

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.262.04,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ФИЗИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА
ИМ. П.Н. ЛЕБЕДЕВА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, ПО
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 28 октября 2024 года № 38

О присуждении Волкову Александру Евгеньевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Моделирование структурно-фазовых изменений, инициированных релаксацией экстремального возбуждения электронной подсистемы диэлектриков в треках быстрых тяжёлых ионов» по специальности 1.3.3. Теоретическая физика принята к защите 02 июля 2024 года (протокол заседания № 35) диссертационным советом 24.1.262.04, созданным 18 октября 2023 года приказом № 1975/нк на базе федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН), подведомственного Министерству науки и высшего образования Российской Федерации, 119991, ГСП-1, Москва, Ленинский проспект, д. 53.

Соискатель Волков Александр Евгеньевич, 8 января 1959 года рождения, работает высококвалифицированным старшим научным сотрудником в ФИАНе.

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук на тему «Кинетика неравновесных процессов в облучаемых аморфных и кристаллических телах» защитил в 1993 году в диссертационном совете, созданном на базе Национального Исследовательского Центра «Курчатовский Институт» (НИЦ КИ).

Диссертация выполнена в Лаборатории элементарных частиц Отдела физики ядра и элементарных частиц Отделения ядерной физики и астрофизики ФИАН.

Официальные оппоненты:

Бондаренко Геннадий Германович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор-исследователь, Московского государственного института электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики»,

Сорокин Павел Борисович, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий лабораторией «Цифровое материаловедение» Национального исследовательского технологического университета «МИСиС»,

Чеченин Николай Гаврилович, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий Отделом физики атомного ядра Научно-исследовательского института ядерной физики имени Д.В. Скобельцына Московского Государственного Университета имени М.В. Ломоносова,

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ" в своём положительном отзыве, составленном и подписанным доктором физико-математических наук, заведующим кафедрой Теоретической ядерной физики НИЯУ МИФИ Попруженко Сергеем Васильевичем, доктором физико-математических наук, директором Института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ Кузнецовым Андреем Петровичем, доктором физико-математических наук, председателем Совета по подготовке научно-педагогических кадров НИЯУ МИФИ Кудряшовым Николаем Алексеевичем и утверждённым доктором физико-математических наук, ректором Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ" Шевченко Владимиром Игоревичем указала, что результаты диссертации составляют крупное научное достижение в теоретической физике, существенно расширяющее на область локализованных экстремальных состояний уже устоявшиеся в физике твёрдого тела представления, и демонстрирующее новые методы решения и анализа задач, связанных с этими состояниями. Отмечено, что результаты открывают новые возможности для постановки экспериментов и разработки методик создания пространственно-анизотропных наноструктур. Указано, что цикл выполненных работ развивает новое научное направление и, развитая методика позволила создать научную группу мирового уровня, занимающую лидирующие позиции в теории эффектов взаимодействия быстрых тяжёлых ионов с веществом.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается высокой научной квалификацией оппонентов и сотрудников ведущей организации, полученными ими научными результатами мирового уровня и многолетним опытом проведения научных исследований по сходной тематике.

Соискатель имеет 151 опубликованную работу, в том числе по теме диссертации опубликовано 83 работы, из них в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в международной базе данных Web of Science, опубликовано 83 работы. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах. Наиболее значимые результаты по теме диссертации опубликованы в работах:

1. Ryazanov A.I., Volkov A.E., Klaumünzer S. Model of track formation // *Physical Review B*. 1995. v. 51. n. 18. P. 12507

2. Volkov A.E., Borodin V.A. Heating of metals in swift heavy ion tracks by electron-ion energy exchange // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 1998. v. 146. n. 1-4. P.137

3. Ryazanov A.I., Trinakus H., Volkov A.E. Incubation dose for ion beam induced anisotropic growth of amorphous alloys: Insight into amorphous state modification // *Physical Review Letters*. 2000, v.84. n. 5. P. 919

4. Schwartz K., Volkov A.E., Sorokin M.V., Trautmann C., Voss K.-O., Neumann R., Lang M. Effect of electronic energy loss and irradiation temperature on color-center creation in LiF and NaCl crystals irradiated with swift heavy ions // *Physical Review B*. 2008. V. 78. P. 024120

5. Medvedev N.A., Volkov A.E., Shcheblanov N.S., Rethfeld B. Early stage of the electron kinetics in swift heavy ion tracks in dielectrics // *Physical Review B*. 2010. V. 82. P. 125425

6. Lipp V.P, Volkov A.E., Sorokin M.V., Rethfeld B. Kinetics of propagation of the lattice excitation in a swift heavy ion track // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2011. v. 269. n. 9. P. 865

7. Medvedev N.A., Volkov A.E., Schwartz K., Trautmann C. Effect of spatial redistribution of valence holes on the formation of a defect halo of swift heavy-ion tracks in LiF // *Physical Review B*. 2013. V. 87. P. 104103

8. Medvedev N.A., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Time-resolved electron kinetics in swift heavy ion irradiated solids // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2015 v.48. 355303

9. Alexeev V., Bagulya A., Chernyavsky M., Gippius A., Goncharova L., Gorbunov S., Gorshenkov M., Kalinina G., Konovalova N., Liu J., Zhai P., Okatyeva

N., Pavlova T., Polukhina N., Starkov N., Naing Soe T., Trautmann C., Savchenko E., Shchedrina T., Vasiliev A., Volkov A. Charge spectrum of heavy and superheavy components of galactic cosmic rays: results of the OLIMPIYA experiment // The Astrophysical Journal. 2016. 829:120

10. Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Effects of model approximations for electron, hole, and photon transport in swift heavy ion tracks // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2016. v. 388. P. 41

11. Gorbunov S.A., Malakhov A.I., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Model of wet chemical etching of swift heavy ions tracks // Journal of Physics D: Applied Physics. 2017 v.50. 395306

12. Medvedev N., Volkov A.E. Femto-clock for the electron kinetics in swift heavy ion tracks // Journal of Physics D: Applied Physics. 2017 v.50. 4445302

13. Rymzhanov R.A., Medvedev N., Volkov A.E., O'Connell J.H., Skuratov V.A. Overlap of swift heavy ion tracks in Al_2O_3 // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2018. v. 435. P. 121

14. Rymzhanov R.A., Gorbunov S.A., Medvedev N., Volkov A.E. Damage along swift heavy ion trajectory // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2019. v. 440. P. 25

15. Rymzhanov R.A., Medvedev N., O'Connell J.H., Janse van Vuuren A., Skuratov V.A., Volkov A.E. Recrystallization as the governing mechanism of ion track formation // Scientific Reports. 2019. V.9. P.3837

16. Voronkov R.A., Medvedev N., Volkov A.E. Superionic state in alumina produced by nonthermal melting // physica status solidi - Rapid Research Letters. 2020. P.1900641

17. Medvedev N., Volkov A.E. Analytically solvable model of scattering of relativistic charged particles in solids // Journal of Physics D: Applied Physics. 2020. V. 53. P. 235302

18. Medvedev N., Akhmetov F., Rymzhanov R.A., Voronkov R., Volkov A.E. Modeling Time-Resolved Kinetics in Solids Induced by Extreme Electronic Excitation // Advanced Theory and Simulations. 2022. P.2200091

19. Medvedev N., Volkov A.E. Nonthermal acceleration of atoms as a mechanism of fast lattice heating in ion tracks // Journal of Applied Physics. 2022. V.131. P. 225903

20. Medvedev N., Volkov A.E., Rymzhanov R., Akhmetov F., Gorbunov S., Voronkov R., Babaev P. Frontiers, challenges, and solutions in modeling of swift heavy ion effects in materials // Journal of Applied Physics. 2023. V.133. P. 100701

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных

соискателем исследований:

1. Разработана мультимасштабная гибридная модель, описывающая (а) возникновение и пространственное распространение электронного возбуждения, сопровождаемого передачей энергии в ионную подсистему диэлектриков (Монте-Карло модель TREKIS-3), и (б) последующую реакцию атомной решётки (молекулярная динамика) на то возмущение, которое появляется в окрестности порядка нескольких нанометров вблизи траекторий быстрых тяжёлых ионов (БТИ), тормозящихся в режиме электронных потерь энергии.

2. Выделен механизм нетермического ускорения атомов, основанный на резком изменении межатомного потенциала в результате фемтосекундного экстремального возбуждения электронной подсистемы диэлектриков в треке БТИ.

3. Обнаружен нетермический коллапс запрещённой зоны диэлектриков в треках БТИ. Построена модель конвертации неравновесной потенциальной энергии электрон-дырочных пар в кинетическую энергию атомов.

4. Обнаружено нетермическое возникновение суперионного состояния оксида алюминия с проводящими, полупроводниковыми и диэлектрическими электронными свойствами, инициированное экстремальным возбуждением электронной подсистемы материала.

5. Получены пространственно-временные распределения плотности и плотности энергии генерируемых электронов и валентных дырок, дырок на глубоких оболочках, а также плотности энергии, переданной в ионную подсистему диэлектриков (Al_2O_3 , YAG, MgO, оливин) в окрестности траекторий БТИ размером порядка нанометра. Проведён анализ механизмов, управляющих формированием этих распределений.

6. Определены тип и пространственные распределения структурных изменений, возникающих в диэлектриках (Al_2O_3 , YAG, MgO, оливин) в окрестности порядка нанометра траекторий различных БТИ. Проведён анализ механизмов, управляющих кинетикой возникновения этих изменений и их последующей эволюцией/релаксацией при остывании изолированных и перекрывающихся треков БТИ.

7. Получен профиль структурных изменений в диэлектрике вдоль всей траектории пролетевшего БТИ (на примере треков ионов Xe и U в оливине). Обнаружены: (а) несовпадение области максимальных повреждений с положением берегового пика электронных потерь энергии иона вдоль

траектории иона, (б) различные пороговые значения этих потерь, необходимые для образования наблюдаемых треков ионов, реализующих левое и правое плечо брегговского пика.

8. Построено аналитическое выражение для сечения рассеяния релятивистских заряженных частиц на основе модельного вида диэлектрической проницаемости. Этот результат позволяет значительно сократить время Монте-Карло моделирования эволюции электронного возбуждения и процессов обмена энергией между электронной и ионной подсистемами в треках БТИ.

9. Разработана модель химической активации и жидкостного травления трековой области в оливине. Произведена верификация и калибровка экспериментальной методики регистрирования спектра сверхтяжёлых ядер в составе галактических космических лучей, основанной на травлении треков этих ядер в метеоритном оливине.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что впервые разработана микроскопическая модель, которая на всей пространственно-временной шкале явления даёт микроскопическую количественную информацию о кинетике возбуждения и релаксации трека БТИ, а также структурных изменений в нём. Наряду с построением оригинальной Монте-Карло модели возбуждения электронной и ионной подсистемы диэлектриков в треке БТИ, была отлажена методика восстановления функции потерь заряженной частицы из оптических данных. Получено аналитическое выражение для сечений рассеяния релятивистских частиц, что позволило на два порядка сократить время Монте-Карло моделирования возбуждения электронной подсистемы сверхбыстрыми частицами. Обоснован и изучен нетермический механизм передачи энергии в ионную подсистему, связанный с резким изменением межатомного потенциала и инициированный фемтосекундным экстремальным возбуждением электронов. Данный механизм отличается от механизма, основанного на рассеянии электронов и валентных дырок на атомной решётке. Показаны связанные с этим механизмом возможности возникновения суперионного состояния в диэлектриках, а также изменения их электронной структуры, вплоть до схлопывания запрещённой зоны.

Практическая значимость работы прежде всего связана с тем, что разработанная модель и получаемые на её основе данные позволяют до проведения эксперимента делать количественные оценки результатов и эффективности выбранного способа проведения эксперимента. Что сокращает

время проведения дорогостоящих экспериментов на ускорителях и повышает научную значимость экспериментальных исследований. Фундаментальные задачи, рассмотренные в диссертации, могут быть приложены к широкому спектру проблем, связанных с ультрабыстрым экстремальным возбуждением электронной системы различных материалов. Результаты работы могут быть применены при оценке радиационной стойкости существующих и разрабатываемых материалов, используемых в атомной энергетике, в космических и биологических технологиях, а также в технологиях радиационного создания наноструктур в объёмных мишенях.

Достоверность разработанной модели и полученных на её основе результатов была многократно подтверждена экспериментально. При этом цели экспериментов и методы их проведения часто выбирались на основе предсказаний данной модели. Требуемая экспериментами предсказательная способность модели обеспечивалась как адекватной постановкой задач, так и использованием наиболее общих фундаментальных принципов при построении моделей и анализе результатов. В расчётах использовались хорошо обоснованные и проработанные методы (Монте-Карло, молекулярная динамика, *ab-initio*) и численные алгоритмы. Всё это позволило избежать использования дополнительных к указанным методам подгоночных параметров и добиться достоверности результатов моделирования. Все представленные в диссертации результаты были опубликованы в журналах высокого рейтинга и доложены на международных профильных конференциях.

Представленные в диссертации результаты получены лично автором или при его непосредственном участии и руководстве. Деятельность автора включала в себя критический анализ проблем, определение и формулирование целей исследований, постановка и аналитическая проработка всех задач, анализ аналитических, численных и экспериментальных результатов, подготовка публикаций, апробация полученных результатов на конференциях, докладов. Вклад соискателя во всех результатах, полученных в соавторстве, является определяющим, как при формулировке задач, так и при поиске их решения. Тексты публикаций написаны либо лично, либо при непосредственном участии соискателя.

В ходе защиты соискатель Волков А.Е. полно и аргументированно ответил на заданные вопросы, а также на замечания ведущей организации и официальных оппонентов.

На заседании 28 октября 2024 года диссертационный совет принял

решение за разработку теоретических положений, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в теоретической физике, присудить Волкову А.Е. ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве **13** человек, из них **12** докторов наук по научной специальности 1.3.3. Теоретическая физика, участвовавших в заседании, из **14** человек, входящих в состав совета, проголосовали: за **13**, против **0**, недействительных бюллетеней **0**.

Председатель диссертационного совета,
доктор физико-математических наук,
член-корреспондент Российской академии наук

Арсеев Петр Иварович

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

Чернышов Дмитрий Олегович

28 октября 2024 г.