

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Рымжанова Руслана Аликовича «Моделирование процессов возбуждения и релаксации электронной подсистемы диэлектриков, облучаемых быстрыми тяжелыми ионами», представляемую на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния».

Диссертация Р.А. Рымжанова посвящена изучению механизмов взаимодействия быстрых тяжелых ионов (с энергиями от нескольких сотен МэВ) с конденсированным веществом. Энергичное развитие этой современной области исследований стимулируется многочисленными и очень разнообразными практическими приложениями. К ним относятся, в частности, ядерная энергетика (взаимодействие осколков деления урана с матрицей в оксидном и композитном топливе), космическая техника (взаимодействие высокоэнергетических космических частиц с функциональными и конструкционными материалами космических аппаратов), нанотехнологии (применение треков быстрых тяжелых ионов для создания структур с наноразмерами - трековых мембран, проводящих каналов и др.). Понимание эффектов, сопровождающих прохождение быстрых заряженных ионов через вещество, принципиально необходимо как для предотвращения нежелательных воздействий на облучаемые материалы, так и для управления параметрами и результатами облучения при целенаправленной модификации материалов. Однако достижение такого понимания является крайне нетривиальной и сложной задачей, что обусловлено необходимостью корректного описания экстремальных состояний вещества в треках, связанных с выделением значительной энергии за ультракороткое время в крайне малых объемах вещества. В силу этого, уровень теоретического и модельного описания треков быстрых тяжелых частиц даже в современных публикациях зачастую недалеко ушел от простейших моделей 15-20 летней давности. Недостаточность этих моделей все более признается в научном сообществе, специализирующемся на исследованиях треков быстрых заряженных частиц, а также по ряду смежных проблем (например, в области модификацию поверхности мощными фемтосекундными лазерными импульсами и медленными сильно заряженными ионами). Поэтому диссертационная работа Р.А. Рымжанова, посвященная разработке концепций, более адекватно описывающих сложную многоуровневую иерархию физических процессов, сопровождающих прохождение быстрых тяжелых ионов через твердые тела, несомненно имеет высокую актуальность.

Диссертационная работа Р.А. Рымжанова состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитируемой литературы, содержащего 163 наименования.

Во **введении** сформулирована цель диссертационной работы и приведено обоснование ее актуальности. Указаны также научная новизна и практическая важность результатов работы.

**Первая глава** посвящена обзору истории и современного состояния теоретических исследований в области воздействия треков быстрых тяжелых ионов на твердые тела. Автор грамотно и полно освещает особенности различных возможных подходов к изучению физических процессов, протекающих при прохождении быстрых заряженных ионов через вещество, а также убедительно показывает недостатки ряда современных моделей, которые ограничивают их применимость и вызывают сомнения в достоверности предсказаний. На основе проведенного анализа автором делается обоснованный вывод о необходимости дальнейшего развития теоретических моделей с использованием многоуровневых

аналитических и численных подходов, позволяющих сохранять положительные моменты уже имеющихся моделей и одновременно вносить изменения, направленные на преодоление существующих ограничений. Именно такой многоуровневый подход, сочетающий использование Монте-Карло моделирование распространения первичных электронных возбуждений на малых временах (до 10 фс) после прохождения трека, моделирование передачи энергии от возбужденной электронной подсистемы к ионной подсистеме в рамках формализма динамического структурного фактора на промежуточной шкале времен (до 1 пс) и применение классической молекулярной динамики на масштабах времен от пико- до наносекунд принят за основу диссертационной работы.

**Вторая глава** посвящена изучению особенностей создания и распространения электронных возбуждений в результате прохождения быстрого тяжелого иона через вещество. Одной из ключевых проблем такого описания является определение скорости передачи энергии от разлетающихся электронов, выбитых быстрым ионом (так называемых дельта-электронов), в окружающую среду, рассматриваемую обычно как коррелированную систему ионов (атомных ядер с сильно связанными внутренними электронными оболочками) и электронов проводимости. Для этого необходимо знать, прежде всего, сечения рассеяния дельта-электронов на ионах и валентных электронах. В работе предложено использовать для такого описания формализм динамического структурного фактора, однако сам по себе динамический структурный фактор рассчитывается как правило весьма приближенно. Поэтому в диссертации предложено остроумное и плодотворное решение восстановления динамического структурного фактора, исходя из экспериментальных данных по фотопоглощению (путем аппроксимации мнимой части обратной комплексной диэлектрической проницаемости). Практическая польза такого подхода состоит в том, что пики фотопоглощения соответствуют различным актам возбуждения электронной подсистемы, что позволяет разделить полное сечение рассеяния на вклады от отдельных «элементарных» процессов (каналов рассеяния) и оценить относительную важность вклада каждого канала, что в дальнейшем активно используется при численном моделировании. В диссертации уделяется значительное внимание обоснованию этого подхода и непосредственному расчету для оксида алюминия, используемого в качестве эталонного материала для расчетов на всем протяжении диссертации.

Второй большой составляющей работы, изложенной в главе 2, является развитие численной Монте-Карло модели генерации, распространения и релаксации электронов в треке быстрого тяжелого иона, практическое воплощенной в программном коде TREKIS. Модель имеет многоэтапную идеологию. Прежде всего, исходя из параметров (заряда и скорости) налетающего иона определяется количество дельта-электронов на единицу длины пробега иона и распределения этих электронов по энергиям и импульсам (т.е. по направлениям вылета). На втором этапе разлет образовавшихся электронов моделируется с использованием Монте-Карло моделирования в рамках приближения парных столкновений. При этом учитывается передача энергии от разлетающихся электронов в различные каналы рассеяния, включая возможность генерации на этом же этапе вторичных электронов за счет Оже-процессов. Оценки энергий и импульсов, передаваемых атомам решетки через канал взаимодействия электронов с оптическими фонами, позволяют рассчитать энерговыделение в ионную подсистему, что соответствует ее разогреву. В диссертации представлены практические результаты расчетов распространения электронных возбуждений для двух представляющих практический интерес конкретных ситуаций,

наблюдаемых при прохождении быстрых ионов висмута и ксенона через диоксид алюминия.

**Третья** глава посвящена моделированию структурных изменений в области трека на масштабах временах свыше 1 пс, когда релаксация электронной структуры в значительной степени завершена и на первый план выходит диссипация энергии, накопленной в ионной подсистеме в локальной области вблизи траектории пролета частицы. На таких временах вполне обоснованным является примененный автором метод молекулярно-динамического (МД) моделирования. При моделировании использовался потенциал Мацуи, достаточно разумно воспроизводящий структуру альфа-оксида алюминия (корунда). Дополнительные проверочные расчеты, проведенные автором, продемонстрировали сравнительно неплохое воспроизведение параметров теплового расширения и температуры плавления корунда при МД моделировании, что позволяет ожидать адекватного описания поведения материала при локальном нагреве в области трека.

Далее автором проведены расчеты остывания материала в цилиндрической области вокруг оси трека с использованием в качестве начальных условий расчетных энерговыделений для конкретных систем, рассчитанных в разделе 2, а именно треков быстрых ионов висмута и ксенона. Полученные в результате расчетов данные были сравнены с результатами прямых экспериментов, выполненных в ИОЯИ (Дубна) с участием автора. При этом следует особо отметить, что даже заранее непредсказуемые результаты моделирования (в частности, образование зон пониженной плотности материала в треке) оказалось качественно подтверждены экспериментальными измерениями. Одним из важных выводов автора является указание на более легкое повреждение подрешетки алюминия. Хотя подобное утверждение и можно встретить в литературе, но они связаны скорее с баллистическим выбиванием атомов алюминия в процессе упругих столкновений, а не с действием теплового пика. Несомненным достоинством проведенного моделирования является неоспоримая демонстрация того факта, что окончательный диаметр зоны поврежденного материала в треке в оксиде алюминия оказывается значительно меньше максимальной зоны плавления. Это неоспоримо показывает, что для определения размера трека в материалах со сравнительно небольшой теплопроводностью принципиально необходимо учитывать возвратную рекристаллизацию. Интересным, хотя и довольно естественным, представляется также наблюдение автором затухающих волн плотности в треке в процессе его остывания. Варьируя плотность энерговыделения в треке при задании начальных условий для МД моделирования, автору удалось оценить пороговую величину электронных потерь БТИ, необходимую для образования видимых структурных изменений в треке, которая оказалась очень близка к недавним прямым экспериментальным измерениям. Наконец, прямым моделированием автору удалось продемонстрировать эффект залечивания треков при прохождении в их непосредственной близости (не далее 6 нм) последующих треков. Как можно понять из диссертации, эффект связан с отмеченным выше довольно большим размером зоны расплавления вблизи трека, которая разрушает структуру старого трека, а затем рекристаллизуется с образованием заметно более узкой области с остаточным повреждением.

Таким образом, в работе получен ряд новых интересных результатов, достоверность и обоснованность которых обусловлены формулировкой модели на основе ясных и подтвержденных экспериментом базовых концепций статистической и квантовой механики, радиационной физики, теории конденсированного состояния и теории дефектов,

обоснованным применением апробированных современных численных методов, а также крайне небольшим числом используемых в модели свободных параметров. Успешность модели подтверждается хорошим согласием ее предсказаний с результатами экспериментов при использовании разумных значений свободных параметров без предварительной подгонки этих значений под объясняемые результаты.

Полученные в работе результаты имеют несомненную научную и практическую ценность. Проведенные исследования являются шагом вперед в создании комплексной многоуровневой модели взаимодействия быстрых тяжелых ионов с веществом, которая включала бы в себя понимание и описание динамики создания быстрым заряженным ионом сильного электронного возбуждения в локальной области трека, процессов дальнейшей диссипации энергии, вкачанной в электронную подсистему материала, а также результирующих изменений в ионной подсистеме (разогрев, структурные и размерные изменения и т.п.). С практической точки зрения наличие такой модели крайне полезно не только для планирования и корректной интерпретации результатов дальнейших экспериментов на мегаустановках типа NICA и FAIR, но и для оптимизации параметров уже существующих и вновь разрабатываемых нанотехнологических приложений.

По тексту диссертации и автореферата можно сделать несколько вопросов и замечаний.

- в разделе 2.1.3 следовало бы подробнее объяснить, как именно проводился расчет средней длины пробега электрона в оксиде алюминия, не ограничиваясь ссылкой на формулу (2.1), которая, строго говоря, к длине пробега имеет очень опосредованное отношение.

- в том же разделе стоило бы пояснить, как именно рассчитывались ионизационные потери с помощью внешних программ (SRIM, CasP), а также чем хороши именно эти программы как эталоны для сравнения?

- в разделе 2.2.2 п.7 упоминается, что выбивание электрона с глубокого уровня в рамках модели происходит, если переданная энергия превышает потенциал ионизации. Имело бы смысл пояснить, какой именно потенциал ионизации имеется в виду. Потенциал ионизации свободного атома? Или глубина электронного уровня атома в кристалле по отношению к дну зоны проводимости? Или к вакууму? Согласно каким источникам оценивались потенциалы ионизации?

- при определении начальных распределений скоростей атомов мишени неявно предполагается термализация атомов в цилиндрических слоях вокруг оси трека с температурой, соответствующей локальному энерговыделению в ионную подсистему согласно расчетам главы 2. Между тем, кажется довольно естественным предполагать, что разлет электронов должен вызывать преимущественную ориентацию начальных скоростей атомов в направлении от оси трека. Насколько можно понять из текста диссертации, на данном этапе разработки кода TREKIS невозможно оценить пространственное распределение передаваемых атомам импульсов в зависимости от расстояния до оси трека. Каковы перспективы модернизации кода с целью реализации такой возможности?

Однако следует отметить, что наличие ряда замечаний не снижает ценности проделанной работы, а скорее подчеркивают сложность задачи, на решение которой замахнулся автор, и в значительной мере являются рекомендациями, которые автору и его коллегам стоило бы учесть при проведении дальнейших исследований.

Автореферат и публикации правильно и достаточно полно отражают содержание диссертационной работы. Основные результаты диссертации опубликованы в 12 научных

работах, из них 11 - в международных рецензируемых журналах входящих в перечень ВАК РФ, а также неоднократно докладывались на авторитетных отечественных и международных конференциях.

Диссертационная работа Рымжанова Руслана Аликовича является законченным научным исследованием. По актуальности, достоверности, научно-методическому уровню исследования, научной новизне и значимости полученных результатов диссертация соответствует «Положению о порядке присуждения ученых степеней» ВАК РФ и п.1 Паспорта специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния», а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния».

Ведущий научный сотрудник НИЦ «Курчатовский институт»,  
доктор физико-математических наук,

В.А. Бородин

Москва, 123182, пл. Акад. Курчатова, 1  
тел. 495 1969766  
e-mail: borodin\_va@nrcki.ru

Подпись В.А. Бородина заверяю

Главный ученый секретарь НИЦ «Курчатовский институт»,



С.Ю. Стремоухов