ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.262.01 НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ФИЗИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА ИМ. П.Н. ЛЕБЕДЕВА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело №_____

решение диссертационного совета от 24 марта 2025 г № 80

О присуждении Григорьевой Марии Сергеевне, гражданке Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Исследование процессов плавления и абляции пористых материалов под действием лазерного излучения» по специальности 1.3.19 – Лазерная физика принята к защите 20 января 2025 года, (протокол заседания № 77) диссертационным советом 24.1.262.01, созданным 11 апреля 2012 года приказом № 105/нк на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН), 119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д. 53.

Соискатель Григорьева Мария Сергеевна, 4 апреля 1988 года рождения, в 2011 году окончила Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ" с присуждением квалификации «инженер-физик» по специальности «Физика конденсированного состояния вещества». В период с 2011 по 2014 год обучалась в очной аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук по специальности «Лазерная физика». С 2010 года является сотрудником ФИАН. В настоящее время работает в должности высококвалифицированного младшего научного сотрудника лаборатории радиационной биофизики и биомедицинских технологий отделения ядерной физики и астрофизики ФИАН (ОЯФА ФИАН).

Диссертационная работа Григорьевой М.С. выполнена в Отделении квантовой радиофизики им. Н.Г. Басова и Отделении ядерной физики и астрофизики ФИАН.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, Завестовская Ирина Николаевна, специалист в области взаимодействия лазерного излучения с веществом, лазерного наноструктурирования материалов, лазерных нанотехнологий и нанобиотехнологий, ядерной наномедицины, лауреат премии Президента РФ в области образования, работает в должности руководителя Научно-образовательного медицинского центра ядерной медицины Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» и, по совместительству, высококвалифицированного ведущего научного сотрудника, исполняющего обязанности заведующего лабораторией радиационной биофизики и биомедицинских технологий Отделения ядерной физики и астрономии ФИАН.

Официальные оппоненты:

1. Головань Леонид Анатольевич, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры общей физики и наноэлектроники физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»;
2. Комленок Максим Сергеевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории лазерной оптики поверхности отдела светоиндуцированных поверхностных явлений Центра естественно-научных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук»

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук (ИАПУ ДВО РАН, г. Владивосток), в своем положительном отзыве, подписанном кандидатом физико-математических наук Жижченко Алексеем Юрьевичем, ведущим научным сотрудником лаборатории синхротронных методов изучения свойств новых функциональных наноматериалов оптоэлектроники, нанофотоники и тераностики ИАПУ ДВО РАН, кандидатом физико-математических наук Кучмижаком Александром Александровичем, заведующим лабораторией синхротронных методов изучения свойств новых функциональных наноматериалов оптоэлектроники, нанофотоники и тераностики ИАПУ ДВО РАН, и утвержденном членом-корреспондентом РАН, доктором физико-математических наук Ромашко Романом Владимировичем, директором ИАПУ ДВО РАН, указала, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, удовлетворяющую всем требованиям к кандидатским диссертациям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а соискатель заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.19 – Лазерная физика.

Соискатель имеет 65 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 19 работ, из них в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, опубликовано 6 работ.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем М. С. Григорьевой работах.

Наиболее значимые результаты по теме диссертации опубликованы в статьях:

1. Григорьева М.С., Завестовская И.Н., Канавин А.П., Динамика схлопывания пор при лазерном отжиге поверхности металлов // Краткие сообщения по физике ФИАН. – 2014. – вып. 9. – с. 27-32.

2. Grigoryeva M.S., Zavestovskaya I.N., and Kanavin A.P. Theoretical study of the heterogeneous films modified by the laser radiation // Physics Procedia. – 2015. – Vol. 71. – P. 196 – 201.
3. Grigoryeva M. S., Zavestovskaya I.N., and Kanavin A.P. Laser annealing of porous defects in metals // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – Vol. 941. – P. 012032.
4. Kharin A.Yu., Grigoryeva M.S., Zavestovskaya I.N. and Timoshenko V.Yu. Effect of silicon target porosity on laser ablation threshold: molecular dynamics simulation // Laser Physics Letters. – 2021. – Vol. 941. – P. 076001.
5. Grigoryeva M.S., Kutlubulatova I.A., Lukashenko S.Yu., Fronya A.A., Ivanov D.S., Kanavin A.P., Timoshenko V.Yu. and Zavestovskaya I.N. Modeling of Short-Pulse Laser Interactions with Monolithic and Porous Silicon Targets with an Atomistic–Continuum Approach // Nanomaterials. – 2023. – Vol. 13. – P. 2809.
6. Григорьева М.С., Завестовская И.Н., Канавин А.П., Фроня А.А., Маврешко Е.И. Влияние пористости и размера пор кремниевой мишени на порог лазерной абляции // Краткие сообщения по физике ФИАН. – 2024. – вып. 9 – с. 9-18.

На автореферат диссертации поступил положительный отзыв от доктора физико-математических наук, доцента Павельева Владимира Сергеевича, заведующего кафедрой наноинженерии Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени С.П. Королева». В отзыве указано, что полученные в диссертации результаты могут быть использованы при оптимизации режимов лазерной модификации пористых материалов. Они являются обоснованными и достоверными. Отмечено наличие некоторого количества опечаток в тексте автореферата. Автор отзыва указывает, что этот недостаток не является принципиальным, а соискатель М.С. Григорьева заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.19–Лазерная физика.

Выбор Голованя Леонида Анатольевича в качестве официального оппонента обоснован его высокой квалификацией и наличием достижений мирового уровня в области лазерной физики, в том числе взаимодействия

лазерного излучения с пористыми средами и исследования физических свойств пористых полупроводников и диэлектриков

Выбор Комленка Максима Сергеевича в качестве официального оппонента обоснован его высокой квалификацией и наличием достижений мирового уровня в области лазерной абляции аморфных и нанокристаллических материалов.

Выбор ведущей организации обоснован её репутацией признанного научного центра, проводящего исследования в области лазерной физики, производства новых функциональных наноматериалов для оптоэлектроники, нанофотоники и тераностики и изучения их свойств.

Диссертационная работа Григорьевой Марии Сергеевны посвящена исследованию физических процессов воздействия лазерного излучения на пористые материалы, лежащих в основе технологий их обработки, таких как лазерная модификация поверхности или производство наночастиц методом лазерной абляции пористых материалов. Проведено комплексное исследование процессов нагрева, плавления и абляции в зависимости от режима лазерного воздействия, термодинамических и структурных характеристик пористого материала.

Актуальность исследования связана с необходимостью оптимизации режимов лазерных технологий для контролируемого и воспроизводимого производства наночастиц или модификации поверхности пористых материалов для придания им требуемых свойств и улучшения эксплуатационных характеристик. Наличие пористой структуры накладывает особенности на механизмы воздействия, в связи с этим требуется системное изучение и выявление физических механизмов взаимодействия лазерных импульсов с пористым материалами в зависимости от параметров лазерного излучения и свойств пористых наноструктур.

На основании выполненных соискателем исследований были получены следующие основные результаты:

1. Разработана модель проплавления при лазерной модификации поверхности пористого материала на основе механизма схлопывания пор под действием сил поверхностного натяжения, позволившая впервые определить критическую скорость плавления в зависимости от пористости материала и размера пор и толщину однородного модифицированного слоя. Установлено, что динамика лазерной модификации поверхности пористого материала самосогласованным образом определяется давлением в расплавленном материале, которое определяет как скорость усредненного гомогенного движения расплава от поверхности к области схлопывания пор, так и скорость затекания расплава в пустые поры. Расчетные значения, полученные в рамках разработанной модели, имеют хорошее согласие с экспериментом.
2. На основании разработанной модели исследован процесс нагрева и плавления пористого материала под воздействием лазерного излучения с учетом зависимости его теплофизических величин от температуры и степени пористости. Показано, что наличие пор приводит к увеличению температуры поверхности материала, глубины проплавления, а также времени жизни расплава, по сравнению со сплошным материалом при прочих равных условиях.
3. Проведено моделирование процесса лазерной абляции пористого кремния на основе метода молекулярной динамики. Определены зависимости величины порога и производительности абляции в зависимости от пористости материала и размера пор в широком диапазоне длин волн лазерного излучения (λ_{irr}=300 нм, λ_{irr} =600 нм, λ_{irr}=1030 нм). Установлено, что порог лазерной абляции и производительность абляции (количество аблированных атомов) зависит от степени пористости материала и размера пор. При исследованиях Si для всех рассматриваемых длин волн наблюдалось снижение порога лазерной абляции и количества аблированных атомов для пористых образцов Si относительно монокристаллических. Установлено, что при плотностях энергии близких к пороговым эффективнее аблируются мишени с меньшим размером пор.

4. На основе континуально-атомистической математической модели MD-nTTM, сочетающей метод молекулярной динамики для описания кинетики неравновесных фазовых превращений, индуцированных лазером, и двухтемпературной модели, выявлены механизмы плавления пористых материалов. Установлено, что в пористой мишени кремния не происходит накопления внутренних напряжений, возникающих из-за быстрого нагрева, за счет быстрой релаксации любых избыточных напряжений внутри пор. При лазерно-индуцированном плавлении пористого кремния в расплаве возникает умеренное отрицательное давление, приводящее к усадке предповерхностного слоя и уменьшению объема материала. Установлено снижение порога плавления и времени начала процесса плавления для пористой мишени кремния относительно монокристаллической при облучении ультракороткими импульсами (λ_{irr}=800 нм).

Все результаты, представленные автором, являются новыми. Новизна обусловлена тем, что:

- Впервые разработана самосогласованная модель проплавления при лазерной модификации поверхности пористого материала на основе механизма схлопывания пор под действием сил поверхностного натяжения, позволяющая определить оптимальную для модификации скорость плавления и толщину модифицированного слоя.
- Впервые с помощью молекулярно-динамического подхода исследована лазерная абляция пористых материалов, позволившая установить зависимость порога и производительности абляции от пористости материала и размера пор в широком диапазоне длин волн лазерного излучения.
- Впервые континуально-атомистическая математическая модель MD-nTTM усовершенствована и применена для исследования лазерного плавления пористого кремния, что позволило выявить механизмы, лежащие в основе технологий обработки пористых материалов.

Практическая значимость результатов диссертации состоит в том, что проведенные исследования позволили выявить особенности в механизмах воздействия лазерных импульсов на пористые материалы в зависимости от пористости и размера пор, на основании которых возможно оптимизировать режимы лазерной модификации и абляции различных пористых материалов в зависимости от характеристик материала и параметров лазерного излучения.

Полученные в диссертации результаты могут быть использованы в Физическом институте им. П.Н. Лебедева РАН, Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт», Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ», Институте общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова, Институте автоматики и процессов управления ДВО РАН и других научно-исследовательских организациях, ведущих исследования и разработки в области лазерных технологий производства наноструктур и модификации поверхности материалов.

Достоверность и обоснованность результатов диссертации подтверждается надёжностью применявшихся теоретических методов, совпадением результатов аналитических и численных расчётов с экспериментальными данными, а также с результатами работ других авторов.

Все основные научные результаты, включенные в диссертацию Григорьевой М.С., получены лично автором, либо при ее непосредственном участии. В частности, автором была предложена и разработана модель проплавления при лазерной модификации поверхности пористого материала на основе механизма схлопывания пор под действием сил поверхностного натяжения, проведены численные расчеты. Предложена модель лазерной абляции пористых материалов на основе молекулярно-динамического подхода, а также идея применения континуально-атомистической математической модели для исследования лазерного плавления пористого кремния. Подготовка публикаций проводилась совместно с соавторами, при этом вклад соискателя был определяющим.

В ходе защиты соискатель Григорьева М.С. аргументированно ответила на заданные ей вопросы членов диссертационного совета, а также на замечания ведущей организации и оппонентов.

На заседании 24 марта 2025 года диссертационный совет принял решение присудить М.С. Григорьевой учёную степень кандидата физико-математических наук за решение научной задачи по выявлению механизмов плавления и абляции пористых материалов при воздействии лазерных импульсов, а также установлению зависимости величин порога и критической скорости плавления, порога и производительности абляции в зависимости от пористости материала и размера пор, что необходимо для оптимизации развитых на их основе лазерных технологий поверхностной модификации, аморфизации и синтеза наночастиц.

При проведении тайного голосования члены диссертационного совета в количестве 23 человек, из них 9 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации (1.3.19 — Лазерная физика), участвовавшие в заседании, из 26 человек, входящих в состав совета, проголосовали:

за присуждение учёной степени - 22,

против присуждения учёной степени - 0,

недействительных бюллетеней - 1.

Председатель диссертационного совета
член-корр. РАН, д.ф.-м.н.

Колачевский Николай Николаевич

Учёный секретарь диссертационного совета
д.ф.-м.н.

Золотько Александр Степанович

24 марта 2025 г.