

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.110.02 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 20.12.2017 протокол № 19

О присуждении Фокину Владимиру Борисовичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Континуально-атомистическая модель и ее применение для численного расчета воздействия одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импульса на металлы» в виде рукописи по специальности 01.04.08 – физика плазмы, принята к защите 04.10.2017 г., протокол № 13, диссертационным советом 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, <http://www.jiht.ru>, (495) 485–83–45), утвержденного Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 11.04.2012 г. № 105/нк.

Соискатель Фокин Владимир Борисович 1987 года рождения, в 2010 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» (МФТИ).

В 2013 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ФГБУН ОИВТ РАН).

Диссертация выполнена в Лаборатории № 1.2.2.4 – моделирования свойств материалов НИЦ-1 ТЭС Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Работает младшим научным сотрудником Лаборатории № 1.2.2.4 – моделирования свойств материалов НИЦ-1 ТЭС Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук Левашов Павел Ремирович, заведующий лабораторией № 1.2.2.4 – моделирования свойств материалов НИЦ-1 ТЭС Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

– гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук Иногамов Наиль Алимович, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (ФГБУН ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН), сектор плазмы и лазеров, ведущий научный сотрудник;

– гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук Красюк Игорь Корнелиевич, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (ФГБУН ИОФ им. А.М. Прохорова РАН), отдел взаимодействия когерентного излучения с веществом, заведующий отделом, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация: Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА им. Н.Л. Духова»), г. Москва, в своем положительном заключении, составленном ведущим научным сотрудником от-

дела компьютерного материаловедения ФГУП «ВНИИА им. Н.Л. Духова», кандидатом физико-математических наук Жаховским Василием Викторовичем (отзыв 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., и утвержден директором ФГУП «ВНИИА им. Н.Л. Духова», доктором экономических наук Лопаревым Сергеем Юрьевичем), указала, что диссертация Фокина В.Б. представляет собой завершённую научно-исследовательскую работу на актуальную тему, и содержит новые важные результаты, которые могут применяться для решения различных теоретических и прикладных задач физики плазмы; результаты представляются достоверными и научно обоснованными, обладают научной новизной, теоретической и практической значимостью. Работа Фокина В.Б. отвечает требованиям, предъявляемым пунктом 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней №842 от 24.09.2013 г.

Соискатель имеет 35 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 6 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях из списка ВАК Минобрнауки РФ:

1. Fokin V. B., Povarnitsyn M. E., Levashov P. R. *Simulation of ablation and plume dynamics under femtosecond double-pulse laser irradiation of aluminum: Comparison of atomistic and continual approaches* // Applied Surface Science. 2017. Vol. 396. P. 1802–1807.
2. Minakov D., Levashov P., Fokin V. *Vibrational spectrum and entropy in simulation of melting* // Computational Materials Science. 2017. Vol. 127. P. 42–47.
3. Povarnitsyn M. E., Fokin V. B., Levashov P. R. *Microscopic and macroscopic modeling of femtosecond laser ablation of metals* // Applied Surface Science. 2015. Vol. 357. P. 1150–1156.

4. Povarnitsyn M. E., Fokin V. B., Levashov P. R., Itina T. E. *Molecular dynamics simulation of subpicosecond double-pulse laser ablation of metals* // Physical Review B. 2015. Vol. 92. P. 174104.
5. Фокин В. Б., Поварницын М. Е., Левашов П. Р., Хищенко К. В. *Континуально-атомистическое моделирование лазерной абляции алюминия* // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2014. Т. 4, № 1. С. 60–65.
6. Фокин В. Б., Поварницын М. Е., Левашов П. Р. *Континуально-атомистическое моделирование абляции и образования наночастиц при воздействии фемтосекундного лазерного импульса на тонкие фольги* // Вестник Казанского технологического университета. 2014. Т. 17, № 22. С. 55–58.

На автореферат поступили отзывы:

1. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» (МФТИ) (профессор департамента молекулярной и биологической физики, доктор физико-математических наук Ткаченко Светлана Ивановна) – отзыв положительный, с замечанием:
«С упомянутыми преимуществами метода молекулярной динамики связан недостаток использования континуальной модели, описывающей эволюцию электронной подсистемы: при сильной фрагментации мишени может оказаться, что вещество занимает не полностью всю ячейку вычислительной сетки, в этом случае расчет поглощения лазерного излучения согласно применяемой в работе модели окажется неточным, поскольку неверным окажется предположение о том, что и вещество, и «электронная жидкость» заполняют ячейку равномерно. Такая сильная фрагментация получена, например, при моделировании

- взаимодействия алюминиевой мишени с двойным лазерным импульсом, результаты которого приведены на рис. 3 и 4 автореферата»;
2. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (ФГБУН ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН) (научный сотрудник сектора плазмы и лазеров, кандидат физико-математических наук Хохлов Виктор Александрович) – отзыв положительный, с замечаниями:
«... можно отметить непонятные и неправильные утверждения, как, например, “из-за изотропии идеальный электронный газ может влиять на электронную подсистему”, “воздействие электронного давления более сильно выражено в случае более толстой пленки”. Кроме указанных выше замечаний, мое основное замечание к автореферату диссертации состоит в том, что непонятно, как учитывалось давление горячего электронного газа»;
 3. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт автоматизации проектирования Российской академии наук (ФГБУН ИАП РАН) (старший научный сотрудник отдела вычислительных методов и турбулентности, кандидат физико-математических наук Шепелев Вадим Владимирович) – отзыв положительный, с замечаниями:
«Интересно было бы в дальнейшем увидеть расширение представленной автором модели на многомерный случай, а также уточненный расчет траектории свободной границы. Из замеченных недостатков в оформлении я бы отметил большое количество положений (достаточно 2-3) в заключении и ошибки в нумерации списков в автореферате»;
 4. Федеральное государственное унитарное предприятие «российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики» (ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ») (Ведущий научный сотрудник Института лазерно-физических исследо-

ваний ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ», кандидат физико-математических наук Якутов Б.П.) – отзыв положительный, с замечаниями:

«Не расшифровано, что подразумевается под “значительными вычислительными ресурсами”, которые требуются для методики ГиКАМ. На защиту выносятся трёхкратное увеличение электронной температуры плюма, но нигде в автореферате не приводится ни температура ионов, ни электронов, а также давление плазмы во время воздействия. В работе подробно сравниваются модели ГиКАМ и ГДМ, но нет акцентированного вывода из этого сравнения.»

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что:

– д.ф.-м.н. Иногамов Н.А. является ведущим ученым в области моделирования взаимодействия лазерного излучения с конденсированным веществом, исследования свойств электронной подсистемы металлов, моделирования абляционного факела, возникающего в результате воздействия фемтосекундных лазерных импульсов на металлы, проведения гидродинамических и молекулярно-динамических расчетов металлов, их неравновесных фазовых состояний и фазовых переходов, а также моделирования веществ при экстремальных условиях (при высоких температурах и давлениях, а также в сильных внешних полях);

1. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky. “Simulations of short pulse laser-matter interaction in case of tight focusing onto thin film”. *Lobachevskii J. Math.*, 38(5), 914–920 (2017)
2. С.И. Анисимов, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, С.А. Мурзов, В.А. Хохлов. «О формировании и кристаллизации жидкой струи, возникающей при воздействии на пленку остросфокусированным лазерным пучком». *Квантовая электроника*, 47(6), 509–521 (2017)

3. S.I. Ashitkov, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, P.S. Komarov, M.B. Agranat, G.I. Kanel. “The behavior of iron under ultrafast shock loading driven by a femtosecond laser”. AIP Conf. Proc., 1793, 100035 (2017)

– д.ф.-м.н. Красюк И.К. является ведущим ученым в области экспериментального исследования веществ при экстремальных условиях (высоких температурах и давлениях), возникающих при воздействии мощного лазерного излучения (в том числе нано- и пикосекундных импульсов такого излучения) на мишень, а также экспериментального изучения процессов, сопутствующих лазерной абляции вещества.

1. I.K. Krasnyuk, P.P. Pashinin, A.Yu. Semenov, K.V. Khishchenko, V.E. Fortov. “Study of extreme states of matter at high energy densities and high strain rates with powerful lasers”. Laser Physics, 26(9), 094001 (2016)
2. I.K. Krasnyuk, A.Yu. Semenov, I.A. Stuchebryukhov, K.V. Khishchenko. “Experimental verification of the ablation pressure dependence upon the laser intensity at pulsed irradiation of metals”. Journal of Physics Conference Series, 774, 012110 (2016)
3. I.K. Krasnyuk, A.Yu. Semenov, I.A. Stuchebryukhov, R.S. Belikov, K.V. Khishchenko, O.N. Rosmej, T. Rienecker, A. Schoenlein, M. Tomut. “Investigation of the spall strength of graphite using nano- and picosecond laser pulses”. Journal of Physics Conference Series, 653, 012002 (2015)

Выбор Федерального государственного унитарного предприятия «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА им. Н.Л. Духова») в качестве ведущей организации обусловлен тем, что ФГУП «ВНИИА им. Н.Л. Духова» является многопрофильной организацией, проводящей обширные исследования, в том числе в области гидродинамического и молекулярно-динамического моделирования быстропротекающих процессов как в плазме, так и в конденсированном веществе. В отделе компьютерного материаловедения ФГУП «ВНИИА им. Н.Л. Духова» производится численное моделирование: воздействия пучков

лазерного излучения на вещество, поведения вещества при ударно-волновых воздействиях, что близко к тематике диссертационного исследования соискателя.

1. Мигдал К.П., Покаташкин П.А., Янилкин А.В. «Исследование плавления γ -фазы урана методами квантовой и классической молекулярной динамики». Теплофизика высоких температур. Т. 55. № 5. С. 725–731 (2017)
2. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. “Numerical simulation of the effect of laser radiation on matter in an external magnetic field”. Journal of Physics: Conference Series. 830(1). P. 012124 (2017)
3. I. Kruglov, O. Sergeev, A. Yanilkin, A.R. Oganov. “Energy-free machine learning force field for aluminum”. Scientific reports. 7. P. 8512 (2017)

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

Разработана гибридная континуально-атомистическая модель для изучения воздействия на металлическую мишень фемтосекундных лазерных импульсов с энергией, многократно превышающей порог абляции.

Предложен метод расчета глубины абляционного кратера, являющегося результатом воздействия двух и более ультракоротких лазерных импульсов на металл, который учитывает зависимость оптических и транспортных свойств металла от его термодинамических параметров.

Доказана перспективность использования предложенного метода – гибридной континуально-атомистической модели – для изучения эволюции металла под воздействием ультракоротких лазерных импульсов на атомистическом уровне.

Новых понятий и терминов не вводилось.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

Применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использован

метод молекулярной динамики для ионной подсистемы в совокупности с решением уравнения энергии для электронной подсистемы как сплошной среды, при этом учитываются оптические и транспортные электронные свойства металла согласно широкодиапазонным моделям, являющимся аппроксимацией между конденсированным состоянием металла и плазмы.

Изложены аргументы, обосновывающие зависимость глубины абляции от интенсивности импульса (при одноимпульсном воздействии) и от временного промежутка между импульсами (при двухимпульсном воздействии).

Раскрыто влияние плазменного плюма, возникающего после воздействия первого лазерного импульса, на динамику абляции вторым лазерным импульсом при двухимпульсном воздействии в зависимости от временного промежутка между импульсами от 0 до 200 пс.

Изучены зависимости глубины абляции алюминия от интенсивности лазерного импульса в случае одноимпульсного воздействия и от временного промежутка между импульсами в случае двухимпульсного воздействия.

Проведена модернизация модели Иванова–Жигиля, впервые предложенной в 2003 г., с целью ее адаптации для расчета воздействия на металл фемтосекундного лазерного импульса с интенсивностью, во много раз превышающей порог абляции, и для расчета воздействия нескольких импульсов.

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

Разработана и внедрена новая расчетная методика на основе гибридной континуально-атомистической модели (молекулярная динамика в совокупности с уравнением, описывающим электронную жидкость). Результаты работы могут применяться в следующих организациях: ИПХФ РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ИСМАН, РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ, ИАП РАН, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, ФГУП «ВНИИА им. Н.Л. Духова».

Определена электронная температура продуктов абляции первого лазерного импульса после воздействия на них второго лазерного импульса в зависимости от времени задержки между импульсами.

Создан параллельный алгоритм, посредством которого реализована гибридная континуально-атомистическая модель.

Представлено сравнение рассчитанных данных по глубине лазерной абляции алюминия с экспериментом, а также сами значения глубины абляции алюминия в зависимости от параметров лазерного импульса в виде графиков и таблиц.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

Теория, использованная в диссертации, приводит к результатам, находящимся в согласии с экспериментальными и справочными данными по теме диссертации.

Идея базируется на методе молекулярной динамики для ионной подсистемы металла.

Использованы данные различных теорий, а также экспериментальные данные, полученные ранее по рассматриваемой тематике.

Установлено количественное совпадение с экспериментальными данными по глубине абляции и коэффициенту отражения алюминия в зависимости от интенсивности лазерного импульса, а также термодинамических параметров алюминиевой мишени с данными ударно-волновых экспериментов для алюминия в пределах погрешности измерений.

Использованы суперкомпьютерные вычислительные комплексы (до 1000 процессорных ядер), современный вычислительный пакет молекулярно-динамического моделирования (LAMMPS), современные средства разработки и отладки программ, а также современные методики обработки и визуализации больших объемов информации.

Личный вклад соискателя состоит в выполнении всех расчетов с применением гибридной континуально-атомистической модели и интерпретации

полученных данных. На основании результатов исследования автором сформулированы и обоснованы выводы и заключения, вошедшие в диссертацию. Результаты работы докладывались автором на 16 международных и 5 российских конференциях.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, соответствует критериям пункта 9, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г.

На заседании от 20.12.2017 г. диссертационный совет принял решение присудить Фокину Владимиру Борисовичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 31 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, участвовавших в заседании, из 24 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за – 23, против – 0, недействительных бюллетеней – 1.

Зам. председателя диссертационного совета Д 002.110.02

д.ф.-м.н., профессор

Андреев Н.Е.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.110.02

к.ф.-м.н.

Васильев М.М.



М.П.

20.12.2017 г.