

УТВЕРЖДАЮ

Директор

НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ

к.ф.-м.н. В.Ю. Егорычев



« 12 » Октября 2017 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертацию Рымжанова Руслана Аликовича «МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВОЗБУЖДЕНИЯ И РЕЛАКСАЦИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ ОКСИДОВ, ОБЛУЧАЕМЫХ БЫСТРЫМИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Актуальность темы диссертационной работы

Исследование свойств материалов при облучении быстрыми тяжелыми ионами ($E \geq 1$ МэВ/а.е.м.), моделирующими воздействие осколков деления и космического излучения, представляет значительный интерес для изучения радиационной стойкости материалов ядерной энергетики и космической электроники. Основной отличительной особенностью взаимодействия ионов с веществом при таких энергиях является высокий уровень удельных ионизационных потерь энергии и, как следствие, формирование в целом ряде материалов зоны структурных нарушений, локализованной вокруг ионной траектории и называемой латентным треком.

Несмотря на значительное количество работ, в настоящее время нет единого представления о микроскопических механизмах образования треков. Поэтому развитие

модельных и численных методов образования треков высокоэнергетических ионов представляется актуальной задачей, поставленной в диссертационной работе Р.А. Рымжанова.

Диссертационная работа Р.А. Рымжанова направлена на разработку модели возбуждения электронной подсистемы материала в треках тяжелых ионов высоких энергий, а также на применение разработанной модели для описания кинетики возбуждения и релаксации перспективного материала ядерной энергетики – оксида алюминия – при облучении быстрыми тяжелыми ионами. Результаты моделирования сравнивались с данными исследований облученных образцов при помощи просвечивающей электронной микроскопии, что с одной стороны позволило верифицировать разработанную модель, а с другой стороны, объяснить наблюдаемое экспериментально насыщение плотности треков в изучаемом материале.

Структура и основное содержание работы

Диссертация состоит из введения, 3 глав и заключения и списка литературы из 163 наименований, изложенных на 109 страницах, включая 33 рисунка, 2 таблицы.

Во введении отмечена актуальность работы, сформулированы цели и задачи, научная новизна, а также результаты, выносимые на защиту. Приводится личный вклад автора и указаны опубликованные работы по теме диссертации.

Первая глава содержит обзор литературных данных по современным моделям образования треков высокоэнергетическими тяжелыми ионами, в ней проанализированы преимущества и недостатки каждого подхода. На основе этого анализа сформулированы цели и задачи работы.

Во второй главе разработана Монте-Карло-модель возбуждения и релаксации электронной подсистемы диэлектриков, облучаемых быстрыми тяжелыми ионами. Модель основана на формализме динамического структурного фактора и функции комплексной диэлектрической проницаемости. Представлены результаты применения модели для описания процессов, происходящих в треках ионов Хе с энергией 167 МэВ и Bi 700 МэВ в оксиде алюминия. Определены пространственно-временные параметры возбуждения электронной и ионной подсистем материала.

В третьей главе представлены результаты моделирования релаксации избыточной энергии решетки материала в треке быстрого тяжелого иона методами молекулярной динамики. Определены параметры области, в которой наблюдаются структурно-фазовые изменения при облучении тяжелыми ионами. Полученные в ходе моделирования результаты хорошо согласуются с данными исследований образцов

просвечивающей электронной микроскопии, что подтверждает применимость использованных приближений для описания процессов в треках высокоэнергетических тяжелых ионов.

В заключении приведены основные результаты и выводы работы.

Личный вклад автора состоит в разработке модели, описывающей кинетику возбуждения и релаксации электронной подсистемы вещества, использующей формализм комплексной диэлектрической проницаемости. Модель апробирована в экспериментах по облучению различных материалов пучками быстрых тяжелых ионов. В качестве исследуемого вещества автор выбрал оксид алюминия (Al_2O_3), для которого автором были определены конкретные параметры возбуждения электронной подсистемы. Методами молекулярной динамики исследована кинетика структурных изменений Al_2O_3 в треках тяжелых ионов. Определены размеры треков, а также распределения остаточных напряжений и плотности материала в дефектной области.

Текст автореферата полно отражает основное содержание диссертации, положения диссертационной работы, а также полученные результаты.

Научная новизна, обоснованность и достоверность результатов обеспечивается публикацией результатов в центральной научной печати, широким представлением работы на авторитетных международных и российских научных конференциях и согласием результатов конкретных расчетов автора с данными, приведенными на электронных ресурсах NIST, согласием с вычислениями с использованием программных пакетов SRIM, CASP и LAMMPS. Также следует отметить удовлетворительную ясность физических идей, заложенных в развитую автором модель.

Научная и практическая значимость работы состоит в том, что полученные в ней результаты будут полезны в дальнейших экспериментальных и теоретических исследованиях по применению оксидов в радиационной физике и современном приборостроении.

Публикации автора по теме диссертационного исследования

Основные результаты работы опубликованы в 11 печатных изданиях, индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus.

Результаты работы докладывались и обсуждались на девяти международных, всероссийских и отраслевых конференциях, а также на научных семинарах в ведущих отечественных институтах.

Замечания по диссертационной работе:

- 1) В работе не обсуждается применимость основной формулы (2.1), описывающей сечение взаимодействия, для многократного рассеяния, а так же не оценивается какова реальная кратность рассеяния пролетающих частиц (ионов).
- 2) Недостаточно ясно охарактеризована временная граница перехода от описания возбуждений электронной подсистемы вещества с помощью комплексной диэлектрической проницаемости к описанию релаксации решетки посредством метода молекулярной динамики.
- 3) На рассматриваемых в работе временах (~ 100 фс), в возбужденной быстрым тяжелым ионом электронной подсистеме материала может наблюдаться электронно-дырочная рекомбинация. Для дырок, находящихся на глубоких оболочках, развитая автором модель учитывает процессы Оже-рекомбинации и радиационные распады. Однако, не вполне понятно, какие механизмы электронно-дырочной рекомбинации учтены в случае дырок валентной зоны.
- 4) Вследствие различия в подвижностях электронов и дырок при диффузии из трека иона возникает локальное электрическое поле (нарушение амбиполярности). Согласно результатам моделирования (рис. 2.7-2.8, 2.10) быстрые электроны удаляются от центра трека на расстояния, превышающие удаление дырок. Учитывалось ли в представленной модели влияние локального электрического поля на динамику частиц, сгенерированных в треке?
- 5) При определении размеров треков тяжелых ионов высоких энергий (разделы 3.2.1. и 3.2.2), автор не приводит строгого критерия определения размера трека, что может привести к погрешности в оценке пороговой ЛПЭ образования трека.

Заключение

В целом 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. Результаты данной работы могут быть использованы для оценок радиационной стойкости и деградации конструкционных материалов ядерных установок. По актуальности тематического направления, важности поставленных задач, научной

новизне, практической значимости и достоверности полученных результатов, обоснованности основных выводов и положений представленная диссертационная работа удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, **Рымжанов Руслан Аликович**, заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Отзыв составлен по результатам обсуждения диссертации Рымжанова Руслана Аликовича «МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВОЗБУЖДЕНИЯ И РЕЛАКСАЦИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ ОКСИДОВ, ОБЛУЧАЕМЫХ БЫСТРЫМИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ» и утвержден на заседании секции № 4 ученого совета НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ 10 октября 2017 г., протокол № 4. На заседании присутствовали 5 докторов и 2 кандидата наук.

Текст отзыва составил д.ф.-м.н. С.В. Степанов.

Председатель секции №4 ученого совета
НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ,

д.ф.-м.н., профессор

Джепаров Ф.С.

Секретарь секции №4 ученого совета
НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ,

д.ф.-м.н.

Степанов С.В.

Подписи Джепарова Фридриха Саламоновича и Степанова Сергея Всеволодовича заверяю.

к.ф.-м.н.

В.В. Васильев

Ученый секретарь НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ

