

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

кандидата физико-математических наук Старикова Сергея Валерьевича

на диссертационную работу Рымжанова Руслана Аликовича «Моделирование процессов возбуждения и релаксации электронной подсистемы монокристаллов оксидов, облучаемых быстрыми тяжелыми ионами», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Диссертация Рымжанова Руслана Аликовича посвящена актуальной проблеме радиационной физики твердого тела – описанию процессов, происходящих при облучении материалов тяжелыми ионами высоких энергий (более 1 МэВ/нуклон). Этот тип облучения имеет большое практическое значение, так как позволяет моделировать воздействие осколков деления и заряженных частиц в составе космических лучей на свойства различных материалов. Кроме того, в настоящее время высокоэнергетические тяжелые ионы активно используются для модификации свойств твердых тел на наноразмерном уровне, например для получения трековых мембран и наноструктур.

В диссертационной работе представлена разработка метода описания процессов образования треков тяжелых ионов высоких энергий, которая состоит из модели TREKIS, описывающей возбуждение и ионизацию электронной подсистемы материала, а также применения метода молекулярной динамики для описания релаксации решетки мишени. Работа представляет собой сочетание численного моделирования и экспериментальных исследований, в рамках которых объяснены полученные результаты и осуществлена проверка достоверности модели.

Ведение диссертационной работы посвящено описанию актуальности темы исследования, сформулированы цели и задачи работы, обоснована новизна и достоверность представленных результатов, а так же ее научно-практическая ценность.

В первой главе приводится литературный обзор современных моделей формирования поврежденных трековых областей. Анализируя недостатки и преимущества существующих подходов, автор работы формулирует цели и задачи исследования.

Во второй главе излагаются основные понятия Монте-Карло модели, разработанной для описания возбуждения электронной подсистемы материала. Для расчета сечений взаимодействия налетающей частицы со средой используется формализм динамического структурного фактора и комплексной диэлектрической функции. В работе отмечаются преимущества такого формализма: учет коллективных эффектов, присущих твердому телу. Также в главе приводятся результаты моделирования возбуждения электронной подсистемы оксида алюминия ионами ксенона и висмута с энергиями 167 и 700 МэВ соответственно. На основе анализа полученных данных автором сделаны выводы о кинетике возбуждения материала, в частности отмечена роль коллективных эффектов в формировании пространственного и энергетического распределения электронов, создаваемых тяжелым ионом. В работе впервые учитывается диффузия валентных дырок в треке высокоэнергетического тяжелого иона, а также показывается важность этой диффузии в процессах формирования поврежденной области.

В третьей главе приведены новые результаты моделирования структурных изменений при облучении материала тяжелыми ионами высоких энергий методами



молекулярной динамики. В начале главы автор обосновывает применимость используемого молекулярно-динамического потенциала для описания оксида алюминия. Далее приведены данные, полученные с помощью моделирования треков ионов различных энергий (Xe, Bi, Kr, Fe) и сравнение этих результатов с экспериментом. Модель показала хорошее согласие с данными просвечивающей электронной микроскопии в оценке размеров и структуры трека, относительной деформации решетки вокруг траектории иона. Одним из наиболее интересных результатов работы является наглядная демонстрация эффекта восстановления структуры материала при перекрытии трековых областей. На основе этого эффекта в работе объясняется экспериментально наблюдаемое насыщение плотности треков с ростом флюенса ионов. Содержание автореферата в полной мере отражает содержание основного текста диссертации.

Замечания по работе:

1) В подписи к рисунку 2.1 и при обсуждении его в тексте не указано для какого иона и для какого облучаемого материала рассчитаны данные зависимости.

2) Из рисунков 2.7 и 2.8 сложно понять насколько сильно нарушается локальная электронейтральность вещества, хотя во введении при описании модели кулоновского взрыва этому вопросу уделено большое внимание. Было бы корректно наряду с указанными рисунками привести пространственные распределения заряда с учетом электронов и дырок и проанализировать эволюцию этих распределений.

3) В главе 2 при описании процесса передачи энергии от электронной подсистемы к ионной, отсутствует верификация расчетов путем проверки выполнения закона сохранения энергии. Так как в любой момент времени сумма энергий всех подсистем (электронной, ионной и дырочной) должна соответствовать энерговкладу, то такая верификация была бы хорошим доказательством самосогласованности и точности метода расчета.

4) В главе три для расчета температуры плавления используется однофазное моделирование, которое обычно завышает температуру плавления на 10-15% из-за реализуемого в этом методе сильного перегрева вещества. Более корректным являлся бы расчет температуры плавления путем медленного нагрева системы с открытой поверхностью.

5) При описании структурных изменений, создаваемых БТИ, не описаны детали кинетики данных изменений, а лишь приводится описание конечных состояний. Из текста сложно понять образуются ли кластеры дефектов в результате кристаллизации расплавленной области или под действием других процессов (например, через релаксацию больших градиентов напряжений).

6) При описании моделирования последовательного пролета нескольких ионов (интерференция трековых областей) не указывается промежуток времени между треками отдельных ионов.

7) Так же в работе присутствуют некоторые опечатки и стилистические ошибки.

Указанные недостатки в целом не уменьшают достоверности и важности полученных результатов и выводов работы.

В заключение, хотелось бы отметить большой объем работы, проделанной соискателем на высоком уровне. Разработанный подход может с успехом применяться для описания повреждений в области треков быстрых тяжелых ионов в различных

материалах. Из содержания диссертации следует, что работа была выполнена в рамках международной коллаборации, при этом, можно заключить, что вклад автора при совместных работах по данной теме был определяющим.

Результаты диссертации Рымжанова Р.А. опубликованы в 12 статьях в известных рецензируемых журналах, 11 из которых входят в международные системы цитирований Web of Science и Scopus. Результаты работы были представлены на российских и международных конференциях.

Научная новизна, актуальность, практическая ценность полученных результатов, обоснованность и достоверность научных положений и выводов работы не вызывает сомнений. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Работа Рымжанова Р.А. выполнена на высоком научном уровне и полностью удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, безусловно, заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Сведения о составителе отзыва:

Стариков Сергей Валерьевич

Почтовый адрес: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2

Телефон: +7-495-485-85-45

Адрес электронной почты: starikov@ihed.ras.ru

Наименование организации: Объединённый институт высоких температур  
Российской академии наук (ОИВТ РАН)

Должность: старший научный сотрудник

Официальный оппонент,  
кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник  
ОИВТ РАН.

Подпись С.В. Старикова заверяю  
Ученый секретарь ОИВТ РАН  
д.ф.-м.н.



С.В. Стариков



19.10.2017



Р.Х. Амиров

19.10.2017