

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научной работе

ФГАОУВО НИУ ИТМО

д.т.н., профессор

Никифоров В.О./

2 «14» февр 2018г.

ОТЗЫВ

ведущей организации

на диссертационную работу Мигдала Кирилла Петровича

«Термодинамические и кинетические свойства металлов с возбуждённой
электронной подсистемой» на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук

по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника

Актуальность темы диссертации

В диссертации Мигдала К.П. проведён теоретический анализ основных термодинамических и кинетических характеристик электронов вблизи поверхности металла, подвергнутой умеренному воздействию фемтосекундного лазерного импульса. Эта задача представляет научный интерес, так как расчёт и анализ поведения этих характеристик необходим для описания ряда процессов, протекающих при интенсивном лазерном воздействии, таких как, например, термомеханическая абляция, происходящих после передачи энергии от нагретых электронов к ионам приповерхностного слоя и вглубь металла. Стандартный анализ процессов сверхкороткого лазерного воздействия проводится в рамках хорошо известной двухтемпературной модели. В течение двухтемпературной стадии, длящейся в металлах от одной до нескольких пикосекунд, распространение энергии через электронную подсистему происходит со скоростью выше скорости звука, что приводит к возникновению механических напряжений в области нагретого слоя. С другой стороны, передача энергии от электронов к ионам может приводить к плавлению, испарению, образованию пузырьков внутри прогретого слоя. Сочетание акустической разгрузки возникших напряжений и изменения механических свойств за счёт нагрева ионов вблизи поверхности приводит к её множественным изменениям, включающим откол поверхностного слоя, образование кратера или наноструктур, в зависимости от режима лазерного облучения. Эти процессы и явления играют большую роль в прикладных исследованиях в области наноплазмоники, медицины, информационных технологий. Расчёт характеристик электронной подсистемы (электронной теплоёмкости, электрон-фононного взаимодействия), и закономерностей их изменения в результате изменения

температуры и плотности электронов при световом воздействии необходим для моделирования процессов после передачи энергии от горячих электронов и является актуальной задачей. Её решение важно как для понимания физики процессов и явлений при ультракоротком воздействии излучения на металлы, так и для использования полученных теоретических предсказаний на практике, в интенсивно развивающейся лазерной технологии обработки материалов.

Сказанное определяется актуальность темы работы.

Структура и основные результаты диссертации

Диссертация К.П. Мигдала включает в себя введение, список использованных сокращений, пять глав, заключение, список публикаций автора и список использованных источников, содержащий более 250 наименований.

Введение содержит обоснование актуальности, научной новизны и практической значимости поставленной задачи. Сформулированы цели исследования и указаны факторы, определяющие достоверность сделанных в работе выводов.

В первой главе проведён обзор опубликованных в течение последних десятилетий работ, посвящённых изучению лазерной абляции, возбуждению ударных волн в облученной лазерным импульсом мишени и отклика нагретых электронов в течение двухтемпературной стадии. Отдельное внимание удалено экспериментальным работам, среди которых выделены группы, имеющие непосредственное отношение к теме исследования. Проведен критический анализ модели двухтемпературной гидродинамики, в течение 40 лет являющейся одним из основных инструментов изучения свойств вещества при сверхкоротком воздействии. Выполнен обзор работ, содержащих расчёты с использованием методов функционала плотности и молекулярной динамики. Рассмотрены также расчёты кинетических свойств электронов с помощью уравнения Больцмана, справедливого в полуклассическом приближении.

В второй главе автором описываются допущения, лежащие в основе предложенного двухпараболического приближения, построенного на основе известной плотности электронных состояний и предназначенного для описания термодинамики электронов без привлечения расчётов «из первых принципов». Приведены примеры использования данного приближения для ряда металлов, демонстрирующие хорошее согласие с данными метода функционала плотности, в отличие от низкотемпературных асимптотик модели Ферми-жидкости, применимость которых ставится под вопрос.

В третьей главе исследуется влияние изменения объёма в результате нагрева на двухтемпературной стадии и прохождения ударных волн и волн

разрежения после электрон-ионной релаксации. Методом функционала плотности исследовано влияние сжатия/растяжения металлов гидростатическим давлением в диапазоне от теоретического предела на растяжение до 100 ГПа, включая случай, когда учитывается изменение положения и населённости зон при росте электронной температуры.

Четвёртая глава полностью посвящена расчётом электронной теплопроводности и электрон-фононного теплообмена. В ней приведены вывод выражения для парциальных вкладов столкновений электронов разных зон между собой в рамках приближения времени релаксации и указаны требования на применимость использованного метода. Приводятся выражения для применяемых в работе электронных экранировок и сделаны выводы, определяющие их выбор. Проведено сравнение результатов для электронной теплопроводности с недавними работами, где та же величина определялась для простых и благородных металлов с помощью формулы Кубо-Гринвуда. Приведены основные выражения коэффициента электрон-фононного теплообмена в рамках модели, построенной на основе известной и хорошо зарекомендовавшей себя теории Каганова-Лифшица-Танатарова.

В пятой главе приведены результаты апробации построенной автором модели электронных характеристик на примере двух металлов и двух геометрий мишени, соответствующих разным решениям тепловой задачи. Показано хорошее согласие данных двухтемпературного гидродинамического моделирования с результатами экспериментов, имеющимися в литературе.

В заключении приводятся основные научные результаты работы, находящиеся в соответствии с поставленными целями диссертации.

Замечания.

По работе имеются замечания.

1) 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, 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.

2) 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.

3) 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 мишней, либо для одинаковых мишней из разных металлов.

Сделанные замечания носят скорее рекомендательный характер, не снижают научную и практическую ценность работы, не сказываются на её результатах и не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы К.П. Мигдала.

Научная новизна результатов исследований

Научная новизна, обоснованность и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации не вызывает сомнений.

К утверждениям, содержащимся в диссертации К.П. Мигдала, и составляющим её **научную новизну** относятся:

- 1) Введение двухпараболического приближения, содержащего эффективные массы электронов валентных зон и зон проводимости. Определение с ее помощью поведения электронного давления, теплоёмкости и теплопроводности, а также электрон-фононного теплообмена;
- 2) Установление влияния изменения зонной структуры металлов на электронную теплоемкость и электрон-фононный теплообмен при нагревах электронов до нескольких десятков тысяч кельвин;
- 3) Построение модели, учитывающей вклад нагретых электронов в уравнение состояния вещества для давлений от -30 до 100 ГПа и температур до 55 000 К, и выполнение конкретных расчётов на её основе.

Научная значимость работы заключается в построении модели термодинамических и кинетических характеристик, пригодной для описания возбужденной электронной подсистемы для металлов с различной зонной структурой и в области температур, ограниченных порогом ионизации.

Практическая значимость диссертационной работы Мигдала К.П. определяется возможностью её применения для расчёта свойств вещества, нагретого лазерным импульсом, методами двухтемпературной и классической гидродинамики. Её 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, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, НИЦ «Курчатовский институт», РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ им. Е.И. Забабахина.

Достоверность и обоснованность полученных в диссертации результатов определяется использованием методов расчётов из первых принципов, корректных аналитических моделей и согласием полученных выводов с данными экспериментальных исследований. Обоснованность и достоверность представленных результатов подтверждена публикациями в российских и зарубежных рецензируемых научных журналах и многочисленными выступлениями на всероссийских и международных конференциях.

Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации. Содержание диссертационной работы Мигдала К.П. соответствует специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Апробация работы проведена на 18 российских и международных конференциях.

Список публикаций Мигдала К.П. по теме диссертации содержит 14 работ в изданиях из перечня ВАК.

Личный вклад Мигдала К.П. в диссертационной работе состоит в самостоятельном получении её результатов, их обработке и написании текста диссертации, включая формулировку положений, выносимых на защиту.

Заключение по работе

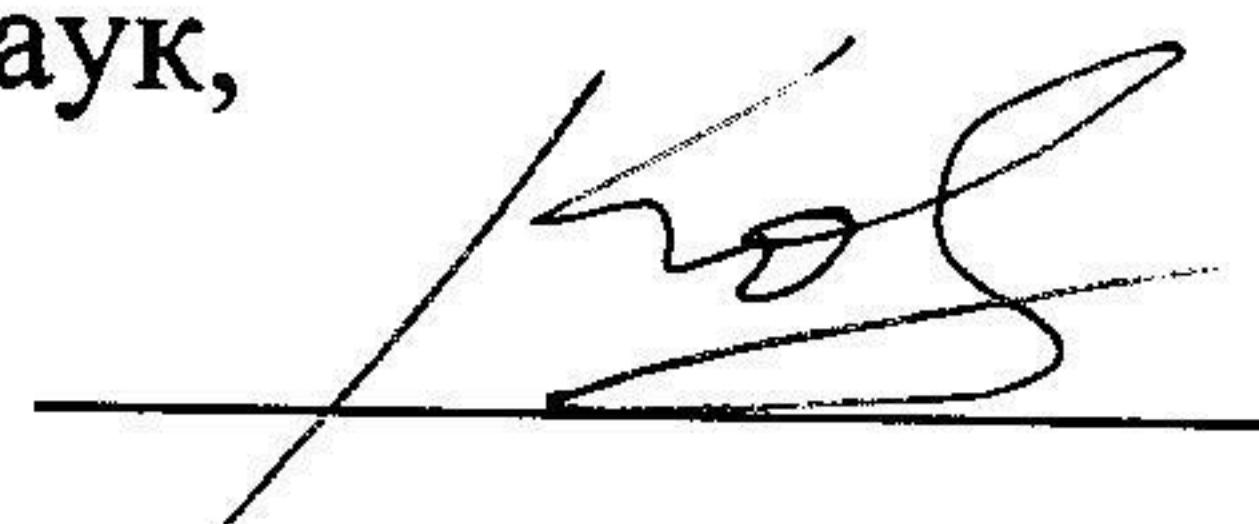
Работа выполнена на высоком научном уровне, результаты работы являются новыми и адекватно представлены в докладах на конференциях и публикациях в научных журналах.

Диссертация К.П. Мигдала представляет собой законченную научно - исследовательскую работу, удовлетворяет требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (ред. от 28.08.2017), а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени.

Результаты исследования доложены диссидентом, а отзыв рассмотрен и утверждён на семинаре кафедры Оптической физики и современного естествознания Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики», что зафиксировано в протоколе № 1 от 7 февраля 2018 г.

Отзыв составил доцент кафедры Оптической физики и современного естествознания Университета ИТМО, к.ф.-м.н., с.н.с. Комолов Владимир Леонидович (199034, Санкт-Петербург, Биржевая линия, д. 14, тел. (812)457-1542, e-mail: vkomolov@gmail.com).

Доцент, кандидат физико-математических наук,

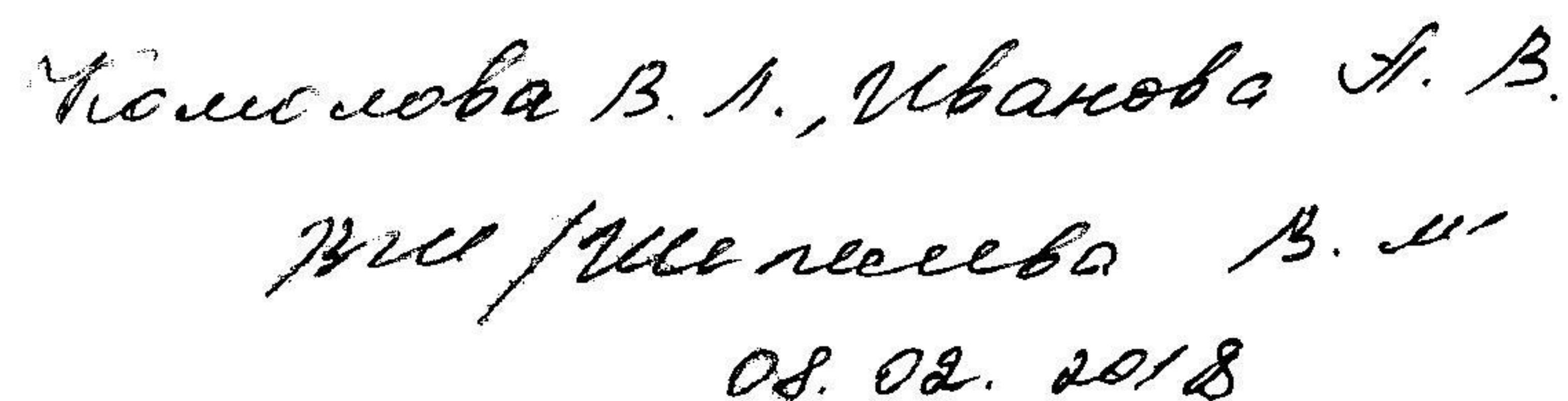


В.Л. Комолов

Заведующий кафедрой Оптической физики
и современного естествознания Университета ИТМО
кандидат физико-математических наук



А.В. Иванов



Комолова В.Л., Иванова А.В.
Михалесева В.И.
08.02.2018

Сведения о ведущей организации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики» (Университет ИТМО)

197101, Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, д. 49,
тел.: (812) 232-97-04 | факс: (812) 232-23-07
od@mail.ifmo.ru | www.ifmo.ru