

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о работе Воронкова Романа Анатольевича по кандидатской диссертации «Моделирование эффектов, связанных с изменением межатомного потенциала, вызванного экстремальным возбуждением электронной подсистемы диэлектриков, облучаемых быстрыми тяжелыми ионами и фемтосекундными лазерными импульсами», представленной к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

С 2011 года Р.А. Воронков обучался в Московском Инженерно-Физическом Институте (Национальном Исследовательском Ядерном Университете) на кафедре Теоретической Ядерной Физики, где в 2016 году, под моим руководством, успешно защитил дипломную работу, связанную с исследованием кинетики экстремально возбужденной электронной подсистемы, реализующейся в наноразмерных треках быстрых тяжёлых ионов (БТИ), тормозящихся в веществе в режиме электронных потерь энергии. После окончания МИФИ, с 1 июля 2016 года Р.А. Воронков был зачислен по конкурсу в аспирантуру ФИАН по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика, где он продолжил под моим руководством работу по вышеуказанной тематике.

Изучение кинетики возбуждения треков БТИ имеет фундаментальное значение для построения модели возникновения экстремального состояния вещества, поскольку нанометрический пространственный и фемто-пикосекундный временной масштабы возбуждения материала в треке БТИ затрудняют применение устоявшихся моделей, основанных на макроскопических предположениях. В связи с этим, остро востребовано построение адекватной количественной модели кинетики трека, основанной на наиболее общих физических принципах.

На текущий момент в нашей группе разработана модель формирования трека БТИ, основанная на комбинации оригинальной Монте-Карло программы TREKIS, описывающей начальное возбуждение электронной подсистемы и молекулярной динамики (МД) решётки. Однако, первые версии этой модели не учитывали все возможные эффекты, возникающие при подобном экстремальном возбуждении материала. Например, не учитывался эффект изменения межатомного потенциала под действием электронного возбуждения. Этот эффект ярко проявляется в структурных изменениях материалов, облучаемых фемтосекундными лазерными импульсами. Реализуемые на фемтосекундной шкале, подобные изменения происходят без существенного повышения атомной температуры, т.е. являются атермическими превращениями.

Хотя первые атермические эффекты в лазерных экспериментах наблюдались несколько десятилетий назад, на текущий момент изучено только очень ограниченное

количество простых веществ. Исследования, покрывающий широкий класс материалов остро востребованы, как для развития физических моделей явления, так и для формирования физической основы для приложений.

Кроме этого, атермические эффекты никогда прежде не рассматривались в контексте треков БТИ, и до сих пор вопрос о значимости этих эффектов для кинетики трека остаётся открытым.

Решая обе эти задачи, при работе над диссертацией Р.А. Воронков прежде всего использовал Монте-Карло программу TREKIS для детального моделирования временной эволюции электронной подсистемы в окрестности траекторий быстрых тяжёлых ионов в различных веществах. Были определены характерные пространственно-временные масштабы электронных возбуждений и характерные электронные температуры в исследуемых материалах. Эти данные сформировали начальные условия для изучения значимости атермических эффектов в треках.

Одна из сложностей моделирования атермических превращений заключается в необходимости использования *ab-initio* методов квантовой механики, которые требуют сложных расчетов на вычислительных кластерах. На основании анализа существующих методов, для моделирования атермических эффектов Р.А. Воронковым была выбрана методика теории функционала плотности (ТФП) и её реализация с помощью открытого кода Quantum Espresso (QE). Основанием для этого выбора явилось то, что ТФП с одной стороны обеспечивает хорошую точность результатов, а с другой стороны не слишком ресурсоемка и на данный момент позволяет моделировать на высокопроизводительных компьютерных кластерах ансамбли, состоящие из порядка сотни атомов.

Применимость построенной модели атермических превращений, основанной на реализации кодом QE метода ТФП, была проверена на примере алмаза. Алмаз был выбран в качестве тестовой системы, поскольку для него проводилось несколько экспериментов по облучению фемтосекундными лазерными импульсами, показавшие его атермическую графитизацию за 150-200 фс при поглощенной дозе ~ 0.7 эВ/атом. Результаты моделирования показали хорошее соответствие с экспериментом, что подтвердило применимость используемой модели для описания атермических превращений, вызываемых сильным возбуждением электронной подсистемы материала.

Следующим этапом в работе Р.А. Воронкова было моделирование атермической нестабильности атомной подсистемы Al_2O_3 . Результаты моделирования показали возможность кратковременного существования суперионного состояния в этом материале после облучения фемтосекундным лазером – состояния, в котором одна из подрешеток (кислород) находится в жидкой фазе, а другая (алюминий) – в твердой. Опубликованные

результаты этого исследования по суперионному оксиду алюминия сразу привлекли внимание нескольких экспериментальных групп, которые предложили провести эксперименты (“Superionic State in Al_2O_3 under FEL irradiation” (European XFEL, Гамбург) и “Observation of Superionic Behavior in X-ray Irradiated Solids” (SPring-8, Сайо) на установках в Германии и Японии.

Другим важным результатом стал вывод о том, что значительные атермические структурные изменения в треках БТИ маловероятны в Al_2O_3 , поскольку необходимая для этих превращений высокая электронная температура возникает вблизи траектории БТИ лишь на очень коротких временах после пролёта иона (~ 100 фс). Для того, чтобы проверить, что случай Al_2O_3 не уникален для треков БТИ, а также изучить, как разные вещества реагируют на электронные возбуждения характерные для облучения лазером, Р.А. Воронков провел аналогичные исследования материалов (Y_2O_3 , TiO_2 , $NaCl$, KBr , LiF) с различной степенью ионности связей и с различной шириной запрещенной зоны.

Анализ полученных результатов показал, что кинетика атомной подсистемы слабо зависит от вида связей или ширины запрещенной зоны и отличается от материала к материалу. Однако, было установлено, что соединения с более высокой ионностью связей демонстрируют большую стабильность запрещенной зоны при атермических превращениях, стимулированных сильным возбуждением электронной подсистемы. Это указывает на то, что, подбирая материал и параметры облучения, возможно динамически контролировать зонную структуру диэлектрической или ковалентной мишени, изменяя параметры лазерного излучения, что может способствовать развитию нового типа электроники с регулируемой на фемтосекундных масштабах проводимостью.

Для треков БТИ же интересным результатом является то, что даже при явно не проявляющихся атермических изменениях структуры, в ковалентных и слабоионных соединениях высока вероятность существенного сужения или коллапса запрещенной зоны даже за характерные времена электронных возбуждений в треках, что может влиять на кинетику релаксации возбужденной области.

Вышеупомянутые результаты были недавно опубликованы в Scientific Reports и уже вызвали повышенный интерес у экспериментального сообщества.

Для успешного решения поставленных перед Р.А. Воронковым задач потребовались как знание фундаментальных основ различных областей физики и владение физико-математическими и численными методами, так и хорошо отработанные навыки быстрого поиска, обработки и анализа информации, программирования и представления результатов работы перед международным научным сообществом в виде хорошо воспринимаемых научных докладов и статей.

Р.А. Воронков продемонстрировал способность к самостоятельной работе и быстрому самообучению. К примеру, указанные выше теория функционала плотности и программный пакет на ее основы были освоены Р.А. Воронковым полностью самостоятельно, без посторонней помощи. Т.о. его квалификация позволяет ему самостоятельно ставить и решать научные задачи на современном высоком международном уровне.

Диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям к кандидатским диссертациям, установленным Положением о порядке присуждения учёных степеней. Считаю, что Р.А. Воронков достоин присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

Научный руководитель:

старший научный сотрудник

Федерального государственного бюджетного

учреждения науки Физического института

им. П. Н. Лебедева Российской Академии наук (ФИАН),

кандидат физико-математических наук

Волков Александр Евгеньевич

119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д. 53

тел. +7(499) 135-87-18, e-mail: a.e.volkov@list.ru

Подпись Волкова А.Е. удостоверяю:

Учёный секретарь ФИАН

Колобов А.В.



07.09.20