

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, jiht.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 институту 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: vasiliev@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 (Web of Science, 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. Вклад диссертанта - 4 страницы из 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. Вклад автора - 4 страницы из 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., Initsky 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 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 электронным зонам 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. Черногоровка), РФЯЦ-ВНИИЭФ (г. Саров), РФЯЦ-ВНИИТФ им. академика Е.И. Забабахина (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 экспериментом метода функционала плотности, реализованного в открытых и верифицированных вычислительных кодах ABINIT, VASP и Elk.
- применение предложенной автором модели термодинамических характеристик для двухтемпературного гидродинамического моделирования задач о нагреве электронов в тонких металлических пленках показало хорошее согласие результатов модели с экспериментами и молекулярно-динамическими расчётами;

Личный вклад соискателя состоит в самостоятельном получении, обработке и интерпретации результатов диссертации. Текст диссертации, включая формулировку основных результатов и положений, выносимых на защиту, а также представление результатов расчётов и выводов, написан автором лично.

Апробация результатов диссертационной работы проведена на более чем 10 российских и международных конференциях, в которых соискатель принимал личное участие. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены при значительном личном участии автора.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям пункта 9, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней ВАК РФ, утверждённым постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842.

На заседании от 21.03.2018 г. диссертационный совет принял решение присудить Мигдалу К.П. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 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, участвовавших в заседании, из 31 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 22, против 0, недействительных бюллетеней 1.

Зам. председателя диссертационного совета Д 002.110.02

д.ф.-м.н., профессор

Андреев Н.Е.

ВРИО ученого секретаря диссертационного совета Д 002.110.02

д.ф.-м.н., профессор

Василяк Л.М.

М.П.



М.П.

21.03.2018г.