного унитарного предприятия Всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Н.Л. Духова Государственной корпорации «Росатом».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук Иногамов Наиль Алимович, ведущий научный сотрудник сектора плазмы и лазеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

Трибельский Михаил Исаакович, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник Физического факультета, Отделения физики твердого тела, Кафедры физики полимеров и кристаллов Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова» (119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, тел.: (495)939-1000, msu.ru, e-mail: info@rector.msu.ru);

Канавин Андрей Павлович, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Сектора теории взаимодействия излучения с веществом Федерального

государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (г. Москва Ленинский пр-т. 53, корп.1 к. 758, тел.: (499) 132-4262, lebedev.ru, e-mail: postmaster@lebedev.ru)

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики» (пр-кт Кронверкский, 49, Санкт-Петербург, 197101, тел.: (812) 232-9704, ifmo.ru, e-mail: vasilev@mail.ifmo.ru), в своем положительном заключении, утвержденном Никифоровым Владимиром Олеговичем, д.т.н., профессором, проректором Университета ИТМО по научной работе (составленном Комоловым Владимиром Леонидовичем, к.ф.-м.н., доцентом кафедры Оптической физики и современного естествознания Университета ИТМО), указала что:

1. В диссертации Мигдала К.П. проведено решение задачи о термодинамических и кинетических свойствах нагретых электронов, которое является важным для понимания физики процессов и явлений при ультракоротком воздействии излучения на металлы, а также для использования полученных теоретических предсказаний в интенсивно развивающейся лазерной технологии обработки материалов.

2. Введение двухпараболического приближения, определение с его помощью поведения электронного давления, теплоёмкости и теплопроводности, а также установление влияния изменения электронной структуры металлов на электронную теплоёмкость и электрон-фононный теплообмен и построение модели уравнения состояния вещества для давлений от -30 до 100 ГПа и температур до 55 000 К составляют научную новизну диссертации.

3. Полученные результаты могут быть использованы в организациях, где проводятся исследования абляции при сверхкоротком лазерном воздействии: ФИАН им. П.Н. Лебедева РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ИТФ им Л.Д. Ландау РАН, НИЦ «Курчатовский институт», РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ им. Е.И. Забабахина.

Соискатель имеет 27 опубликованных работ, среди которых 24 работы по теме диссертации, из них 15 работ - в научных изданиях, включенных в Перечень ВАК и в базы данных (WebofScience, Scopus).

Основные работы:

1. Петров Ю. В., Иногамов Н. А., Мигдал К. П., Теплопроводность и коэффициент электрон-ионного теплообмена в конденсированных средах с сильно возбужденной электронной подсистемой. // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97. С. 24-31. В статье представлен подход к расчёту электронной теплоёмкости, частот электрон-электронных и электрон-ионных столкновений и коэффициента электрон-фононного теплообмена для двухзонных металлов. Вкладдиссертанта - 4 страницыиз 8.

2. Inogamov N. A., Zhakhovsky V. V., Petrov Yu. V., Ashitkov S. I., Khishchenko K. V., Migdal K. P. et al, Electron-ion relaxation, phase transition, and surface nanostructuring produced by ultrashort laser pulses in metals. // Contributions to Plasma Physics. 2013. V. 53. N. 10. P. 796-810. В работе представлены результаты эксперимента по облучению мишени из тантала ультракоротким лазерным импульсом и описания моделирования данного эксперимента, проведённого с помощью двухтемпературной гидродинамики с данными для электронной подсистемы, впервые полученными для тантала. Вкладавтора - 4 страницыиз 15.

3. Petrov Yu. V., Migdal K. P. et al, Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultrashort laser pulse. // *Applied Physics B*. 2015. V. 119. N. 3. P. 401-411. Построены модели для электронного вклада в уравнение состояния алюминия и золота. Вклад автора - 5 страниц из 11.

4. Migdal K. P., Ilnitsky D. K. et al, Equations of state, energy transport and two-temperature hydrodynamic simulations for femtosecond laser irradiated copper and gold. // *Journal of Physics: Conference Series*. 2015. V. 653. N. 1. P. 012086-1 - 012086-15. В работе приведены данные об электронных свойствах меди и золота, востребованных при проведении двухтемпературного моделирования и представлены данные, свидетельствующие о хорошем согласии двухтемпературного моделирования с экспериментом, в том числе за счёт более аккуратного воспроизведения электронных свойств. Вклад автора - 10 страниц из 15.

5. Migdal K. P., Ilnitsky D. K. et al, Heat conductivity of copper in two-temperature state. // *Applied Physics A*. 2016. V. 122. N. 4. P. 408-412. Представлены расчёты электрон-фононного теплообмена и электронной теплопроводности меди. Изучено влияние параметров электронной термодинамики и кинетики на динамику остывания тонкой пленки в сравнении с результатом эксперимента. Вклад автора - 3 из 5.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Институт электрофизики Уральского отделения РАН (ИЭФ УО РАН) (д.ф.-м.н., г.н.с. Лаборатории нелинейной динамики Волков Николай Борисович) – отзыв положительный, с замечанием:

- Отсутствуют описания по существу предложенных автором физических моделей, в частности, двухпараболической модели электронной структуры металла.

2. Объединённый институт высоких температур РАН (ОИВТ РАН) (к.ф.-м.н., с.н.с. Лаборатории №4.3.1 - математического моделирования Отдела № 4.3 - вычислительной физики НИЦ-4 Апфельбаум Евгений Михайлович) - отзыв положительный, с замечаниями:

- Не указана характерная интенсивность излучения, для которой рассматриваются изучаемые процессы. Указано, что она «умеренная» и что вкладываемая энергия на единицу площади вблизи порогов плавления и абляции. Можно было бы привести для примера характерные значения интенсивности падающего и поглощенного излучения.

- Не сказано о методах исследования ионной подсистемы в главе, посвященной разработке двухтемпературного уравнения состояния;

- Было бы интересно провести расчёты электропроводности тем же методом, какой использовался для определения электронной теплопроводности.

3. Институт теплофизики Сибирского отделения РАН им. С.С. Кутателадзе (д.ф.-м.н., г.н.с. лаборатории разреженных газов Буглакова Надежда Михайловна) - отзыв положительный, с замечаниями:

- Суть ряда основных разработок и полученных результатов представлена скупой, что заставляет при прочтении автореферата обращаться к публикациям автора. Так, при описании содержания второй главы было бы уместным представить суть двухпараболической модели. На Рис. 2, справа даны результаты расчета химического потенциала тантала, где показано, что результаты моделирования в значительной степени зависят от предположений модели. Однако нет вывода о том, какой подход к моделированию является более корректным.

- Отмечено, что в параграфе 4.6 «дана формулировка дефицированного подхода» для описания электрон-фононного энергообмена в металлах. Однако не поясняется, почему модификации потребовалась и в чем суть.

- На Рис. 4, справа следовало бы пояснить термин «интегральная электронная температура». Интегральная по пятну облучения, по толщине пленки? Почему выбран столь большой коэффициент экстинкции при моделировании? Как он соотносится с экспериментально определенным коэффициентом поглощения? Не понятно, где, как утверждается при описании параграфа 5.2. на Рис 4, справа даны результаты квантовой молекулярной динамики по описанию экспериментов [28] и кто их выполнял.

- В основных результатах и выводах работы появляется понятие эффективной массы электрона. Однако в тексте автореферата нет упоминания об этом параметре, которому посвящен отдельный пункт выводов.

- Для лучшего представления результатов работы было бы не лишним ввести используемые аббревиатуры (МФП, ПЭС, УВ, МД).

4. Московский физико-технический институт (государственный университет) (д.ф.-м.н., профессор департамента молекулярной и биологической физики МФТИ Ткаченко Светлана Ивановна) - отзыв положительный, без замечаний.

5. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН (к.ф.-м.н., с.н.с. Лаборатории газовых лазеров ФИАН Кудряшов Сергей Иванович) - отзыв положительный, с замечаниями:

- По тексту автореферата не отмечено проявление эффектов квантовой кинетики испускания акустических фотонов в металлах с нагретой электронной подсистемой в их термодинамических и кинетических свойствах.

- Данная в параграфе 4.6 формулировка модифицированного подхода, основанного на положениях теории Каганова-Лифшица-Танатарова и предназначенного для описания явления электрон-фононного теплообмена в металлах с нагретой электронной подсистемой, не учитывается эффекта решеточной температуры и не дается оценки его величины, что в совокупности с исследованным эффектом электронной температуры позволило бы предложить самое передовое описание электрон-фононного теплообмена в металлах.

- По тексту встречаются отдельные неудачные выражения типа «... Зависимость плотности электронных состояний благородных металлов от электронной температуры...» (степени заполнения?) и опечатки.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается проводимыми ими исследованиями по теме диссертации.

Выбор Трибельского Михаила Исааковича обосновывается в качестве оппонента обосновывается тем, что Трибельский М.И. является признанным на международном уровне специалистом в области задач о нагреве микро- и наноструктур лазерным излучением:

1. A.E. Miroshnichenko, M.I. Tribelsky «Ultimate Absorption in Light Scattering by a Finite Obstacle» // Physical Review Letters. 2018. V. 120. P. 033902 (5 pages).

2. M.I. Tribelsky, A.E. Miroshnichenko «Giant in-particle field concentration and Fano resonances at light scattering by high-refractive-index particles» // Physical Review A. 2016. V. 93. P. 053837 (22 pages).

3. M.I. Tribelsky, S.I. Anisimov «Tuned Mullins-Sekerka instability: Exact result» // Physical Review E. 2014. V. 90. P. 042403 (5 pages).

Выбор Канавина Андрея Павловича в качестве оппонента обусловлен тем, что Канавин А.П. является признанным на международном уровне специалистом в области теоретического описания термодинамических, транспортных и оптических свойств электронов, нагретых ультракороткими лазерными импульсами с частотой вблизи диапазона видимого света:

1. S.G. Bezhanov, A.P. Kanavin, S.A. Uryupin «Enhanced transmission of the femtosecond laser pulse through metallic nanofilm» // Physics Letters A. 2014. V. 378. P. 975-977.
2. С.Г. Бежанов, А.П. Канавин, С.А. Урюпин «Нагрев металлической нанопленки при поглощении фемтосекундного лазерного излучения» // Квантовая электроника. 2014. Т. 44. В. 9. С. 859-865.
3. Д.А. Заярный, А.А. Ионин, С.И. Кудряшов, С.В. Макаров, А.А. Руденко, С.Г. Бежанов, С.А. Урюпин, А.П. Канавин, В.И. Емельянов, С.В. Алферов, С.Н. Хонина, С.В. Карпеев, А.А. Кучмижак, О.Б. Витрик, Ю.Н. Кульчин «Наномасштабные процессы кипения при одноимпульсной фемтосекундной лазерной абляции золотых пленок» // Письма в ЖЭТФ. Т. 101. В. 6. С. 428-432.

Выбор Санкт-Петербургского национального исследовательского университета информационных технологий, механики и оптики (Университет ИТМО) в качестве ведущей организации обусловлен тем, что Университет ИТМО является многопрофильной организацией, проводящей как теоретические, так и экспериментальные исследования по ультракороткому лазерному воздействию на металлические мишени. Университет ИТМО является организатором проходящей каждые три года международной конференции «Fundamentals of laser assisted micro- and nanotechnologies», посвященной лазерным методам получения наноструктур, в том числе, на металлических поверхностях.

1. М.А. Бондарев, Е.Ю. Перлин «Нестационарный двойной двухфотонно-однофотонный резонанс на межзонных переходах в кристаллах. I. Общие соотношения» // Оптика и спектроскопия. 2017. Т. 122, В. 4, С. 580-585.
2. М.А. Бондарев, Е.Ю. Перлин «Экситонные каналы многофотонных переходов в кристаллах» // Оптический журнал. 2016. Т. 83. В. 10, С. 3-6.
3. D.S. Ivanov, V.P. Lipp, A. Blumenstein, F. Kleinwort, V.P. Veiko, E.B. Yakovlev, V. Roddatis, M.E. Garcia, B. Rethfeld, J. Ihlemann, P. Simon «Experimental and Theoretical Investigation of Periodic Nanostructuring of Au with Ultrashort UV Laser Pulses near the Damage Threshold» // Physical Review Applied. 2015. V.4, P. 064006 (14 pages)

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

- получены результаты с помощью предложенного двухпараболического приближения для электронных теплоёмкости и теплового давления при электронных температурах до 55 000 К;
- определены характерные значения электронной температуры, при которых необходимо принимать во внимание изменение электронной структуры при нагреве электронов в расчётах электронной теплоёмкости и электрон-фононного теплообмена;
- определена теплопроводность электронов в рамках приближения времени релаксации с эффективными электронными массами, найденными в рамках выдвинутого двухпараболического приближения при нагревах до 55 000 К для алюминия, золота, железа, меди, никеля и тантала;
- получены методом функционала плотности вклады холодного сжатия и электронного нагрева в двухтемпературные уравнения состояния золота, меди и тантала в условиях

воздействия лазерным импульсом субпикосекундной длительности и интенсивностью 10^{11} - 10^{12} Вт/см²;

- показана заметная роль характеристик нагретых электронов при двухтемпературном моделировании рассмотренных на экспериментах задач о металлических пленках субмикронной толщины.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- разработана двухпараболическая модель электронной структуры металлов в двухтемпературном состоянии, позволяющая проводить аналитические оценки электронных термодинамических потенциалов электронного газа, эффективных частот электрон-электронных столкновений и электрон-фононного теплообмена;

- изучено влияние tg - eg расщепления электронной структуры и близких к валентным заполненным электронных зон на поведение электронных термодинамических и кинетических характеристик;

- рассмотрено поведение теоретического предела на растяжение с нагревом электронной подсистемы и при холодных ионах вплоть до потери устойчивости.

Значение полученных соискателем результатов **исследования для практики подтверждается** тем, что:

- получена база данных электронных коэффициентов твердых и жидких алюминия, железа, золота, меди, никеля, тантала для двухтемпературного моделирования электрон-ионной релаксации и гидродинамических задач распространения ударных волн, плавления, кипения и кавитации;

- показана важность аккуратного воспроизведения электронных свойств на двухтемпературной стадии для экспериментальной диагностики ударных волн, выходящих на тыльную (не подвергнутую облучению) поверхность субмикронных металлических мишеней;

- предложенная двухпараболическая модель электронных термодинамических свойств и теплопроводности, а также электрон-фононного теплообмена может быть использована для проведения оценок в области температур 10^4 - 10^5 К и плотностей $0.5 - 2 \rho_0$, где ρ_0 - равновесное значение плотности металла при нормальных условиях.

Результаты диссертационного исследования могут быть рекомендованы для использования в ФИАН им. П.Н. Лебедева РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша, ИАП РАН, НИЦ «Курчатовский институт» (г. Москва), ИПХФ РАН, ИФТТ РАН, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН (г. Черноголовка), РФЯЦ-ВНИИЭФ (г. Саров), РФЯЦ-ВНИИТФ им. академика Е.И. Забахина (г. Снежинск).

Достоверность результатов подтверждается следующими выводами:

- результаты расчёта термодинамических свойств электронов в металлах с помощью предложенной двухпараболической модели находятся в хорошем согласии с данными, полученными с помощью многократно проверенного метода функционала плотности;

- результаты для электронной теплопроводности находятся в удовлетворительном согласии с опубликованными в высокоцитируемых научных журналах данными расчётов на основе формулы Кубо-Гринвуда и квантовой молекулярной динамики для простых и благородных металлов в твердой и жидкой фазах;

- расчёты вкладов холодного сжатия/растяжения и электронного нагрева в уравнение состояния двухтемпературного вещества проведены на основе проверенного на согласие с

