

УТВЕРЖДАЮ:

Директор



доктор экономических наук

С. Ю. Лопарев

2017 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

всероссийского научно-исследовательского

института автоматики им. Н. Л. Духова

федерального государственного унитарного предприятия

о диссертационной работе Фокина Владимира Борисовича

«Континуально-атомистическая модель и ее применение для численного расчета воздействия одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импульса на металлы», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы».

Актуальность темы диссертационной работы

Диссертация Фокина Владимира Борисовича посвящена исследованию задачи, важной как для фундаментальной науки, так и для практических приложений – численному моделированию воздействия фемтосекундных лазерных импульсов (одиночных и двойных) на металлы с применением гибридного атомистического моделирования.

Воздействие лазерного излучения на вещество лежит в основе многих технологических процессов, в которых применяется лазерная обработка материалов, однако поведение вещества при таких процессах до сих пор окончательно не изучено. Воздействие фемтосекундного импульса на металл сопровождается быстрым нагревом и расширением мишени, при этом если лазерный импульс имеет длительность субпикосекундного диапазона, то металл необходимо рассматривать как двухтемпературную систему, в которой электронная и ионная подсистемы имеют различные температуры на различных этапах лазерного нагрева. Нагрев электронной подсистемы происходит практически мгновенно по сравнению с длительностью импульса – в течение фемтосекунд, затем более медленно, в течение десятков пикосекунд, тепловая энергия в процессе релаксации передается кристаллической решетке, вызывая ее прогрев.

Эти обстоятельства обосновывают повышенный интерес ученых к различным версиям гидротемпературных комбинированных моделей.

В данной работе представлена гибридная континуально-атомистическая модель, которая совмещает в себе достоинства метода молекулярной динамики и гидродинамического подхода. Данная модель позволяет проводить расчеты многофазных течений и атомистических процессов в неравновесном веществе без привлечения кинетических моделей фазовых переходов и моделей разрушения материалов.

Общая характеристика диссертации

Диссертационная работа изложена на 153 страницах машинописного текста и состоит из списка сокращений и обозначений, введения, обзора литературы, трех глав, заключения, трех приложений и списка литературы, содержащего 170 цитируемых источников. Диссертация включает 31 рисунок и 3 таблицы.

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертационной работы, формулируются ее цели, **научная новизна** и практическая значимость, перечислены положения, выносимые на защиту. Указано, что все представленные в диссертации результаты, их интерпретация, выводы и заключения сформулированы автором **лично**, а содержание диссертации и положения, выносимые на защиту, отражают **личный вклад** автора в опубликованные работы по теме диссертации.

Обзор литературы посвящен краткому анализу подходов, используемых для моделирования воздействия фемтосекундных лазерных импульсов на металлы, и обзору экспериментов по изучению лазерной абляции и модификации металла. По результатам обзора литературы приведены выводы, из которых следует актуальность темы диссертационной работы.

В **первой главе** автором приводится описание гибридной континуально-атомистической модели. В основе такой модели лежит модель Иванова–Жигилея (Ivanov D. S., Zhigilei L. V. Physical Review B. 68, 064114 (2003)), дополненная рядом усовершенствований. Во-первых, для электронов в металле в предлагаемой модели вместо уравнения теплопроводности решается уравнение энергии, которое учитывает перенос электронов вместе с ионами, при этом связь между энергией электронов и их температурой определяется согласно тепловой части модели Томаса–Ферми, – в этом состоит одно из отличий авторской версии модели от базовой модели Иванова–Жигилея. Уравнение энергии для электронов описывает изменение их энергии в нескольких физических процессах: при поглощении энергии от лазерного импульса, при энергообмене электронов с ионами, при их движении вместе с ионами (поскольку в модели обеспечивается квазинейтральность вещества), при электронной теплопроводности. Во-вторых, поглощение лазерного излучения в авторской версии модели рассчитывается путем решения уравнений Гельмгольца для электромагнитного поля, что позволяет моделировать воздействие на металл со сложным профилем плотности как одиночных, так и двойных импульсов. В-третьих, что также важно для моделирования воздействия излучения на металл с переменным профилем плотности, в

авторской версии модели коэффициенты электрон-фононного взаимодействия и электронной теплопроводности металла рассчитываются с использованием широкодиапазонных моделей, а электронная теплоемкость вычисляется по широкодиапазонному уравнению состояния. Для сравнения, в базовой модели коэффициенты электронной теплопроводности, электронной теплоемкости и электрон-фононного взаимодействия имеют простые (линейные) зависимости от температуры либо являются константами. В **Приложении А** диссертации приведен полный параллельный алгоритм моделирования, посредством которого реализована представленная модель, из которого следует еще одно отличие от модели Иванова-Жигиля: в диссертационной работе моделирование производится с переменным временным шагом, что позволяет обеспечить лучшее сохранение энергии молекулярно-динамической системы. Критерии расчета временного шага таковы, что временной шаг достигает своего минимального значения при высокой скорости роста электронной температуры при лазерном нагреве и при высоких скоростях ионов после релаксации.

Во второй главе излагаются результаты моделирования эволюции алюминиевой мишени под воздействием одиночного 100-фс лазерного импульса. Сравнение с другой теоретической моделью профилей температуры и давления в мишени после прохождения импульса показывает качественное соответствие профилей соответствующих величин. Приводится график зависимости глубины абляционного кратера от интенсивности импульса, показано удовлетворительное согласование расчетных значений с экспериментом. В **Приложении Б** в виде таблицы приведены точные значения глубины абляции алюминия после воздействия излучения с различной интегральной плотностью, рассчитанные с использованием авторской версии модели.

В третьей главе излагаются результаты моделирования поведения алюминиевой мишени под воздействием двойного 100-фс лазерного импульса. Приводится график зависимости глубины абляционного кратера от длительности задержки между импульсами, и эта зависимость аналогична зависимости, получаемой ранее в эксперименте – при задержках между импульсами более 10 пс глубина кратера монотонно уменьшается с ростом задержки, а при задержках более 50 пс глубина кратера становится меньше, чем для одиночного импульса. Обсуждаются два различных механизма ослабления динамики абляции вещества с ростом задержки между импульсами. В **Приложении В** в виде таблицы приведены точные значения глубины абляции алюминия после воздействия двойного импульса с различным временным промежутком между импульсами.

Выводы, приведенные автором в **заключении** диссертации, кратко излагают основные результаты, полученные автором в диссертационной работе, и находятся в соответствии с научными положениями. Заключение завершается списком опубликованных работ.

Замечания по диссертационной работе

Диссертационное исследование имеет следующие недостатки:

1. Во Введении приводятся уравнения 7,8 модели Иванова-Жигелея, но не объясняется структура коэффициента электронно-ионного обмена, а именно суммирование по шагам интегрирования уравнения теплопроводности (небольшое пояснение дано только в следующей главе в примечании на стр. 78).

2. В главе 2 на рис. 2.2. непонятны два результата: расхождение температур в волне разгрузки рассчитанных по ГиКАМ и ГДМ, и положение фронта плавления в ГДМ расчете, которое соответствует $T_m = 750$ К при давлении $P = -1.8$ ГПа, что представляется слишком значительным падением температуры плавления с растяжением.

3. Там же, в главе 2 при обсуждении рис. 2.2. на стр. 86 предполагается, что «При растяжении амплитуда ВР в ГДМ получается больше, что можно ассоциировать с процессом размягчения кристалла при значениях температур, лежащих около кривой плавления [165], что не учитывается в ГиКАМ.» Это объяснение непонятно, так как не ясно, что такое «размягчение кристалла», и почему оно не учитывается в МД расчете?

4. В главе 3 в разделе 3.3.5. (стр. 102 и далее) при обсуждении задержки 100 пс между импульсами говорится, что закрытие пор второй ударной волной, приходящей из плюма, вызывает «дополнительное плавление мишени, возникающее из-за того, что осаждающиеся обратно на мишень слои имеют температуру, превышающую температуру плавления алюминия (ср. толщину расплавленного слоя при 350 пс и 1000 пс, рис. 3.7 (а))». Однако аналогичное распространение фронта плавления вглубь также наблюдается и при меньших энергиях импульса показанных на рис. 3.4, 3.5, и 3.6, где осаждение материала было незначительным. Во всех этих случаях распространение фронта плавления в глубину контролируется градиентом температуры и кинетикой плавления, зависящей от степени локального перегрева кристалла в МД расчете.

Важный результат МД расчетов с двумя импульсами состоит в том что, как видно из рис. 3.7 (б), температура жидкости окружающей поры до прихода 2-ой ударной волны (УВ) незначительно отличается температуры более глубоких слоев расплава. Однако с прохождением 2-ой УВ температура расплава вокруг схлопывающихся пор возрастает на несколько тысяч градусов. Такой значительной рост температуры можно связать только с нагреванием, вызванным прохождением УВ со скоростью примерно 1 км/с по пористой среде с большой степенью пористости. Таким образом, открывается возможность исследования ударных явлений в высокопористых пенах металлов, формируемых первичным фемтосекундным лазерным импульсом.

Отмеченные недостатки не являются принципиальными и не снижают значимости полученных результатов. Все поставленные в диссертационной работе цели достигнуты и соответствуют положениям, выносимым на защиту.

Диссертационная работа Фокина Владимира Борисовича «Континуально-атомистическая модель и ее применение для численного расчета воздействия одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импульса на металлы» представляет собой законченное научное исследование на **актуальную** тему, и содержит **новые** важные результаты, которые **могут применяться для решения различных теоретических и прикладных задач физики плазмы** в следующих организациях: ИПХФ РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ИСМАН, РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ, ИАП РАН, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН. **Достоверность** результатов показана путем их сравнения с экспериментом. Материалы диссертации **опубликованы** в 6 (шести) статьях в научных журналах, рекомендованных ВАК для опубликования материалов диссертационных исследований, включая четыре статьи в журналах, индексируемых базой данных «Web of Science». Материалы диссертации **докладывались** на более чем двадцати всероссийских и международных конференций, начиная с 2010 года.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

Результаты представляются достоверными и научно обоснованными, обладают научной новизной, теоретической и практической значимостью. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 г., а её автор, Фокин Владимир Борисович, заслуживает присвоения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы».

Доклад по материалам диссертационной работы был заслушан и обсужден на научном семинаре Отдела компьютерного материаловедения Федерального государственного унитарного предприятия «Всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Н.Л. Духова» Государственной корпорации «Росатом», что зафиксировано в протоколе № 7 от 10 октября 2017 г.

Отзыв подготовлен кандидатом физико-математических наук (специальность 01.04.14 – теплофизика, ведущим научным сотрудником отдела «Компьютерного материаловедения» ФГУП ВНИИА, Жаховским Василием Викторовичем (Россия, 127055, Москва, Сущевская ул., д. 22, тел. +7-964-7998254, E-mail: 6asilz@gmail.com).

Кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник

(Жаховский В.В.)

30.11.2017

Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова» Государственной корпорации «Росатом».
127055, г. Москва, ул. Сущевская, д. 22, <http://vniia.ru/>, e-mail: vniia@vniia.ru, тел. (499) 978-78-03

Личную подпись
т. Жаховского В.В.
Заверяю. Нач. канцелярии
ФГУП «ВНИИА»

