

МИНИСТЕРСТВО
НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

**«Национальный
исследовательский ядерный
университет «МИФИ»
(НИЯУ МИФИ)»**

Каширское шоссе, д.31, г. Москва, 115409
Тел. (499) 324-77-77, факс (499) 324-21-11
<http://www.mephi.ru>

УТВЕРЖДАЮ

Врио ректора НИЯУ МИФИ

д.ф.-м.н., профессор

М.Н. Стриханов

ноябре 2020 г.



№ _____
На № _____ от _____

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (НИЯУ МИФИ) 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 на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Диссертация Воронкова Р.А. посвящена исследованию влияния экстремального возбуждения электронной подсистемы на изменения межатомного потенциала диэлектриков и стимулированные этими изменениями атермические структурно-фазовые превращения в материалах. Подобные превращения могут играть принципиальную роль при формировании повреждений в мишенях, облучаемых высокоинтенсивными фемтосекундными импульсами лазеров на свободных электронах (ЛСЭ), а также могут вносить вклад в формирование структурно-изменённых треков быстрых тяжелых ионов (БТИ).

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы из 113 источников, содержит 108 страниц машинописного текста, 38 рисунков и 2 таблицы.

Во Введении обосновывается актуальность выбранной темы диссертации, обосновываются и указываются цели и задачи исследования. В этом разделе описываются научная новизна, достоверность, значимость полученных результатов, методы исследования, апробация работы, личный вклад автора и разбивка излагаемого материала по главам.

В Главе 1 делается краткий обзор физических аспектов взаимодействия БТИ и ЛСЭ с конденсированным веществом. Описываются примеры применения БТИ и ЛСЭ, а также современные подходы к теоретическому описанию формирования повреждений в облучаемой мишени, достоинства и недостатки этих подходов. Одним из подобных недостатков является то, что, хотя и известно, что эффекты изменения межатомного потенциала под действием электронных возбуждений играют существенную роль в формировании повреждений после облучения мишеней ЛСЭ, при формировании треков БТИ эти изменения, как правило, не учитываются. По итогам обсуждения ставится задача о более детальном исследовании таких эффектов и установлении их значимости для формирования треков БТИ.

В Главе 2 описывается модель, основанная на методе Монте-Карло, которая используется для моделирования кинетики электронных возбуждений в треках БТИ. Дается детальный обзор используемых приближений. Описывается основанная на анализе результатов оптических экспериментов методика построения сечений рассеяния, используемых в модели. Эта методика применяется для построения сечений рассеяния заряженных частиц в MgO и ZnO . Качество полученных сечений проверяется выполнением правил сумм для диэлектрической функции. Вычисленные с помощью сечений длины пробега электронов и электронные потери энергии сравниваются с результатами других авторов. После проверки, полученные сечения используются в Монте-Карло программе TREKIS, которая моделирует пролет БТИ в материале, последующие ионизационные каскады,

распространение электронов и дырок от траектории иона. Выходными данными программы является информация о пространственно-временных распределениях электронов и их избыточной энергии. Эти данные используются в качестве начальных для оценки значимости атермических превращений в треках БТИ.

В Главе 3 проведен анализ общей методологии моделирования изменений межатомного потенциала под действием электронных возбуждений. Показана необходимость использования *ab-initio* методов, подразумевающих решение уравнения Шредингера для многочастичной системы. Проанализированы основные современные модели, подходящие для подобного моделирования, указаны их достоинства и недостатки относительно поставленной задачи. Обоснован выбор одной из моделей – теории функционала плотности (ТФП), подробно разобрана сама теория, а также дополнительные приближения и методы, возникающие при численной реализации ТФП.

В Главе 4 приводятся результаты ТФП моделирования атермических превращений в различных диэлектриках. Излагаются модельные предположения, обосновывающие обеспечивающие применимость ТФП к моделированию изменения межатомного потенциала, описываются технические детали моделирования с помощью программы Quantum Espresso. Справедливость сформированной модели проверяется на примере алмаза, для которого существуют экспериментальные данные по атермической графитизации. Результаты моделирования хорошо соотносятся с экспериментом, что подтверждает обоснованность используемой методики, которая далее применяется для прогнозирования атермической реакции Al_2O_3 , Y_2O_3 , TiO_2 , NaCl , LiF , KBr на экстремальное электронное возбуждение.

Для каждого из этих материалов установлена минимальная (пороговая) электронная температура, вызывающая атермические фазовые переходы за времена 500 фс (характерное время электронных возбуждений в лазерных пятнах) и за 50 фс (характерное время электронных возбуждений в треках) с момента повышения электронной температуры. Описан характер этих переходов. В конце главы, полученные пороговые электронные температуры

сравниваются с данными из главы 2 и делается вывод о степени значимости атермических эффектов в треках БТИ.

В Заключение приведены основные результаты диссертации.

Автореферат верно и полно отражает содержание диссертации и включает обсуждение актуальности темы, целей и задач исследования, научной новизны, теоретической и практической ценности работы, используемых методологии и методов, личный вклад автора, положения, выносимые на защиту и данные об апробации результатов и публикациях по теме диссертации. По материалам диссертации опубликовано 3 печатные работы в журналах из списка ВАК и/или индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus.

Тема работы соответствует паспорту научной специальности 01.04.02. Диссертация содержит целый ряд новых результатов и в целом заслуживает высокой оценки. В частности, впервые предсказано образование ранее не описанных фаз в оксидах алюминия и титана и исследована кинетика их возникновения при экстремальном повышении электронной температуры. Показана зависимость стабильности ширины запрещенной зоны при атермических превращениях от степени ионности связей между атомами диэлектриков. Оценена значимость атермических процессов при формировании треков БТИ.

Обоснованность результатов диссертации подтверждается тем, что используемая модель показала хорошее соответствие эксперименту (на примере алмаза), а также публикациями в высокорейтинговых рецензируемых журналах.

В то же время, при ознакомлении с диссертацией и ее обсуждении возникло несколько вопросов, которые можно сформулировать в виде следующих замечаний:

- 1) В работе не обсуждаются свойства Al_2O_3 , приводящие в этом веществе к возникновению суперионного состояния.
- 2) В работе не проводится анализ возможных причин зависимости стабильности запрещенной зоны от степени ионности связей

материала.

Несмотря на отмеченные недостатки, диссертационная работа Воронкова Р.А. выполнена на высоком уровне и представляет собой законченное научное исследование. Основные представленные к защите результаты являются новыми и могут быть использованы в теоретических и экспериментальных исследованиях по физике взаимодействия излучения с веществом. Результаты диссертации своевременно опубликованы в журналах высокого рейтинга и известны международному научному сообществу.

Работа «Моделирование эффектов, связанных с изменением межатомного потенциала, вызванного экстремальным возбуждением электронной подсистемы диэлектриков, облучаемых быстрыми тяжелыми ионами и фемтосекундными лазерными импульсами» отвечает всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, в частности пунктам 9, 10, 11, 13 и 14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013г. Считаем, что Воронков Р.А. заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – «теоретическая физика».

Диссертация Воронкова Романа Анатольевича «Моделирование эффектов, связанных с изменением межатомного потенциала, вызванного экстремальным возбуждением электронной подсистемы диэлектриков, облучаемых быстрыми тяжелыми ионами и фемтосекундными лазерными импульсами» заслушана и одобрена на семинаре Института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ.

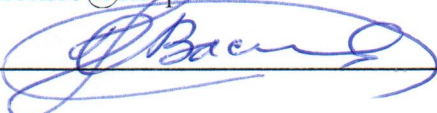
Диссертация Воронкова Романа Анатольевича «Моделирование эффектов, связанных с изменением межатомного потенциала, вызванного экстремальным возбуждением электронной подсистемы диэлектриков, облучаемых быстрыми тяжелыми ионами и фемтосекундными лазерными импульсами» и проект отзыва ведущей организации на диссертационную

работу заслушаны, обсуждены и одобрены на заседании кафедры теоретической ядерной физики НИЯУ МИФИ 2 ноября 2020 г., протокол № 22/2.

Отзыв составили:

Попруженко Сергей Васильевич, д.ф.-м.н., профессор кафедры теоретической ядерной физики НИЯУ МИФИ, тел. +7 (495) 788 56 99, доб. 9377,

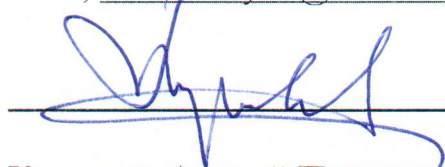
SVPopruzhenko@mephi.ru



/С.В.Попруженко/

Муравьев Сергей Евгеньевич, к.ф.-м.н., и.о. заведующего кафедрой теоретической ядерной физики НИЯУ МИФИ, тел. +7 (495) 788 56 99, доб.

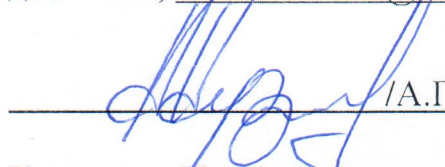
8009, SEMuravyev@MEPhI.ru



/С.Е. Муравьев/

Кузнецов Андрей Петрович, д.ф.-м.н., профессор, директор Института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ, тел. +7 (495) 788 56 99,

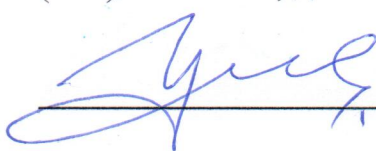
доб. 9388, APKuznetsov@MEPhI.ru



/А.П.Кузнецов/

Кудряшов Николай Алексеевич, д.ф.-м.н., профессор, Председатель совета по аттестации и подготовке научно-педагогических кадров НИЯУ МИФИ, тел. +7

(495) 788 56 99, доб. 9991, NAKudryashov@MEPhI.ru



/Н.А. Кудряшов/



Список публикаций работников структурного подразделения, оставляющего отзыв, за последние 5 лет, по теме диссертации:

1. A. Palffy and S.V. Popruzhenko, Can Extreme Electromagnetic Fields Accelerate the alpha-Decay of Nuclei?, *Physical Review Letters* **124**, 212505 (2020).
2. M.F. Ciappina, E.E. Peganov, S.V. Popruzhenko, Focal-shape effects on the efficiency of the tunnel-ionization probe for extreme laser intensities, *Matter and Radiation at Extremes* **5**, 044401 (2020).
3. M.F. Ciappina, S.V. Popruzhenko, Diagnostics of ultra-intense laser pulses using tunneling ionization, *Laser Physics Letters* **17**, 025301 (2020).
4. M.F. Ciappina, S.V. Popruzhenko, S.V. Bulanov, T. Ditmire, G. Korn and S. Weber, Progress toward atomic diagnostic of ultrahigh laser intensities, *Physical Review A* **99**, 043405 (2019).
5. S.V. Popruzhenko, T.V. Liseykina and A. Macchi, Efficiency of radiation friction losses in laser-driven “hole boring” of dense targets, *New Journal of Physics* **21**, 033009 (2019).
6. A.S. Maxwell, S.V. Popruzhenko and C.F. Faria, Treating branch cuts in quantum trajectory models for photoelectron holography, *Physical Review A* **98**, 063423 (2018).
7. V.A. Tulsy, M. Bagheri, U. Saalman and S.V. Popruzhenko, Boosting terahertz-radiation power with two-color circularly polarized midinfrared laser pulses, *Physical Review A* **98**, 053415 (2018).
8. S.V. Popruzhenko, Coulomb phase in high harmonic generation, *Journal Physics B: At. Mol. Opt. Phys.* **51**, 144006 (2018).
9. S.V. Popruzhenko, Quantum theory of strong-field frustrated tunneling, *Journal Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **51**, 014002 (2018).
10. M. V. Frolov, N. L. Manakov, A. A. Minina, S. V. Popruzhenko, and A. F. Starace, Adiabatic-limit Coulomb factors for photoelectron and high-order harmonic spectra, *Physical Review A* **96**, 023406 (2017).
11. Th. Keil, S.V. Popruzhenko, and D. Bauer, Laser-Driven Recollisions under the Coulomb Barrier, *Physical Review Letters* **117**, 243003 (2016).
12. T.V. Liseykina, S.V. Popruzhenko and A. Macchi, Inverse Faraday Effect driven by the radiation reaction force, *New Journal of Physics* **18**, 072001 (2016).