

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу Воронкова Романа Анатольевича
«Моделирование эффектов, связанных с изменением межатомного потенциала, вызванного экстремальным возбуждением электронной подсистемы диэлектриков, облучаемых быстрыми тяжелыми ионами и фемтосекундными лазерными импульсами», представленную к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика

Актуальность и практическая значимость исследований физики взаимодействия быстрых тяжелых ионов (БТИ) и фемтосекундных лазеров на свободных электронах (ЛСЭ) с конденсированным веществом обусловлена значимостью приложений результатов этих исследований к разработке радиационно-стойких материалов, исследованиям процессов в ядрах планет, а также медико-биологическим задачам.

Характерной особенностью воздействия БТИ и ЛСЭ на материалы и объекты является то, что почти вся передаваемая в мишень энергия идет на возбуждение электронной подсистемы в наноразмерной окрестности траектории (треке) БТИ или в пятне ЛСЭ. Последующую кинетику облученной области рассматривают как последовательность процессов возбуждения и термализации электронной подсистемы, передачи энергии в решетку и последующее движение атомов, приводящее к структурным изменениям.

При таком рассмотрении, однако, не учитывается тот факт, что атомы могут начать двигаться еще на стадии возбуждения-начальной релаксации электронной подсистемы, поскольку её возбуждение изменяет межатомный потенциал, что может вызвать атермическую неустойчивость решётки, вызванную деформацией или исчезновением потенциальных ям для атомов облучаемого материала. В работе Воронкова Р.А. ставятся задачи оценки значимости атермического эффекта для треков БТИ и установления общих закономерностей атермических превращений в различных диэлектрических

материалах.

Глава 1 представляет собой обзор современного состояния исследований в области взаимодействия БТИ и ЛСЭ с веществом. Рассматриваются основные процессы, происходящие в мишени после облучения, прикладные задачи и наиболее часто используемые теоретические модели. Делается вывод о том, что эффект изменения межатомного потенциала может играть значительную роль в случае взаимодействия ЛСЭ с веществом, но требует более тщательного изучения, а в случае треков БТИ возможность возникновения и роль атермического эффекта до конца не ясны, в связи с чем требуются исследования, проясняющие этот вопрос.

В Главе 2 с помощью Монте-Карло моделирования определяются характерные параметры возбужденной электронной подсистемы после пролета иона V_i в ZnO и MgO . Подробно разбирается используемая модель и методология построения сечений рассеяния для нее. Анализируется характерное время электронных возбуждений, пространственно-временные распределения электронной температуры и плотности электронов в зоне проводимости. Эти данные сравниваются с данными для оценки значимости атермических эффектов для треков БТИ.

В Главе 3 излагается общий подход к моделированию атермических фазовых переходов, дается краткий обзор современных *ab-initio* моделей, подходящих для такого моделирования. На основе анализа этих моделей делается выбор в пользу теории функционала плотности, излагаются ее основы и детали ее численной реализации.

Результаты моделирования атермических фазовых переходов в различных диэлектриках даются в главе 4. Выбранная методика верифицируется сравнением результатов моделирования с экспериментальными данными по графитизации алмаза, после чего применяется для аналогичного моделирования в других диэлектриках.

Полученные результаты работы определяют **ее научную значимость**. Основными результатами диссертации являются:

А) Выявление возможности создания суперионной фазы в оксиде алюминия с помощью электронных возбуждений;

Б) Предсказание возникновения новой фазы оксида титана;

В) Установление зависимости между степенью ионности связей и стабильностью запрещенной зоны при атермических превращениях в различных диэлектриках;

Г) Демонстрация того, что небольшие атермические движения атомов в треках БТИ могут вызывать существенное сужение запрещенной зоны и влиять на дальнейшую кинетику трека;

Д) Предсказание пороговых параметров электронной подсистемы (температуры, поглощенной дозы, число электронов в зоне проводимости), вызывающих атермические превращения в пятнах ЛСЭ для Al_2O_3 , Y_2O_3 , TiO_2 и NaCl .

Все указанные результаты являются **новыми** и ранее не опубликованными. **Достоверность** подтверждается обоснованным использованием первопринципных расчетов, сравнением части результатов с экспериментом, публикациями в рецензируемых журналах и апробацией на различных международных конференциях.

Тем не менее, диссертация не лишена недостатков:

1) Вывод о значимости изменения межатомного потенциала в треках БТИ делается на основании сравнения уровней электронных возбуждений в треках БТИ в MgO и ZnO с пороговыми температурами, вызывающими атермические превращения в Al_2O_3 , Y_2O_3 и т.д. Хотя и ожидается, что характерные уровни возбуждений примерно одинаковы во всех веществах, было бы логичнее проводить сравнение в рамках одних и тех же веществ.

2) В главе 2 приведено кк-правило сумм для ZnO , которое должно стремиться к единице, но отличается от нее почти на 15%. Автору стоило прокомментировать насколько критично такое отклонение и чем оно могло быть вызвано.

Отмеченные недостатки не влияют на главные результаты работы. Автореферат полностью отражает содержание диссертационной работы. Основные положения диссертации опубликованы в 3 научных работах в ведущих рецензируемых научных изданиях из Перечня ВАК. Результаты исследования апробированы на международных и всероссийских конференциях и семинарах.

По объёму, научному уровню и ценности результатов диссертационная работа соответствует критериям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, установленным «Положением о порядке присуждения ученых степеней», утверждённым постановлением Правительства РФ (№ 842, от 24 сентября 2013 г.), требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук и паспорту специальности 01.04.02 по физико-математическим наукам, а её автор – Воронков Роман Анатольевич достоин присвоения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Официальный оппонент:

Начальник отдела атомно-масштабных и ядерно-физических методов исследования материалов ядерной техники Федерального государственного бюджетного учреждения «Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

доктор физ.-мат. наук



Рогожкин Сергей Васильевич

«19» ноября 2020

117218 Россия, Москва, Ул. Большая Черемушkinsкая, 25

Тел.: +7 (499) 789 6374; E-mail: sergey.rogozhkin@itep.ru

Подпись Рогожкина С.В. удостоверяю
Ученый секретарь
НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ, к.ф.-м.н.



Васильев В.В.

Список основных работ оппонента по теме защищаемой диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. S.V. Rogozhkin, A.A. Nikitin, A.A. Khomich, A.A. Lukyanchuk, O.A. Raznitsyn, A.S. Shutov, P.A. Fedin, T.V. Kulevoy, A.L. Vasiliev, M.Yu. Presniakov, A. Möeslang, R. Lindau, P. Vladimirov, The influence of Fe ion irradiation on the microstructure of reduced activation ferritic-martensitic steel Eurofer 97, *Nuclear Fusion*, 2019, V. 59, 086018 (6pp), DOI: 10.1088/1741-4326/ab1e18
2. Rogozhkin S.V., Nikitin A.A., Khomich A.A., Iskandarov N.A., Khoroshilov V.V., Bogachev A.A., Lukyanchuk A.A., Raznitsyn O.A., Shutov A.S., Kulevoy T.V., Fedin P.A., Vasiliev A.L., Presnyakov M.Yu., Study of microscopic origins of radiation hardening of Eurofer 97 in simulation experiment with ion irradiation. *Inorganic materials: Applied research*, 2019, Vol. 10, No. 2, pp. 333-338. DOI: 10.1134/S2075113319020357
3. S.V. Rogozhkin, N.A. Iskandarov, A.A. Lukyanchuk, A.S. Shutov, O.A. Raznitsyn, A.A. Nikitin, A.G. Zaluzhnyi, T.V. Kulevoy, R. P. Kuibida, S.L. Anfrianov, M.V. Leontyeva-Smirnova, E.M. Mozhanov, A.A. Nikitina, Study of Nanostructure of Ferritic-Martensitic Steel ChS-139 in initial state and after Fe Ion Irradiation. *Inorganic materials: Applied research*, 2018, Vol. 9, No. 2, pp. 231–238. DOI: 10.1134/S2075113318020247
4. S. Rogozhkin, A. Bogachev, A. Nikitin, A. Vasiliev, M. Presnyakov, V. Skuratov, M. Tomut, C. Trautmann, Effect of high-energy heavy ion irradiation on the nanoscale state of promising titanium alloys and ODS steel, *GSI-FAIR Scientific Report 2017, RESEARCH-APPA-MF-5*, p. 199, *GSI Report 2018-1*, DOI:10.15120/GSI-2017-01856
5. S. V. Rogozhkin, A. A. Bogachev, N. N. Orlov, O. A. Korchuganova, A. A. Nikitin, A. G. Zaluzhnyi, M. A. Kozodaev, T. V. Kulevoy, R. P. Kuibida, P. A. Fedin, B. B. Chalykh, R. Lindau, Ya. Hoffman, A. Möslang, P. Vladimirov, M. Klimenkov. Transmission electron microscopy study of the heavy-ion-irradiation-induced changes in the nanostructure of oxide dispersion strengthened steels. *Russian Metallurgy (Metally)*, Vol. 2017, No. 7, pp. 554-560, DOI: 10.1134/S0036029517070126
6. S.V. Rogozhkin, A.A. Nikitin, N.N. Orlov, T.V. Kulevoy, P.A. Fedin, O.A. Korchuganova, M.A. Kozodaev, A.L. Vasiliev, A.S. Orekhov, N.N. Kolobyлина, V.P. Leonov, I.A. Schastlivaya, Microstructure of Ti–5Al–4V–2Zr alloy in the initial condition and after irradiation with titanium Ions, *Inorganic Materials: Applied Research*, 2017, Vol. 8, No. 2, p. 279–285. DOI: 10.1134/S2075113317020216
7. S. Rogozhkin, A. Bogachev, O. Korchuganova, A. Nikitin, N. Orlov, A. Aleev, A. Zaluzhnyi, M.Kozodaev, T. Kulevoy, B. Chalykh, R. Lindau, A.

- Möslang, P. Vladimirov, M. Klimenkov, M. Heilmaier, J. Wagner, S. Seils. Nanostructure evolution in ODS steels under ion irradiation. *Nuclear Materials and Energy*. 2016, V. 9, P. 66-74. DOI:10.1016/j.nme.2016.06.011
8. Korchuganova O, Thuvander M, Aleev A, Rogozhkin S, Boll T, Kulevoy T, Microstructural evolution of Fe-22%Cr model alloy under thermal ageing and ion irradiation conditions studied by atom probe tomography. *Journal of Nuclear Materials*, 2016, V. 477, P. 172–177. DOI:10.1016/j.jnucmat.2016.05.007
9. S. V. Rogozhkin, N. N. Orlov, b, A. A. Aleev, A. G. Zaluzhnyi, M. A. Kozodaev, R. P. Kuibida, T. V. Kulevoi, A. A. Nikitin, B. B. Chalykh, R. Lindau, A. Möslang, and P. Vladimirov. Nanostructure evolution in ODS Eurofer steel under irradiation up to 32 dpa. *The Physics of Metals and Metallography*, 2015, V. 116, 1, pp. 72-78