

“УТВЕРЖДАЮ”



Проректор НИТУ “МИСиС”
профессор

М.Р. Филонов

“25” июня 2015 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации - Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»»

на диссертационную работу Жилиева Петра Александровича «Атомистическое моделирование воздействия импульсных энерговкладов на конденсированную фазу: нагрев электронов и откольное разрушение», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности - 01.04.07 физика конденсированного состояния

Исследование вещества в экстремальных состояниях при больших давлениях и температурах представляет существенный интерес. Воздействие интенсивных ударных волн и ультракоротких лазерных импульсов позволяет получать недоступные для статических экспериментов значения давления и температуры. Высокоэнергетическое воздействие на материю приводит не только к значительным величинам давления и температуры, но и к высоким скоростям деформации. Механический отклик некоторых типов материалов при высокоскоростном деформировании может кардинально отличаться от случая статической нагрузки. Для целого ряда металлов экспериментально наблюдается пороговая скорость деформирования, после которой идет резкий рост напряжения течения. Аналогичное поведение характерно и для прочностных свойств. Так, для бездефектного монокристалла алюминия увеличение скорости деформирования в ударно-волновых экспериментах

приводит к росту откольной прочности.

Высокие скорости деформирования достигаются не только в ударно-волновых экспериментах, но при воздействии ультракоротких лазерных импульсов. Модификация поверхности при облучении происходит за счет практически мгновенного (порядка 1 фс) нагрева тонкого слоя (порядка 100 нм) поверхности твердого тела. Основная часть лазерной энергии поглощается электронной подсистемой. Состояние в этом случае характеризуется двумя температурами - температурой электронов T_e и температурой ионов T_i . Так как время поглощения лазерного импульса сравнимо или меньше времени жизни неравновесной системы с возбужденными электронами, то двухтемпературная стадия определяет дальнейшую динамику системы. Особенно важным параметром является двухтемпературный коэффициент теплопроводности электронной подсистемы, который определяет толщину прогретого слоя и может на порядок превосходить свое равновесное значение. Входным параметром для двухтемпературной модели лазерной абляции (выноса вещества с поверхности) является коэффициент электронной теплопроводности

Цикл работ и диссертация П.А. Жилиева посвящены комплексному исследованию механизмов откольного разрушения монокристалла алюминия и расчету электронных свойств алюминия и золота в двухтемпературном состоянии. С этой целью автор применил методы молекулярной динамики и теории функционала плотности, хорошо зарекомендовавшие себя для теоретического описания вещества на атомном уровне.

Диссертационная работа состоит из введения и четырех глав, выводов и списка литературы. Объем диссертации: 104 страницы, включая 30 рисунков, оглавление и список литературы из 137 наименований.

Первая глава является обзорной. Автор критически и детально анализирует большое число публикаций, связанным с атомным моделированием высокоскоростной деформации. Приведен обзор основных работ, в которых использовалась формула Кубо-Гринвуда для теории

функционала плотности.

Вторая глава посвящена исследованию пластической деформации и разрушению при высокоскоростном нагружении. Автор предложил оригинальную модель откола, в которой произведен учет дефектной подструктуры, сгенерированной первичной волной сжатия. Получена зависимость откольной прочности от скорости деформирования для монокристалла алюминия. Проведено сравнение с результатами ударно-волновых экспериментов и исследовано влияние температуры на откольную прочность.

В третьей главе автор обсуждает давление горячих электронов в двухтемпературном состоянии для ГЦК алюминия и золота и рассматривает вопрос о разделении электронов на связанные и свободные (локализованные и делокализованные).

Четвертая глава посвящена расчету коэффициента теплопроводности в двухтемпературном состоянии. Диссертант верифицировал метод расчета теплопроводности на примере жидкого алюминия при нормальной плотности и температуре 1000 К. Далее был рассчитан двухтемпературный коэффициент теплопроводности при фиксированной температуре ионов T_i . Автор провел расчеты для алюминия при $T_i = 2000$ К и для золота при $T_i = 300$ К.

Большой заслугой автора можно считать то, что впервые был рассчитан коэффициент электронной теплопроводности в двухтемпературном случае для температур электронов порядка фермиевских.

Практическая ценность полученных в диссертационной работе результатов заключается в том, что зависимость откольной прочности от скорости деформирования может быть использована в кинетических моделях пластической деформации и разрушения. Значения двухтемпературной теплопроводности необходимы для двухтемпературных моделей лазерной абляции и ионного трека. Одновременно эта работа вносит существенный вклад в понимание механизмов высокоскоростного разрушения и физики

двухтемпературного состояния вещества.

В качестве замечаний можно отметить следующее:

1. В части диссертации, связанной с откольным разрушением, рассматривается только монокристалл алюминия. Следовало бы рассмотреть и монокристаллы других металлов.
2. Не проведена достаточная проверка предложенной в работе модели откола. Следовало бы сравнить её результаты с моделью «мишень-ударник» в области высоких скоростей деформации.
3. Недостаточно внимания уделено влиянию температуры на откольную прочность монокристалла алюминия. Рассмотрены только два крайних случая: относительно низкие температуры (100 K) и температура плавления. Следовало бы провести исследования также при температурах, которые лежат в промежуточной области.
4. Не была рассчитана плотность дефектов образца монокристалла алюминия. Рассчитанная плотность дефектов могла бы быть сопоставлена с последними данными по фемтосекундной рентгеновской дифракции в ударно-волновых экспериментах.
5. Диссертант не объясняет, почему коэффициент двухтемпературной теплопроводности был рассчитан только для жидкой фазы алюминия и по какой причине отсутствуют расчеты для ГЦК фазы при конечных температурах.
6. Диссертант не приводит оценок времени электрон-электрон и электрон-ионной релаксации, которые могли бы быть получены из его данных по двухтемпературному коэффициенту теплопроводности. Эти результаты можно было бы соотнести с другими теоретическими оценками.
7. Почему коэффициенты теплопроводности для алюминия и золота рассчитаны в разных диапазонах; для алюминия - при низких температурах, а для золота - при высоких температурах электронов?
8. При расчете электронного давления для разогретых плотных металлов при высоких температурах электронов не обсуждается влияние обменного

функционала.

9. Не показано, как меняется число свободных электронов при увеличении электронной температуры в системе. Не ясно, насколько значительным является это изменение.

Указанные замечания не влияют на высокую оценку работы. Работа выполнена в научном коллективе, имеющем широкую известность. По новизне, актуальности темы, объему и достоверность результатов, глубине выводов и практической значимости диссертация Жилиева П.А. в полной мере отвечает требованиями ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациями. Автореферат и опубликованные работы соответствуют содержанию диссертации.

Считаем, что автор диссертации Жилиев П.А. вполне заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.

Основные результаты диссертации Жилиева П.А. опубликованы в 9 статьях и лично доложены на 10 отечественных и зарубежных конференциях.

Результаты работы могут быть использованы в организациях, изучающих явление лазерной абляции, включая Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Институт общей физики им А.М. Прохорова РАН, РНЦ Курчатовский институт и Объединенный институт высоких температур РАН.

Отзыв на диссертацию обсужден и одобрен на заседании кафедры физической химии 26 мая 2015 г., протокол № 10 - 14/15 .

Зав. кафедрой физической химии НИТУ "МИСиС"

профессор, доктор химический наук



/Астахов Михаил Васильевич/

Ведущий эксперт кафедры физической химии

профессор, доктор технических наук



/Белашенко Давид Кириллович/