

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

о работе Горбунова Сергея Александровича по кандидатской диссертации «Модель формирования треков быстрых тяжёлых ионов в твёрдых телах», представленной к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

**Актуальность.** Работа С. А. Горбунова посвящена разработке модели формирования треков быстрых тяжёлых ионов (БТИ) в твёрдых телах. Аргументированно показана актуальность темы исследований, связанной как с прикладными задачами по облучению материалов пучками БТИ, например, для производства нанопроволок и нанотрубок, микродиафрагм, фильтров высокой очистки различного назначения, для исследования стойкости материалов к облучению осколками деления, так и с фундаментальным интересом по описанию быстропротекающих процессов возбуждения и релаксации материалов в экстремальных условиях.

Автором проведен критический анализ современного состояния исследований по трековой тематике и моделей, разработанных для описания различных эффектов, стимулируемых прохождением БТИ через вещество.

Показано, что кинетика фемто-пикосекундного возбуждения материалов в треках БТИ и наноразмерных структурных изменений, вызываемых релаксацией этого возбуждения, как и кинетика травления треков, не могут быть описаны используемыми макроскопическими моделями. Аргументированно указано на необходимость разработки новой основанной на общих принципах мультимасштабной микроскопической модели формирования треков БТИ.

**Методы.** В части работы С. А. Горбуновым, в которой исследуется первичное возбуждение материалов в треках БТИ, используется метод молекулярной динамики (МД). В частности, этот метод применяется для расчёта сечений электрон-решёточного взаимодействия в рамках формализма динамического структурного фактора решётки материалов. Эти сечения использованы при моделировании возбуждения решётки материала при взаимодействии системой делокализованных электронов и для моделирования структурных изменений в треках БТИ.

МД методы применялись и для расчёта изменения удельной энергии Гиббса материала после пролёта иона в окрестности его траектории. Эта



энергия использовалась для оценки степени химической активации материала в окрестности траектории БТИ.

Теория активированного комплекса была применена С. А. Горбуновым для оценки степени химической активации оливина  $(\text{Mg}_x\text{Fe}_{1-x})_2\text{SiO}_4$  в треках БТИ. Этот материал входит в состав метеоритов и используется для фиксации по методике травления треков сверхтяжёлых ядер в составе галактических космических лучей.

С. А. Горбуновым предложена и аргументирована гипотеза, объясняющая химическую активацию этого материала в микрометрической окрестности траектории иона далеко за пределами области структурных изменений.

**Обоснованность.** С. А. Горбуновым представлены результаты МД моделирования возбуждения решётки материалов  $\text{Al}_2\text{O}_3$  при пролёте иона  $\text{Xe}$  176 МэВ и  $\text{LiF}$ ,  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  при пролёте иона  $\text{Au}$  2,1 ГэВ. Приведены результаты моделирования как нагрева решётки только электронами, генерируемыми в материале при пролёте иона, так и возбуждения и релаксации решётки при передачи в неё части избыточной энергии электронов и дырок. Из сравнения полученных результатов автор делает важный вывод о том, что избыточная энергия валентных дырок играет принципиальную роль в формировании треков БТИ. Этот результат является одним из основных, выносимых на защиту.

Указанные системы выбраны автором потому, что позволяют произвести экспериментальную проверку. Обоснован выбор метода классической молекулярной динамики и межатомных потенциалов взаимодействия.

В качестве начальных данных о возбуждении материалов в треках БТИ автором использовалась разработанная ранее и оттестированная экспериментально Монте-Карло модель TREKIS.

**Достоверность.** Достоверность представленных результатов подтверждается в работе (а) согласованием диаметров области структурных изменений в треках БТИ с экспериментально наблюдаемыми результатами (материалы  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  и  $\text{LiF}$ ), (б) диаметра химической активации оливина с расчётными данными. Результаты расчётов как геометрического так и динамического структурного факторов, полученные в работе, согласуются с экспериментальными данными.



По результатам работы С. А. Горбунова опубликовано 7 статей в международных изданиях из базы данных Web of Science и рекомендованных ВАК. Указано 8 международных конференций, на которых докладывались результаты работы.

**Новизна.** По всей видимости, впервые была количественно продемонстрирована принципиальная роль избыточной энергии, ансамбля генерируемых валентных дырок, в формировании треков БТИ.

Представленная модель электрон-решётчного обмена, основанная на молекулярно-динамическом расчёте ДСФ, может быть использована для широкого круга задач, связанных с релаксацией экстремальных состояний материалов, характеризующихся высоким начальным уровнем возбуждения электронной подсистемы твёрдых тел.

Важным и оригинальным результатом работы является построение модели химической активации материала в треке БТИ. Модель не использует подгоночных под калибровочные облучения параметры. С. А. Горбунов количественно объясняет наблюдаемую химическую активацию оливина в микронной окрестности траектории БТИ (далеко за пределами нанометрической области структурных изменений) нейтрализацией входящих в состав оливина, как примесь замещения поливалентных катионов железа разлетающимися из центра трека электронами. Разработанная модель может быть использована для уточнения и принципиального улучшения основанной на анализе травимых треков экспериментальной методики оценки зарядов космических ядер в составе галактических космических лучей.

**Общие замечания по диссертационной работе.** В работе остался слабо освещённым вопрос о возможном пространственном перераспределении генерируемых в треке валентных дырок и его влиянии на кинетику возбуждения решётки структурных изменений. Зависящая от этого движения валентных дырок кинетика нескомпенсированного заряда в окрестности траектории БТИ может влиять на формирование трека иона.

Во введении автором упомянуты современные модели формирования треков БТИ, однако, результатов применения этих моделей для сравнения с полученными в работе, представлено не было.



**Частные замечания по диссертационной работе.** На графиках (рисунках) отсутствуют указания погрешностей.

Отсутствует пояснение, почему для анализа выбран «оливин».

Отсутствуют сравнения полученных результатов с результатами известной монографии «Fleischer R.L., Price P.B., Walker R.M. Nuclear Tracks in Solids: Principles and Application. 1975. University of California Press, Berkeley.

Отмеченные недостатки не снижают качество исследований и не влияют на главные теоретические и практические результаты диссертации.

**Заключение.** 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.

Автореферат соответствует основному содержанию диссертации.

Диссертационная работа отвечает критериям Положения о порядке присуждения ученых степеней, а ее автор С. А. Горбунов достоин присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

115409, г. Москва, Каширское ш., 31.

Телефон: (495) 788-56-99, факс: (499) 324-21-11

Электронная почта: [rector@mephi.ru](mailto:rector@mephi.ru)

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой  
Общей физики НИЯУ «МИФИ»,  
Калашников Николай Павлович

Подпись Калашникова Н. П. удостоверяю.

Учёный секретарь НИЯУ МИФИ  
Цыганов В. Г.



01.08.2016