

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию 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 на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика

Строение вещества в экстремальных условиях важно исследовать как в термодинамически равновесных состояниях, так и в сильно неравновесных. Именно последним посвящена рассматриваемая диссертация Р.А. Воронкова. В ней изучаются и моделируются неравновесные состояния, возникающие при взаимодействии быстрых тяжелых ионов (БТИ) и фемтосекундных импульсов лазеров на свободных электронах (ЛСЭ) с конденсированным веществом, а конкретно, изменения межатомного потенциала диэлектриков под действием электронного возбуждения в треках БТИ и пятнах ЛСЭ, и эффекты, связанные с этим явлением.

Эта проблема очень актуальна и может иметь критическое значение при описании структурно-фазовых изменений в веществах, облучаемых БТИ или ЛСЭ. Подобное облучение имеет большое количество прикладных и научных применений. Понимание процессов в облученной мишени и создание соответствующих теоретических моделей имеет важное значение при разработке методов контролируемой наномодификации материалов.

На сегодняшний день достоверно известно, что изменение межатомного потенциала при ЛСЭ-облучении диэлектриков проявляется в виде атермических фазовых переходов (переходы без существенного повышения температуры решетки), но пока исследовано очень ограниченное количество материалов. Не установлены фундаментальные факторы,

вызывающие подобные превращения. Атермические эффекты часто не учитываются при построении теории формирования треков БТИ.

Диссертация Воронкова Р.А. проясняет значимость атермических эффектов при формировании треков БТИ в различных диэлектриках. В диссертации демонстрируется атермическое возникновение необычных фаз в этих материалах и устанавливаются закономерности их появления.

В диссертации использовались современные методы численного моделирования с использованием расчетов на суперкомпьютерах (компьютерных кластерах) НИЦ Курчатовский институт и Центра по изучению тяжелых ионов имени Гельмгольца (GSI, Дармштадт, Германия). Для описания кинетики возбужденной электронной подсистемы в треке БТИ применялась основанная на методе Монте-Карло модель TREKIS, использующая сечения рассеяния заряженных частиц на пространственно и динамически связанной системе рассеивателей.

Моделирование структурных модификаций, стимулированных изменениями межатомного потенциала, проводилось методом молекулярной динамики на основе теории функционала плотности. Данный подход, в отличие от классической молекулярной динамики, не использует фиксированных межатомных потенциалов, а вычисляет их на каждом шаге исходя из текущего состояния электронной подсистемы материала.

Достоверность полученных в диссертации результатов базируется на согласовании результатов моделирования атермической графитизации алмаза с экспериментальными данными и на обоснованном использовании теории функционала плотности – одного из самых точных методов моделирования.

Новизна полученных результатов не вызывает сомнений. Одним из главных результатов является впервые проделанное моделирование атермического фазового перехода в суперионное состояние в оксиде алюминия. В случае экспериментального подтверждения при облучении ЛСЭ, этот результат откроет новые возможности для получения и исследования суперионных состояний. В работе предсказано существование

полуаморфной (упорядоченная подрешетка алюминия и неупорядоченная кислородная подрешетка) фазы в  $Al_2O_3$ , получаемой в результате стабилизации суперионной фазы приложенным экстремальным давлением  $\sim 400$  ГПа. Также предсказан и атермический фазовый переход  $TiO_2$  в ранее не описанную в литературе фазу близкую к фазе с пространственной группой Ia-3 и имеющую предпосылки оставаться метастабильной при обычных условиях. Кроме того, определены пороговые электронные температуры, приводящие к атермическому изменению структуры и коллапсу запрещенной зоны в  $Al_2O_3$ ,  $TiO_2$ ,  $Y_2O_3$ ,  $NaCl$ . Сделан вывод о зависимости стабильности запрещенной зоны при атермических превращениях от степени ионности межатомных связей материала. Определена значимость атермических эффектов при образовании треков после пролета БТИ.

Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения.

Во введении подробно обосновывается актуальность работы, отмечаются проблемы, стоящие перед диссертантом, определены цели и задачи работы, личный вклад автора, а также перечислены положения, выносимые на защиту. Первая глава содержит научный обзор физических явлений и моделей взаимодействия быстрых тяжелых ионов и фемто-секундных лазеров с веществом с подробным анализом приближений, лежащих в основе этих моделей. Она демонстрирует широкую эрудицию автора и знание самых современных методов исследования.

Во второй главе диссертации с использованием программы TREKIS получены характерные параметры электронного возбуждения в треках БТИ в  $MgO$  и  $ZnO$ . Выбор этих материалов связан с тем, что они чрезвычайно устойчивы к радиационному повреждению, вызванному осколками деления ядер и быстрыми тяжелыми ионами, замедляющимися в режиме электронных потерь энергии, что делает эти материалы перспективными для применения в ядерных и космических технологиях.

Третья глава посвящена методологии моделирования эффекта изменения межатомного потенциала, вызванного экстремальным

возбуждением электронной подсистемы диэлектриков. Обосновывается необходимость использования первопринципных расчётов, дается их краткий обзор и обосновывается выбор одного из методов расчёта. Проводится тестирование метода на примере кристалла алмаза.

В четвертой главе приведены результаты первопринципных расчётов на основе программного пакета Quantum Espresso, включающего также молекулярную динамику атомных систем. Изучены атермические превращения в различных диэлектриках и полупроводниках при условиях, соответствующих электронным возбуждениям в треках БТИ и пятнах ЛСЭ.

По диссертации Р. А. Воронкова у меня имеются следующие критические замечания.

1). Не указано, какая именно из множества существующих аллотропных модификаций оксида титана использовалась в моделировании как исходная.

2). Моделирование атермических процессов в  $Y_2O_3$  и  $TiO_2$  проводилось как для ансамблей с постоянным объемом, так и с постоянным давлением. Для остальных материалов, рассмотренных в диссертации, результаты моделирования при постоянном давлении отсутствуют.

3). Не приведены положения атомов для предсказанной в диссертации Ia-3 фазы оксида титана.

Указанные замечания носят скорее технический характер и не снижают высокую ценность диссертации. Диссертация является законченным научно-исследовательским трудом, выполненным автором на высоком научном уровне. Полученные автором результаты достоверны, выводы и заключения обоснованы. Работа базируется на достаточном числе исходных данных, примеров и расчетов. По каждой главе и работе в целом сделаны четкие выводы. Результаты диссертации Р.А. Воронкова опубликованы в высокорейтинговых журналах и апробированы на международных научных конференциях. Автореферат соответствует основному содержанию диссертации. Сам Р.А. Воронков стал уже вполне сложившимся учёным, способным вести самостоятельную научную работу. Диссертация написана

ясным языком, имеет очевидное теоретическое и практическое значение, удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор Р.А. Воронков, несомненно, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – «Теоретическая физика».

Официальный оппонент:

Главный научный сотрудник отдела теоретических исследований

Института кристаллографии им. А.В. Шубникова

Федеральный Научно-Исследовательский Центр

«Кристаллография и фотоника»

Российской Академии Наук

доктор физ.-мат. наук



Дмитриенко Владимир Евгеньевич

«16» ноября 2020 г.

119333, г. Москва, Ленинский проспект, д. 59

+7 (499) 135-63-11

[dmitrien@crys.ras.ru](mailto:dmitrien@crys.ras.ru)

Подпись В.Е. Дмитриенко удостоверяю.

Учёный секретарь ФНИЦ

"Кристаллография и фотоника" РАН, к.ф.-м.н.



Л.А. Дадинова

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

1. Dmitrienko, V. E., Chizhikov V. A. Infinite family of bc8-like metastable phases in silicon // *Physical Review B*. 2020. V. 101. P. 245203.
2. Овчинникова Е.Н., Дмитриенко В.Е., Козловская К.А., Рогалев А. Поляризационный анализ для выделения резонансного вклада в разрешенные рентгеновские отражения // *Письма в ЖЭТФ*. 2019. Т. 110. Вып. 8. С. 563—568.
3. Орешко А.П., Милль Б.В., Овчинникова Е.Н., Рогалев А., Вильхельм Ф., Дмитриенко В.Е. Рентгеновский естественный круговой дихроизм в кристалле лангасита вблизи краев поглощения галлия и лантана // *Кристаллография*. 2018. Т. 63. №2. С. 176-183.
4. Beutier G., Collins S.P., Nisbet G., Pincini D., Dimitrova O.V., Ovchinnikova E.N., Dmitrienko V.E., Katsnelson M.I., Lichtenstein A.I., Mazurenko V.V., Kvashnin Y.O. Band filling control of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction in weakly ferromagnetic insulators // *Physical Review Letters*. 2017. Т. 119. № 16. P. 167-201.
5. Tsvyashchenko A.V., Sidorov V.A., Petrova A.E., Fomicheva L.N., Zibrov I.P., Dmitrienko V.E. Superconductivity and magnetism in noncentrosymmetric RhGe // *Journal of Alloys and Compounds*. 2016. Т. 686. С. 431-437.
6. Ovchinnikova E.N., Kozlovskaya K.A., Oreshko A.P., Rogalev A., Wilhelm F., Dmitrienko V.E. X-ray natural circular dichroism in copper metaborate // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2016. Т. 123. № 1. С. 27-32.
7. Pincini D., F. Fabrizi, G. Beutier, G. Nisbet, H. Elnaggar, V. E. Dmitrienko, M. I. Katsnelson, Y. O. Kvashnin, A. I. Lichtenstein, V. V. Mazurenko, E. N. Ovchinnikova, O. V. Dimitrova, and S. P. Collins. Role of the orbital moment in a series of isostructural weak ferromagnets. // *Physical Review B*. — 2018. V. 98. P. 104424-1 – 104424-16.
8. Dmitrienko V.E., Chizhikov V.A., Hidden order in URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>: Symmetry-induced antitoroidal vortices. // *Phys. Rev. B*. 2018. V. 98. P. 165118-1–165118-7.