

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д002.023.02 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ФИЗИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА ИМ. П.Н.
ЛЕБЕДЕВА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ НА
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 7 декабря 2020 г. № 40

О присуждении Воронкову Роману Анатольевичу, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук. Диссертация «Моделирование эффектов, связанных с изменением межатомного потенциала, вызванного экстремальным возбуждением электронной подсистемы диэлектриков, облучаемых быстрыми тяжелыми ионами и фемтосекундными лазерными импульсами» принята к защите 21 сентября 2020 г., протокол № 38 диссертационного совета Д002.023.02, созданного на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН), 119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д. 53. Соискатель Воронков Роман Анатольевич, 1992 г.р., окончил Факультет Экспериментальной и Теоретической Физики Национального Исследовательского Ядерного университета Московского Инженерно-Физического Института по специальности "Физика атомного ядра и частиц" в 2016 г. с присуждением степени специалиста (диплом №1077040031731). С 2016 г. работает в ФИАН в должности младшего научного сотрудника. В период с 2016 г. по 2020 г. обучался в аспирантуре ФИАН по направлению подготовки «03.06.01 – Физика и астрономия» (направленность программы «01.04.02 – теоретическая физика»). Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана ФИАН в 2020 г. По окончании аспирантуры Воронкову Р.А. была присуждена квалификация «Исследователь. Преподаватель-исследователь» (диплом №1077050012215).

Диссертационная работа Воронкова Р.А. выполнена в Отделении ядерной физики и астрофизики ФИАН. Научный руководитель, кандидат физико-математических наук Волков Александр Евгеньевич, является специалистом в области теоретического описания взаимодействия излучения с веществом и работает в должности старшего научного сотрудника в Лаборатории элементарных частиц Отдела физика ядра и элементарных частиц Отделения ядерной физики и астрофизики ФИАН.

Официальные оппоненты:

Рогожкин Сергей Васильевич, доктор физико-математических наук, начальник отдела в Федеральном государственном бюджетном учреждении «Институт теоретической и экспериментальной физики имени А.И. Алиханова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;

Дмитриенко Владимир Евгеньевич, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Института кристаллографии им. А.В. Шубникова, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, дали положительные отзывы о диссертации с небольшими техническими замечаниями.

Ведущая организация – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (НИЯУ МИФИ), в своем положительном заключении указала, что соискатель заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук. Заключение подписано доктором физико-математических наук, профессором кафедры теоретической ядерной физики НИЯУ МИФИ Попруженко Сергеем Васильевичем, кандидатом физико-математических наук, и.о. заведующего кафедрой теоретической ядерной физики НИЯУ МИФИ Муравьевым Сергеем Евгеньевичем, доктором физико-математических наук, профессором, директором Института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ, Кузнецовым Андреем Петровичем и

доктором физико-математических наук, профессором, Председателем совета по аттестации и подготовке научно-педагогических кадров НИЯУ МИФИ Кудряшовым Николаем Алексеевичем. Выбор оппонентов и ведущей организации обоснован их значительным опытом работы по тематике диссертации, что подтверждается большим количеством публикаций в рецензируемых, в том числе ведущих в этой области, печатных изданиях. Соискатель имеет 11 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 3 работы в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базе данных Web of Science. Основные результаты, представленные в диссертационной работе Воронкова Р. А., прошли научную апробацию на многих международных научных конференциях. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения о работах, опубликованных Воронковым Р.А. Основные результаты по теме диссертации опубликованы в работах:

1. Voronkov R.A., Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Monte-Carlo modeling of excitation of the electron subsystem of ZnO and MgO in tracks of swift heavy ions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. 2015. № 365. С. 468.

2. Voronkov R.A., Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Ab-initio modeling of Al₂O₃ lattice instability under extreme excitation of the electronic system // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. 2018. № 435. С. 87.

3. Voronkov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Superionic state in alumina produced by nonthermal melting // Physica Status Solidi – Rapid Research Letters. 2020. № 14. С. 1900641.

Диссертационная работа посвящена теоретическому моделированию эффектов, вызванных изменениями в межатомном потенциале конденсированного вещества в результате экстремального возбуждения

электронной подсистемы на временах меньших характерного времени электрон-решётчного обмена энергией (т.н. атермические эффекты). Такие изменения могут возникать при облучении мишени высокоинтенсивными лазерными импульсами и пучками быстрых тяжелых ионов. С помощью современных методов численного моделирования установлены закономерности и особенности атермических эффектов в диэлектриках, интересных для экспериментальных и технологических приложений.

На основании выполненных соискателем исследований, диссертационный совет отмечает следующие основные результаты диссертации:

1. Исследованы эффекты, связанные с изменением межатомного потенциала под воздействием экстремального электронного возбуждения (т.н. атермические эффекты) в треках быстрых тяжелых ионов и пятнах фемтосекундных лазеров на свободных электронах. В качестве модельных материалов были выбраны диэлектрики (Al_2O_3 , TiO_2 , Y_2O_3 , NaCl) с разной степенью ионности связей. Эти материалы не исследовались и не сравнивались ранее на проявления атермических эффектов. Показано, что для возникновения атермического фазового перехода за 500 фс (характерный масштаб электронного возбуждения в пятнах лазера) требуется возбудить ~4-5% валентных электронов в зону проводимости. Такой уровень возбуждений легко достижим в лазерах на свободных электронах, поэтому атермические эффекты играют значительную роль при лазерном облучении, однако их реализация зависит от конкретного диэлектрического материала.

А) В оксиде алюминия воздействие высоких электронных температур может приводить к атермическому переходу в экзотическое суперионное состояние, в котором подрешетка алюминия остается стабильной, а подрешетка кислорода атермически плавится за ~300 фс. Охлаждение электронной подсистемы с одновременным приложением высокого

давления выше 400 ГПа замораживает эту фазу в состоянии смешанного аморфно-кристаллического диэлектрика.

Б) В оксиде титана наблюдается переход в ранее не наблюдавшуюся в этом материале твердотельную фазу.

В) В оксиде иттрия наблюдалась аморфизация материала, а в хлориде натрия – нарушения структуры решётки без полной аморфизации.

3. Показано, что стабильность запрещенной зоны при атермическом превращении зависит от степени ионности межатомных связей в материале. В соединениях с сильной ионной связью запрещенная зона не исчезает даже при очень больших дозах облучения, в то время как в ковалентных материалах коллапс запрещенной зоны происходит вместе с атермическим фазовым переходом при достижении пороговой дозы.

4. Установлено, что даже небольшое атермическое движение атомов и изменение заселенности валентной зоны приводит к значительному уменьшению запрещенной зоны исследованных материалов за 50 фс после пролёта быстрого тяжелого иона даже при относительно небольших радиационных дозах (<10% возбужденных электронов). Изменение ширины запрещенной зоны может влиять на скорость передачи энергии от электронов решетке, от которой зависит возможность образования структурных изменений в окрестности траектории иона.

Все основные научные результаты, включенные в диссертацию Воронкова Р. А., получены лично автором либо при его непосредственном участии, являются оригинальными и научно обоснованными. Анализ и интерпретация полученных результатов, подготовка материалов к опубликованию производились автором лично или в сотрудничестве с соавторами.

Достоверность проведенных автором теоретических исследований подтверждается хорошим соответствием эксперименту проверочных расчетов на примере алмаза, обоснованным использованием высокоточных

вычислительных методов, публикациями в высокорейтинговых рецензируемых журналах.

Научная новизна результатов работы Воронкова Р. А. выражается в исследовании эффектов, связанных с изменением межатомного потенциала в диэлектриках с различной степенью ионности связей. Эти явления ранее изучались только в металлах и простых веществах с ковалентной связью. Также было предсказано возникновение ранее не описанных новых фаз, в том числе суперионного состояния в оксиде алюминия и Ia-3 фазы в оксиде титана, возникающих в результате атермического фазового перехода. Впервые была оценена значимость изменения межатомного потенциала в результате сильного электронного возбуждения для кинетики формирования треков быстрых тяжелых ионов. Впервые была показана зависимость стабильности ширины запрещенной зоны от степени ионности связей при атермических превращениях.

Теоретическая и практическая значимость результатов, полученных в диссертационной работе Воронкова Р.А., связана с расширением понимания явлений, связанных с воздействием экстремального электронного возбуждения, возникающего при облучении материалов быстрыми тяжелыми ионами и фемтосекундными лазерными импульсами. Проведенный анализ значимости кратковременного изменения электронной структуры и межатомных потенциалов материалов в треках быстрых тяжелых ионов указывает направления необходимой модификации используемых моделей трекообразования. Предсказанное существование новых фаз в оксидах алюминия и титана стимулирует формулирование программ экспериментов по получению и изучению новых материалов, обладающих уникальными свойствами.

На заседании 07 декабря 2020 года диссертационный совет принял решение присудить Воронкову Р.А. учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 5 докторов наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – 17, против присуждения ученой степени – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета, член корреспондент РАН, д.ф.-м.н.

_____ Арсеев Петр Иварович

Учёный секретарь диссертационного совета, к.ф.-м.н.

_____ Вагин Константин Юрьевич

07 декабря 2020 года