

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета Д 720.001.06
в Международной межправительственной организации
Объединенный институт ядерных исследований

№245 от 19 января 2018 года

Присутствовали:

Председатель совета:	Оганесян Ю.Ц.	доктор физ-мат. наук	01.04.16
Зам. председателя совета:	Аксенов В.Л.	доктор физ-мат. наук	01.04.07
Ученый секретарь совета:	Попеко А.Г.	кандидат физ-мат. наук	01.04.16

Члены совета:

Авдеев М.В.	доктор физ-мат. наук	01.04.07
Апель П.Ю.	доктор физ-мат. наук	01.04.01
Балагуров А.М.	доктор физ-мат. наук	01.04.07
Белушкин А.В.	доктор физ.-мат. наук	01.04.07
Гикал Б.Н.	доктор тех. наук	01.04.01
Гледенов Ю.М.	доктор физ-мат. наук	01.04.16
Голвков М.С.	доктор физ-мат. наук	01.04.16
Джолос Р.В.	доктор физ-мат. наук	01.04.16
Дмитриев С.Н.	доктор физ-мат. наук	01.04.16
Изосимов И.Н.	доктор физ-мат. наук	01.04.01
Иткис М.Г.	доктор физ-мат. наук	01.04.01
Пенионжкевич Ю.Э.	доктор физ-мат. наук	01.04.16
Плакида Н.М.	доктор физ.-мат. наук	01.04.07
Реутов В.Ф.	доктор физ-мат. наук	01.04.07
Скуратов В.А.	доктор физ-мат. наук	01.04.01
Тер-Акопьян Г.М.	доктор физ-мат. наук	01.04.16
Утенков В.К.	доктор физ-мат. наук	01.04.16
Шабалин Е.П.	доктор физ.-мат. наук	01.04.01

Оганесян Ю.Ц.: Рассматриваем защиту диссертации Рымжановым Русланом

Аликовичем «Моделирование процессов возбуждения и релаксации электронной подсистемы монокристаллов оксидов, облучаемых быстрыми тяжелыми ионами» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

На заседании присутствуют 21 из 25 членов совета, в том числе 6 докторов наук по профилю диссертации. Предоставляю слово ученому секретарю для оглашения личного дела соискателя.

Научный руководитель – Скуратов Владимир Алексеевич, доктор физико-математических наук, начальник Сектора №8 Ионно-имплантационных нанотехнологий и радиационного материаловедения Лаборатории ядерных реакций имени Г.Н. Флерова Объединенного института ядерных исследований. Официальные оппоненты: Бородин Владимир Алексеевич, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» и Стариков Сергей Валерьевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Объединенного института высоких температур РАН – присутствуют на заседании.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение «Государственный Научный Центр Российской Федерации - Институт Теоретической и Экспериментальной Физики» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт».

Попеко А.Г.: Соискатель Рымжанов Руслан Аликович родился в 1989 году в г. Семипалатинск, Казахстан. В 2013 году Рымжанов Р.А. окончил магистратуру Международного университета природы, общества и человека «Дубна», а в 2016 году завершил обучение в аспирантуре Учебно-научного центра Объединенного института ядерных исследований. В настоящее время Рымжанов Р.А. работает в Секторе №8 Ионно-имплантационных нанотехнологий и радиационного материаловедения Лаборатории ядерных реакций имени Г.Н. Флерова в должности младшего научного сотрудника.

Оганесян Ю.Ц.: Слово предоставляется соискателю.

Рымжанов Р.А.: Уважаемый Председатель, уважаемые члены диссертационного совета, коллеги! Вашему вниманию представляется работа «Моделирование про-

цессов возбуждения и релаксации электронной подсистемы монокристаллов оксидов, облучаемых быстрыми тяжелыми ионами».

На первом слайде показана структура диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения, и начать мой доклад мне бы хотелось с актуальности темы исследования, которая представлена во введении.

Исследование свойств материалов при облучении быстрыми тяжелыми ионами (БТИ, энергия > 1 МэВ/нуклон), представляет значительный интерес для изучения радиационной стойкости материалов ядерной энергетики и космической электроники. БТИ большую часть своей энергии при прохождении через вещество теряют на возбуждение электронной подсистемы кристалла. Это позволяет использовать ускоренные пучки тяжёлых ионов высоких энергий в качестве инструмента для моделирования и исследования эффектов воздействия на материалы осколков деления и высокоэнергетических частиц в составе космического излучения.

Также облучение быстрыми тяжёлыми ионами может использоваться в качестве эффективного средства наноразмерной модификации материалов. Методики, основанные на использовании БТИ-облучения, уже эффективно применяются в технологиях получения трековых мембран, проводящих каналов, наноструктурирования поверхности, модификации наноструктур.

Задача по исследованию кинетики треков БТИ носит так же и фундаментальный характер. Прохождение тяжелого иона через вещество приводит к сильному возбуждению материала в крайне малых временных и пространственных масштабах. В этой области достигается настолько высокий уровень возбуждения, что при применении моделей, использующих макроскопические подходы для описания кинетики процессов в треке, возникают принципиальные проблемы.

Более подробно об этом говорится в первой главе моей диссертации, которая посвящена анализу преимуществ и недостатков существующих моделей образования треков быстрыми тяжелыми ионами. На основании этого анализа сделан вывод, что наиболее целесообразным подходом при описании процессов в треках тяжелых ионов высоких энергий представляется описание возбуждения материала в треке БТИ при помощи фундаментально обоснованной и проверенной в экспериментах количественной микроскопической модели. На основании проведенного

анализа можно сформулировать следующие цели и задачи:

- 1) Построение микроскопической количественной Монте-Карло (МК) модели возбуждения электронной и ионной подсистем диэлектриков в наноразмерных треках БТИ.
- 2) Применение разработанной модели для определения пространственно-временных параметров возбуждения электронной и ионной подсистем кристалла оксида алюминия, облучаемого различными ионами.
- 3) Моделирование возникновения структурно-фазовых изменений в Al_2O_3 оксиде алюминия в результате релаксации возбуждения решетки в треке БТИ и сопоставление этих результатов с результатами исследований облученных образцов методами просвечивающей электронной микроскопии.

Для решения поставленных задач использовался комбинированный экспериментальный и теоретический подход, который позволил проверить модель и использованные приближения, а также объяснить наблюдаемые экспериментально результаты.

Далее я бы хотел перейти к описанию разработанной модели. Этому посвящена вторая глава диссертационной работы, в которой приводится описание разработанной Монте-Карло (МК) модели TREKIS возбуждения электронной подсистемы материала, а также результаты моделирования электронной кинетики в окрестности траектории БТИ в Al_2O_3 .

Эта оригинальная Монте-Карло модель основана на методе асимптотических траекторий и описывает: (а) первичный пролет БТИ и ионизацию атомов мишени; (б) последующий разлет первичных электронов, их упругое и неупругое взаимодействие с атомами среды, а так же кинетику всех вторичных поколений электронов, образующихся в треке; (в) релаксацию дырок глубоких атомных оболочек, созданных ионизацией БТИ или электронами, включая межатомные Оже-процессы и радиационные распады; (г) пространственное перераспределение валентных дырок и их упругое и неупругое взаимодействие со средой.

Модель основана на формализме комплексной диэлектрической функции и динамического структурного фактора. В рамках этого формализма сечение рассеяния частицы на системе связанных частиц может быть представлено в виде произ-

ведения сечения взаимодействия со свободным рассеивателем и динамического структурного фактора среды, учитывающего пространственно-временные корреляции в системе рассеивателей (электронной подсистемы мишени). Для электронной подсистемы материала динамический структурный фактор связывается с обратной мнимой частью комплексной диэлектрической функцией материала при помощи флуктуационно-диссипативной теоремы.

Обратная мнимая часть комплексной диэлектрической функции может автоматически содержать в себе особенности, присущие твердому телу, например, коллективные моды в ансамбле электронов (образование плазмонов) и в решётке (фононы). В настоящей работе для определения диэлектрической функции был использован метод, основанный на её восстановлении из экспериментальных данных по фотопоглощению в виде суммы осцилляторных функций.

Для проверки построенной диэлектрической функции и рассчитанных сечений было проведено сравнение расчетных длин средних свободных пробегов электронов до неупругого столкновения с данными других авторов. Также результаты вычисления энергетических потерь БТИ сравнивались с выходными данными программ SRIM и CasP 5.0. Из сравнения видно, что в обоих случаях результаты расчетов хорошо согласуются между собой, что подтверждает достоверность выбранного подхода.

Построенная и проверенная диэлектрическая функция материала использовалась для расчета дифференциальных сечений взаимодействия заряженной частицы с электронной подсистемой, которые затем использовались в Монте-Карло модели.

Далее представлены результаты моделирования возбуждения электронной подсистемы в треках тяжелых ионов высоких энергий в Al_2O_3 , в частности, радиальные распределения и радиальные распределения энергии электронов в треке ионов Хе с энергией 167 МэВ в Al_2O_3 в различные моменты времени после пролёта иона. На графиках с радиальным распределением энергии видно распространение двух фронтов. Первый фронт – это баллистическое распространение возбужденных электронов по невозмущенному материалу. Возникновение второго фронта обусловлено появлением большого количества электронов выделенной энергии при возбуждении валентной зоны.

На следующем слайде приведены рассчитанные энергетические спектры и угловые распределения электронов в треке иона Bi с энергией 700 МэВ в Al_2O_3 . В низкоэнергетической области можно наблюдать пик в спектре на энергиях ~ 20 эВ, который образуется в результате распада возбуждения валентной зоны. Этот пик отвечает за формирование второго фронта, который обсуждался в предыдущем абзаце. Так же можно наблюдать, что на временах до 10 фс сохраняется выделенное направление движения электронов, из чего следует, что на этих временах электроны разлетаются баллистически. Для времен ≥ 10 фс многократное взаимодействие приводит к практически однородному распределению свободных электронов по углам, что свидетельствует об их преимущественно диффузном распространении. Базируясь на приведенных результатах, можно утверждать, что макроскопические уравнения, в т.ч. уравнение диффузии тепла для электронной подсистемы, используемое в модели термической вспышки, не могут применяться для описания распространения избыточной энергии электронной подсистемы до времен меньших ~ 10 фс.

Также мне бы хотелось продемонстрировать важность пространственного перераспределения валентных дырок и их взаимодействия с ионной подсистемой материала для описания возбуждения материала БТИ. Доля энергии, вносимая дырками в ионную подсистему материала, сравнима с долей энергии, вносимой делокализованными электронами, причем область наибольшего влияния взаимодействия дырок с решеткой сосредоточена на расстояниях до 10 нм от центра трека.

Результирующее радиальное распределение избыточной энергии решетки использовалось в дальнейшем моделировании релаксации возбуждения ионной подсистемы методами молекулярной динамики, чему посвящена третья глава представленной диссертации.

Полученное в рамках МК модели радиальное распределение плотности энергии ионной подсистемы в треке ко времени 100 фс после пролёта иона использовалось для определения распределения скоростей атомов, которое затем вставлялось в молекулярную динамику для отслеживания релаксации возбуждения решетки оксида алюминия.

Для описания сил межатомного взаимодействия использовался потенциал ти-

па Букингема с кулоновской частью. Параметры потенциала для оксида алюминия были взяты из литературы. Эти коэффициенты подгонялись таким образом, чтобы хорошо описывать структуру оксида алюминия (корунд, $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$), параметры решетки, объемный модуль упругости и длины межатомных связей. Для дополнительной проверки качества потенциала, в настоящей работе также были определены упругие постоянные оксида алюминия и температура плавления. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показало хорошее согласие и подтвердило применимость данного потенциала для описания свойств Al_2O_3 .

Теперь я перейду к результатам моделирования структурных изменений вдоль траектории иона Хе с энергией 167 МэВ в оксиде алюминия в рамках описанного подхода. Прохождения иона через материал вызывает формирование прерывистой цилиндрической поврежденной области, которая не является полностью аморфизованной. Поперечный размер структурно-изменённой области $\sim 1,8\text{-}2$ нм, что хорошо согласуется с экспериментальными данными, согласно которым, поврежденная область представляет собой материал с искаженной решеткой, однако не является аморфной, и имеет поперечный размер около 1,7-1,9 нм.

Моделирование деформации и изменения плотности оксида алюминия вокруг траектории иона показывает, что центральная наиболее поврежденная область диаметром $\sim 1,8$ нм имеет пониженную плотность ($\sim 7\%$). Эта область трека окружена оболочкой с повышенной плотностью материала ($\sim 1\%$) и диаметром ~ 4 нм. Можно наблюдать, что характерные размеры и магнитуа структуры ядро-оболочка хорошо согласуются для теоретических и экспериментальных данных.

Для определения структуры трековой области был проведен расчет порошковой рентгеновской дифрактограммы по данным МД моделирования. Этот расчет показывает, что облучение быстрыми тяжелыми ионами приводит к погасанию части пиков, которые соответствуют плоскостям подрешетки алюминия. Таким образом, можно утверждать, что подрешетка ионов алюминия в Al_2O_3 при облучении БТИ повреждается сильнее, чем подрешетка атомов кислорода. Это согласуется с экспериментальными данными, согласно которыми пороговая энергия смещения атомов алюминия значительно ниже, чем у атомов кислорода.

На следующем слайде показаны результаты моделирования пролета БТИ и

снимки ПЭМ треков иона висмута 700 МэВ. Размер трека, полученный с помощью моделирования, равен ~ 3 нм, в то время как экспериментальное значение ~ 3.5 нм. Можно также наблюдать, что материал в области трека поврежден гораздо сильнее, чем для трека иона ксенона. Центральная часть трека имеет структуру близкую к аморфной. Исследование остаточных напряжений демонстрирует характерную структуру ядро-оболочка, когда менее плотная центральная часть трека, окружена более плотной оболочкой.

В работе была проведена оценка порога формирования трека по ионизационным потерям налетающего иона. Для определения этой величины была проведена серия моделирований пролета ионов с различными ЛПЭ, после чего полученная кривая была экстраполирована в область нулевого значения радиуса трека, что соответствует пороговому значению ~ 7 кэВ/нм. Этот результат достаточно хорошо согласуется с величиной, полученной экспериментальным путем (~ 10 кэВ/нм).

Представленные выше результаты показали хорошее согласие расчетных данных в рамках модели с данными экспериментальных исследований и подтвердили применимость разработанного подхода. Далее модель была применена для объяснения наблюдаемых экспериментально результатов.

Экспериментальное исследование зависимости числа треков от флюенса ионов Хе с энергией 167 МэВ выявило, что количество треков на единицу площади образца достигает насыщения при дозах около $1,1 \times 10^{12}$ см⁻². Предполагая, что этот трек имеет цилиндрическую форму, можно определить эффективный радиус трековой области $\sim 5,4$ нм, что значительно больше радиуса самого трека.

Для исследования механизмов, приводящих к насыщению числа треков в зависимости от дозы, было проведено моделирование последовательного пролета двух ионов ксенона на некотором расстоянии друг от друга. Хорошо видно, что пролет второго иона на расстоянии 2,8 нм от первого приводит практически к полному восстановлению исходной структуры в существующем треке. Подобное восстановление структуры при перекрытии трековых областей может служить объяснением наблюдаемого экспериментально насыщения количества треков при увеличении флюенса облучения. В данной работе был определен максимальный эффективный радиус трековой области, в которой может наблюдаться восстановление

исходной структуры материала, и его значение составило $\sim 6,5$ нм, что соответствует максимальному наблюдаемому флюенсу ионов $\sim 0.8 \times 10^{12}$ см⁻².

В заключении моего доклада представлены результаты работы, выносимые на защиту:

- 1) Модель, описывающая возбуждение и релаксацию электронной подсистемы в треке БТИ и учитывающая коллективную реакцию этих подсистем на вносимое возбуждение в рамках формализма динамического структурного фактора и комплексной диэлектрической функции.
- 2) Результаты расчетов пространственно-временных параметров, характеризующих возбуждение электронной и ионной подсистем Al₂O₃ в треке БТИ: радиальные и временные зависимости плотности электронов и валентных дырок и их энергии, а также плотности энергии в решетке материала.
- 3) Результаты моделирования методами молекулярной динамики кинетики структурных изменений в треке БТИ. Основные параметры, характеризующие поврежденную область: радиальные распределения смещений атомов, плотность вещества после релаксации трека, остаточные напряжения. Результаты моделирования эффектов, возникающих при перекрытии трековых областей.

Основные результаты работы докладывались и обсуждались на десяти международных и российских конференциях, а также на семинарах Сектора №8 и Центра прикладной физики Лаборатории ядерных реакций имени Г.Н. Флерова.

Результаты диссертации изложены в 12 публикациях, относящихся к категории статей в научных журналах и докладов в сборниках материалов конференций, 11 из которых внесены в список рецензируемых журналов, индексируемых в системах Web of Science и SCOPUS, и рекомендованных ВАК.

Благодарю Вас за внимание!

Оганесян Ю.Ц.: Спасибо. Пожалуйста, вопросы, замечания.

Аксенов В.Л.: Вы как-то специально выделили ситуацию с подрешетками алюминия. Это на что-то влияет? Почему акцент на этом эффекте?

Рымжанов Р.А.: Здесь нам было интересно рассмотреть структуру оксида алюминия в области трека. Это довольно сложный вопрос как с точки зрения эксперимен-

тальных исследований, так и моделирования. Поэтому мы попробовали смоделировать рентгеновский дифракционный анализ поврежденной области. Какого-то особого внимания различной повреждаемости подрешеток не уделялось.

Аксенов В.Л.: То есть вы не выясняли, влияет ли это на какие-то свойства материала? А какова, по вашему мнению, физическая причина такого поведения?

Рымжанов Р.А.: Согласно литературным данным, энергия смещения атомов алюминия ниже, чем атомов кислорода. На мой взгляд, причина может быть в этом.

Аксенов В.Л.: Но алюминий же тяжелее чем кислород.

Рымжанов Р.А.: Да, действительно, но кроме того, если рассмотреть структуру кристалла, то обычно ее описывают как искаженную гексагональную плотную упаковку атомов кислорода, две трети октаэдрических пустот в которой занимают атомы алюминия. Согласно литературе, алюминию легче перемещаться в свободные октаэдрические пустоты, что может служить объяснением данного эффекта.

Иткис М.Г.: У меня простой очень вопрос. В вашей работе разработана достаточно серьезная модель, проводятся сравнения с экспериментом, анализируются треки разных ионов. Уже довольно давно ионами облучаем полимерные пленки, производим мембраны для разных целей. А что дают исследования подобные вашим для развития мембранных технологий?

Рымжанов Р.А.: Результаты настоящей работы можно использовать для построения моделей травления треков. Структурные изменения, а также параметры возбуждения электронной подсистемы материала определяют скорость травления. Соответственно, используя аналогичные результаты для других материалов можно исследовать основные механизмы травления треков, не только в полимерах, но и в кристаллических материалах. Такая работа уже ведется в сотрудничестве с ФИАН.

Пенионжкевич Ю.Э.: Почему выбран именно этот материал – оксид алюминия? Есть же другие диэлектрики, например, оксид магния, почему бы не использовать их? Это первый вопрос. И соответственно, второй вопрос – ваша модель работает только для Al_2O_3 или ее можно применить и на другие диэлектрики?

Рымжанов Р.А.: В настоящее время мы активно применяем модель для описания треков в форстерите (Mg_2SiO_4), $Y_3Al_5O_{12}$, которые показали хорошее согласие с экспериментом. Также я сейчас работаю и над MgO . Этот материал, однако, плох

тем, что в монокристаллическом оксиде магния треков не наблюдается. Это интересно с точки зрения сравнения процессов образования треков в различных материалах, что помогло бы ответить на некоторые фундаментальные вопросы: почему, например, в некоторых материалах есть треки, а в некоторых их нет.

Пенионжкевич Ю.Э.: Я бы хотел еще продолжить вопрос: Михаил Григорьевич Иткис, который здесь присутствует, он крупный специалист по использованию пленок оксида алюминия в качестве подложек. Эти пленки под пучком стоят бесконечно долго. Согласно же вашим данным, оксид алюминия должен быстро разрушиться?

Рымжанов Р.А.: Я бы не сказал, что наши исследования свидетельствуют о том, что этот материал должен быстро разрушиться под пучком. Если сравнивать с другими диэлектриками, где треки аморфные и большого размера, в оксиде алюминия треки кристаллические и размер их всего 2 нм. Согласно данной работе, этот материал обладает хорошей радиационной стойкостью к облучению быстрыми тяжелыми ионами.

Дмитриев С.Н.: Так в работе же еще и показали, что треки могут залечивать друг друга.

Оганесян Ю.Ц.: Очень активная сегодня дискуссия. Так, пожалуйста, еще вопрос.

Белушкин А.В.: У меня два вопроса: один уточняющий, в продолжение вопроса профессора Аксенова. Насколько я понял, вы показали в процессах релаксации что ваша модель объясняет пять порядков по временам: от возбуждения электронной подсистемы до возбуждения фононов и релаксации решетки. Далее вы сравниваете с другими моделями и показываете, что вы работаете в более широком временном диапазоне. Правильно ли я понял?

Рымжанов Р.А.: Да, мы считаем, что описываем все эти времена верно.

Белушкин А.В.: А второй вопрос у меня по поводу вашей третьей части. Вы используете межатомный потенциал с кулоновской частью и силами Ван-дер-Ваальса. Какой вклад этих частей в суммарную потенциальную энергию?

Рымжанов Р.А.: В настоящее время мы тоже задаемся этим вопросом с точки зрения влияния доли кулоновских сил на процессы релаксации материала в треке. Однако пока таких оценок не проводилось, поэтому я не могу привести количествен-

ные данные.

Оганесян Ю.Ц.: Так, хорошо, пожалуйста, еще вопросы.

Апель П.Ю.: Есть такой замечательный материал нитрид кремния, с точки зрения технологических приложений очень интересный и перспективный. Не думали ли вы о моделировании треков в этом материале? Какая там может быть специфика?

Рымжанов Р.А.: По поводу данного материала – я с ним не знаком и задачи о его моделировании не ставилось. Мы считаем, что наша модель довольно универсальна и может описывать широкий круг материалов, поэтому ее вполне можно применить и к нитриду кремния.

Оганесян Ю.Ц.: Очень интересная дискуссия. Я правильно понял: когда вы увеличиваете флюенс ионов все больше и больше, то возникает отжиг дефектов, то есть это температурный эффект?

Рымжанов Р.А.: В рамках нашей модели можно сказать, что это эффект температуры – отжиг.

Оганесян Ю.Ц.: Хорошо, спасибо вам большое. Еще вопросы? Если вопросов нет, то давайте перейдем к отзыву научного руководителя. Если какие-то моменты остались не прояснёнными, то, я думаю, выступления руководителя и оппонентов окончательно картину прояснят. Пожалуйста, Владимир Алексеевич.

Скуратов В.А.: Оглашает отзыв. Текст прилагается.

Оганесян Ю.Ц.: Спасибо большое, Владимир Алексеевич. Теперь секретарь огласит отзыв организации, в которой выполнялась работа и отзыв ведущей организации.

Попеко А.Г.: Имеется заключение организации, в которой выполнялась работа. Это выписка из решения Научно-технического совета НХП «Центр прикладной физики» Лаборатории ядерных реакций, утверждённая Дмитриевым Сергеем Николаевичем. Заключение положительное и замечаний не содержит.

Имеется отзыв ведущей организации – ФГБУ «Государственный Научный Центр Российской Федерации - Институт Теоретической и Экспериментальной Физики» НИЦ «Курчатовский институт». Заключение положительное. Делается вывод, что диссертация является законченной научно-исследовательской работой и выполнена на высоком научном уровне. Она содержит новые важные результаты,

расширяющие наши представления о природе треков и процессов, протекающих в них. Автор работы заслуживает присвоения учёной степени – кандидат физико-математических наук.

Других отзывов не поступало.

Оганесян Ю.Ц.: Спасибо большое. Руслан Аликович, вам предоставляется право ответить на замечания ведущей организации.

Рымжанов Р.А.: По поводу первого замечания: К сожалению, мы не включили этого обсуждения в работу, так как невозможно все охватить в одной работе. В нашей модели реализуются бинарные столкновения, каждое из которых учитывает коллективную реакцию системы рассеивателей связанных динамически и пространственно. При этом на длине своей траектории частица многократно рассеивается на атомах фононах и электронах среды путем последовательных бинарных столкновений.

Оганесян Ю.Ц.: Хорошо, с этим мы разобрались, давайте следующий вопрос.

Рымжанов Р.А.: Моделирование возбуждения электронной и ионной подсистем заканчивается на временах ~ 100 фс, когда процессы передачи энергии от возбужденной электронной подсистемы в решетку практически полностью завершены. Результирующая радиальная зависимость избыточной энергии, переданной в решетку материала, затем использовалась для определения распределения скоростей атомов в цилиндрических слоях вокруг траектории иона. Это распределение скоростей вставлялось в молекулярную динамику и отслеживалась релаксация системы до ~ 50 пс.

Оганесян Ю.Ц.: Я думаю, что здесь все понятно, давайте следующий вопрос.

Рымжанов Р.А.: Согласно экспериментальным данным, рекомбинация электронов и валентных дырок в широкозонных диэлектриках (в частности в оксиде алюминия) занимает времена около нескольких нс. Поэтому в настоящей работе электрон-дырочная рекомбинация не рассматривается.

Оганесян Ю.Ц.: А что по поводу следующего вопроса, учитывали ли вы эффекты локального электрического поля?

Рымжанов Р.А.: В настоящей модели электронейтральность достигается совместной диффузией электронов и дырок. Нескомпенсированный заряд все же присут-

ствует, однако находится на малых расстояниях от траектории иона ($\sim 1-2 \text{ \AA}$) и мы пренебрегаем эффектом электрического поля, генерируемого им. Но сейчас мы активно работаем над учетом этого эффекта.

Оганесян Ю.Ц.: И, наконец, последний вопрос.

Рымжанов Р.А.: В сообществе существует несколько критериев, выделяющих область трека: область возбуждения материала, область видимых структурных повреждений, область эффектов вызываемых этими повреждениями (например, остаточные напряжения). В настоящей работе размер трека определялся по размеру области видимых структурных изменений, так как это делается при исследовании образцов при помощи просвечивающей электронной микроскопии.

Оганесян Ю.Ц.: Здесь мне не совсем понятно. Что за критерий имеется в виду? Пролетает ион, образует трек. Он не может быть слишком большим, не слишком малым. Что имеется в виду, о какой точности идет речь?

Рымжанов Р.А.: Действительно, строгого критерия в работе не приводится. Как я уже сказал, размер трека определялся по размеру области видимых структурных изменений, с точностью примерно до 0.4 нм . В этом материале это непростой вопрос, так как трек не аморфный, он кристаллический. Поэтому с определением размера трека возникают сложности.

Оганесян Ю.Ц.: По-моему, Руслан Аликович ответил на все вопросы. Теперь мы переходим к отзывам оппонентов. Первый оппонент – Бородин Владимир Алексеевич. Пожалуйста.

Бородин В.А.: Оглашает отзыв, текст прилагается.

Оганесян Ю.Ц.: Спасибо вам большое, Владимир Алексеевич. Так, Руслан Аликович, пожалуйста, вам предоставляется возможность ответить на замечания оппонента.

Рымжанов Р.А.: По первому вопросу хотелось бы сказать следующее. Формула (2.1) – это дифференциальное сечение рассеяния заряженной частицы на системе связанных заряженных рассеивателей. В приближении однородного распределения этих рассеивающих центров, длина свободного пробега обратно пропорциональна произведению сечения на плотность рассеивателей.

По поводу второго вопроса. Эти программы, прежде всего, хороши тем, что

откалиброваны на огромном количестве экспериментальных данных по потерям энергии различных ионов в различных мишенях. В настоящее время сообщество считает эти программы «эталонными» при расчёте потерь энергии.

Третий вопрос: Для валентной зоны учитывается плотность электронных состояний и под потенциалом ионизации в данном случае понимается энергетический уровень электрона в валентной зоне по отношению к дну зоны проводимости. Для глубоких оболочек это потенциалы ионизации свободного атома. Их можно взять из литературных данных, либо определить по положению пиков диэлектрической функции.

Оганесян Ю.Ц.: Владимир Алексеевич, такой ответ вас устраивает?

Бородин В.А.: Да, конечно.

Оганесян Ю.Ц.: Давайте перейдем к последнему вопросу.

Рымжанов Р.А.: Мы проводили оценки этого эффекта, которые показали, что, действительно, атомы в области около 5 А обладают преимущественной ориентацией скоростей, однако доля их мала. Это связано с тем, что электроны достаточно быстро переходят к диффузионному распространению, они движутся произвольно уже ко времени 1-10 фс. Примерно в это же время начинаются процессы их взаимодействия с решеткой. Поэтому мы не учитывали выделенное направление импульсов атомов в дальнейшем моделировании, но если понадобится, можно легко учесть эту возможность.

Оганесян Ю.Ц.: Да, эффект может быть мал по двум причинам: во-первых, большая разница в массе электрона и массе атома, соответственно малый передаваемый импульс, а второе, как вы уже сказали, электроны летят во все стороны и компенсируют отдачу. Спасибо.

Оганесян Ю.Ц.: Следующий оппонент. Сергей Валерьевич Стариков, прошу вас.

Стариков С.В.: Оглашает отзыв, текст прилагается.

Оганесян Ю.Ц.: Спасибо большое. Пожалуйста, Руслан Аликович.

Рымжанов Р.А.: По поводу первого вопроса, мы проводили оценочный анализ нарушения электронейтральности. На временах около 100 фс средний заряд атома в самом центре трека около 0.2-0.3 элементарных заряда и быстро убывает с увеличением расстояния. Таким образом, нескомпенсированный заряд все же присут-

ствуется, однако находится на малых расстояниях от траектории иона ($\sim 1-2 \text{ \AA}$) и мы им пренебрегаем.

Оганесян Ю.Ц.: Следующий вопрос, пожалуйста.

Рымжанов Р.А.: Верификация сохранения энергии, конечно же, проводится в рамках программы TREKIS. Сумма энергий всех подсистем (электронной, ионной и дырочной) соответствует полным потерям энергии иона.

Оганесян Ю.Ц.: Следующий вопрос связан с расчетом температуры плавления.

Рымжанов Р.А.: Целью настоящей работы не являлось определение температуры плавления материала, поэтому я выбрал самый простейший метод ее расчета. Однако я провел моделирование температуры плавления методом, который указал рецензент и действительно, температура плавления оказалась на $\sim 10\%$ ниже, что гораздо лучше соответствует экспериментальному значению.

По поводу следующего вопроса: Действительно, деталям кинетики изменений в треке стоило уделить в работе большее внимание. Это было проведено в одной из наших последующих работ и опубликовано. Могу сказать, что дефектная область вокруг трека образуется при кристаллизации расплавленной области.

И последний вопрос: В настоящей работе считается, что трек одного иона полностью остыл и сформировался, а затем моделируется прохождение второго иона. Таким образом, можно считать, что время между двумя ионами очень большое – макроскопическое. Это соответствует и условиям эксперимента. При характерных плотностях потока 10^8-10^9 ионов на см^2 в секунду время прохождения второго иона на расстоянии ~ 10 нм от первого исчисляется сотнями секунд.

Оганесян Ю.Ц.: Мы второй раз обсуждаем эту работу, и, я думаю, у членов совета уже сложилось впечатление о диссертации. Если больше никто не желает высказаться, то дискуссия прекращается. Лично у меня нет никаких сомнений, что Рымжанов Р.А. может быть кандидатом физико-математических наук и современным специалистом в области физики конденсированных сред. Пожалуйста, Руслан Аликович, вам предоставляется заключительное слово.

Рымжанов Р.А.: Я хотел бы, во-первых, выразить глубокую благодарность своему научному руководителю, Скуратову Владимиру Алексеевичу за постановку интересной задачи и помощь в работе, моим коллегам и соавторам Волкову Александру

Евгеньевичу, Медведеву Никите и Горбунову Сергею за помощь в построении аналитических и численных моделей, представленных в диссертации, Авхачеву Константину за консультации по методам молекулярной динамики, Жаку О'Коннелу за обсуждение результатов исследования образцов с помощью ПЭМ, сотрудникам Центра прикладной физики и сектора №8 за помощь при проведении измерений и структурных исследований, сотрудникам научно-технического отдела ускорителей ЛЯР ОИЯИ за помощь в проведении экспериментов на ускорителях ИЦ-100 и У-400М. Огромная благодарность диссертационному совету за возможность представить здесь мою работу, оппонентам, Владимиру Алексеевичу и Денису Петровичу. А также всем близким и друзьям за их поддержку. Спасибо!

Оганесян Ю.Ц.: Спасибо вам большое. Так, мы переходим к голосованию. Предлагаю выбрать счетную комиссию, для проведения тайного голосования для решения вопросов о соответствии рассматриваемой работы требованиям Положения и о присуждении ученой степени кандидата физико-математических наук Рымжанову Руслану Аликовичу: Авдеев М.В., Апель П.Ю., Балагуров А.М.

ПОСТАНОВИЛИ: Избрать счетную комиссию в составе: Авдеев М.В., Апель П.Ю., Балагуров А.М.

СЛУШАЛИ: Утверждение протокола счетной комиссии по проведению тайного голосования о присуждении ученой степени кандидата физико-математических наук Рымжанову Р.А.: состав совета утвержден в количестве 25 человек, присутствовали на заседании 21 члена совета, роздано бюллетеней - 21, подано с отметкой "за" - 21, подано с отметкой "против" - нет, недействительных бюллетеней - нет.

Оганесян Ю.Ц.: Прошу утвердить протокол счетной комиссии. Протокол счетной комиссии утвержден единогласно. На основании изложенного диссертационный совет Д 720.001.06 в Объединенном институте ядерных исследований принял решение о присуждении ученой степени кандидата физико-математических наук Рымжанову Р.А. Переходим к обсуждению заключения совета по диссертации. Проект заключения есть у всех членов совета.

Оганесян Ю.Ц.: Пожалуйста, у кого есть замечания?

Апель П.Ю.: У меня есть три небольших замечания: аббревиатуру БТИ нужно расшифровать; сокращение ДСФ – КДФ нигде больше не используется, можно убрать; в пункте 3 изменить фразу «возбуждение электронной и ионной подсистем Al_2O_3 » на «возбуждение электронной и ионной подсистем кристалла Al_2O_3 ».

Пенионжкевич Ю.Э.: У меня тоже замечание: в заключительном предложении лучше ограничить применимость модели диэлектриками.

Оганесян Ю.Ц.: Хорошо. Если больше замечаний нет, тогда я ставлю вопрос на голосование. Кто за то, чтобы утвердить это заключение с учетом замечаний? Спасибо большое. Против - нет. Единогласно утверждено.

Председатель диссертационного совета,
академик РАН



Оганесян Ю.Ц.

Ученый секретарь диссертационного совета

Попеко А.Г.