

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.

В диссертационной работе С. А. Горбунова описывается построение модели формирования треков быстрых тяжёлых ионов (БТИ) в твёрдых телах. При пролёте БТИ, тормозящихся в режиме электронных потерь энергии, возникает экстремально высокое, локализованное в малой области пространстве и времени возбуждение электронной подсистемы материала. Последующая кинетика релаксации этого возбуждения, как и кинетика возбуждения и релаксации атомной подсистемы материала, не могут быть описаны привычными макроскопическими моделями. Исследования таких экстремальных состояния материала представляют одну из наиболее актуальных задач современной физике, находясь на стыке таких дисциплин, как физическая кинетика, физическая статистика, физика твёрдого тела.

В работе С. А. Горбунова проведён литературный обзор исследований в области формирования треков БТИ, описано их современное состояние. Обоснован выбор методов исследований, используемых приближений, конкретных систем для исследования. В работе представлена многомасштабная модель возбуждения и релаксации материалов в треках БТИ.

В первой части работы описывается построение количественной модели электрон-решётчного обмена энергией, основанной на формализме динамического структурного фактора (ДСФ). Динамический структурный фактор решётки рассчитывается методом классической молекулярной динамики (МД). Автором проведено тестирование как самой модели расчёта ДСФ, так модели электрон-решётчного обмена энергией.

Для моделирования возбуждения решётки материала в результате её взаимодействия с релаксирующей электронной подсистемой в треке БТИ также использовалась разработанная автором оригинальная молекулярно-динамическая программа.

Указывается, что информация о начальном возбуждении электронной подсистемы материала получена из разработанной ранее в исследовательской группе, к которой принадлежит автор, оригинальной Монте-Карло программы TREKIS.

Моделирование кинетики структурных изменений в треках БТИ, стимулированной релаксацией начального электронного возбуждения, производилось с помощью МД программы LAMMPS.

Получаемая в результате применения модели возбуждения материала информация была использована С. А. Горбуновым при построении модели и расчёте скорости жидкостного химического травления повреждённого материала вокруг траектории БТИ.

Впервые ДСФ, рассчитываемый методом МД, применён для описания процессов электрон-решёточного обмена в треках БТИ.

Следует отметить, что представленная модель электрон-решёточного обмена может быть использована для количественного описания релаксации экстремальных электронных возбуждений твёрдых тел.

Также автором впервые была предпринята попытка количественно связать физическое возбуждение материала в окрестности траектории БТИ, получаемое в модели, с уровнем его химической активации в этой области. Т.е., реализован многомасштабный подход, количественно описывающий все стадии формирования травимого трека от начального возбуждения электронной подсистемы материала до химического травления треков. Это позволяет оценивать химическую активацию облучаемого быстрыми тяжёлыми ионами без проведения калибровочных облучений. Представленная модель в этом ключе является оригинальной и не имеет аналогов.

А диссертации С. А. Горбуновым проводится моделирование возбуждения материалов LiF, Mg_2SiO_4 ионом Au 2,1 ГэВ и Al_2O_3 ионом Хе 176 МэВ. Он сравнивает нагрев решёток этих материалов в треках ионов (а) в случае взаимодействия только с электронами, генерируемыми в треке и (б) в случае, когда в решётку передаётся энергия и электронов и валентных дырок.

Из этого сравнения в работе делается принципиальный вывод о роли энергии валентных дырок в формировании области структурных изменений в треках БТИ в твёрдых телах.

Моделирование приводилось методами классической молекулярной динамики. В работе обоснован выбор методов моделирования.

В основе расчётов лежат молекулярно-динамические алгоритмы и межатомные потенциалы взаимодействия, широко используемые научным сообществом и оттестированные на различных задачах.

Диаметры областей структурных изменений в системах LiF и Mg₂SiO₄ после пролёта иона Au 2,1 ГэВ согласуются с экспериментальными оценками.

Представленные результаты расчётов динамического и геометрического структурных факторов жидкого алюминия, использованного как модельная система, согласуются с экспериментальными данными.

Замечания по диссертационной работе:

Используемый формализм ДСФ основан на одноэлектронном кинетическом уравнении и рассмотрении электронной подсистемы, как идеальной системы слабовзаимодействующих электронов. Однако известно, что электронная подсистема твердых тел является слабонеидальной. В диссертации не приводятся численных оценок, обосновывающих точность данного приближения в условиях описания треков БТИ.

При описании геометрического деления трека на цилиндрические слои в разделе 3.3 указано, что их толщина, равная 0.5 нм, больше длины свободного пробега электрона. При этом в том же разделе указано, что дебройлевская длина волны электронов тоже порядка 0.5 нм. В тексте диссертации не обсуждается, как данные допущения согласуются с представлением о слабовзаимодействующих делокализованных электронах.

Исходные предпосылки формализма ДСФ соответствуют описанию взаимодействия делокализованной системы рассеивателей с почти свободными электронами. Однако в рамках предложенного в диссертации подхода описание переноса энергии от электронов к ионам формализм ДСФ применяется к указанным выше цилиндрическим слоям, в каждый из которых попадает, по-видимому, порядка 10-100 атомов. Точность такого допущения в тексте диссертации не обсуждается.

В работе не освещён вопрос изменения межатомного потенциала взаимодействия в условиях экстремального возбуждения электронной подсистемы материала в треках БТИ. Во введении упомянуто, что вся кинетика трека БТИ не может быть описан методом *ab-initio*. Однако, локальное изменение межатомного потенциала в треке, особенно, в центральной его части, может существенным образом влиять на кинетику структурных изменений в этой области.

Недостаточно ясными выглядят пояснения к графикам (рисунки 1.2 на чёрном-белом распечатанном экземпляре диссертации).

Раздел «обозначения», где представлены основные использованные в тексте диссертации сокращения, для удобства чтения можно было бы перенести в начало текста.

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

Диссертация выполнена на высоком научном уровне, соответствующим международным стандартам.

Результаты работы С. А. Горбунова отражены в семи публикациях в международных изданиях из базы данных Web of Science и рекомендованных ВАК, а также докладывались на восьми международных конференциях.

Автореферат соответствует основному содержанию диссертации. Диссертационная работа отвечает требованиям ВАК.

Считаю, что С. А. Горбунов достоин присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН)

125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2

Телефон: (495) 485-8244, факс: (495) 485-9922

Электронная почта: zeigarnik@ihed.ras.ru

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук, доцент, заведующий отделом компьютерной теплофизики ОИВТ РАН Стегайлов Владимир Владимирович

Подпись Стегайлова В.В. удостоверяю

Учёный секретарь ОИВТ РАН

Амиров Р. Х.



02.09.2016