

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ФТИ 34.01.03  
Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук  
по диссертации  
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК  
аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 27 мая 2021 года № 5

О присуждении Мелузовой Дарье Сергеевне, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Моделирование ионного облучения кристаллических и аморфных мишеней, включая материалы первой стенки токамака-реактора» по специальности 01.04.04 –«Физическая электроника» принята к защите 4 марта 2021 г., протокол № 2, диссертационным советом ФТИ 34.01.03 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, расположенного по адресу: 194021, Санкт Петербург, Политехническая ул., д. 26. Диссертационный совет утверждён приказом ФТИ им. А.Ф. Иоффе №75 прил. 3 от 12 июля 2019 г.

Соискатель Мелузова Дарья Сергеевна, 1994 г.р., в 2017 году окончила магистратуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» по специальности 03.04.02 «Физика» и поступила в аспирантуру ФТИ им. А.Ф. Иоффе, год окончания – 2021, в настоящее время работает в должности и.о. м.н.с. в лаборатории атомных столкновений в твёрдых телах Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН.

Диссертация выполнена в лаборатории атомных столкновений в твёрдых телах ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Научный руководитель – Зиновьев Александр Николаевич, д.ф-м.н., г.н.с., зав. лабораторией атомных столкновений в твёрдых телах ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Научный консультант – Шергин Андрей Петрович, д.ф-м.н., проф., г.н.с. лаборатории атомных столкновений в твёрдых телах ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Официальные оппоненты:

1. Борисов Анатолий Михайлович, д.ф-м.н., проф. кафедры «Технологии производства приборов и информационных систем управления летательных аппаратов» ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)».

2. Карасев Платон Александрович, д.ф-м.н., доц., проф. высшей инженерно-физической школы института физики нанотехнологий и телекоммуникаций Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

дали положительный отзыв на диссертацию.

Ведущая организация НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова в своём положительном заключении, подписанном и.о. директора НИИЯФ МГУ, член-корреспондентом РАН, проф., д.ф-м.н. Боосом Эдуардом Эрнстовичем, утверждённом проректором МГУ им. М.В. Ломоносова, проф., д.ф-м.н. А.А. Федяниным указала, что содержание диссертации Д.С. Мелузовой соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.04.04 - «Физическая

электроника», а диссертант Д.С. Мелузова заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук.

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что они оба имеют учёную степень доктора физико-математических наук, работают в различных организациях и не имеют других ограничений, накладываемых п. 3.7 действующего Положения о присуждении учёных степеней. Выбранные оппоненты являются широко известными специалистами в области физической электроники и обладают высоким уровнем компетентности в научной области, в которой выполнена диссертационная работа, что подтверждается их публикациями в рецензируемых научных журналах.

Выбор ведущей организации обосновывается тем, что Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова ведёт исследования в области взаимодействия ионов с твёрдым телом, является базовой организацией при проведении международных конференций в данной области физической электроники.

Основное содержание диссертации представлено в 13 научных статьях в научных изданиях, индексируемых в международной системе цитирования Web of Science (в скобках указан личный вклад соискателя):

1. Meluzova D. S., et. al. Reflection of hydrogen and deuterium atoms from the beryllium, carbon, tungsten surfaces // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. — 2019. — Т. 460. — С. 4—9. (разработка численных кодов, расчёт коэффициентов отражения от кристаллических, поликристаллических и аморфных мишеней, обработка данных, участие в подготовке публикации)

2. Мелузова Д. С., и др. Пробеги атомов водорода, дейтерия, гелия в аморфных кремнии и вольфраме //ЖТФ. — 2020. — Т. 90, № 1. — С. 155—160. (разработка численных кодов, расчёт пробегов атомных частиц и распределений пробегов, обработка данных, подбор характеристик для описания распределений пробегов, подготовка текста публикации)
3. Babenko P. Y., Meluzova D. S., Shergin A. P., Zinoviev A. N. Many-particle interactions and rainbow effects in grazing scattering of Ar atoms on the Al(111), Ag(111) crystals // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. — 2017. — Т. 406. — С. 460—464. (разработка численных кодов, проведение численного моделирования, участие в обработке данных, интерпретации результатов и подготовке публикации)
4. Мелузова Д. С., и др. Пространственное распределение каналируемых ионов и пробеги изотопов водорода в кристаллическом кремнии и вольфраме // ПЖТФ. — 2020. — Т. 46, № 5. — С. 34—37. (модификация численных кодов, формулировка условий численного эксперимента, проведение моделирования, обработка данных, участие в интерпретации результатов, подготовка текста публикации)
5. Meluzova D., et. al. Energy release in Be, C and W due to irradiation with D and T atoms //AIP Conference Proceedings. — 2019. — Т. 2179, № 1. — С. 020018. (модификация численных кодов, расчёт распределения линейных потерь энергии по глубине материала и обработка данных для моноэнергетических пучков, участие в интерпретации результатов и подготовке публикации)
6. Мелузова Д. С., и др. Распыление вольфрама ионами бериллия и неона // ПЖТФ. — 2020. — Т. 46, № 24. — С. 19—22. (разработка молекулярно-динамического кода, моделирование процесса распыления аморфной мишени, обработка данных, расчёт потоков обратно-рассеянных атомов, участие в интерпретации результатов и подготовке публикации)

На автореферат поступило 3 отзыва.

Отзыв от Бачурина Владимира Ивановича, д.ф-м.н., в.н.с. лаборатории «Диагностика микро- и наноструктур» Ярославского филиала Физико-технологического института им. К.А. Валиева РАН положительный и содержит 3 замечания.

1. Не понятно о согласии с какими экспериментальными данными идет речь при использовании потенциалов взаимодействия ионов с атомами мишени (рис. 1 ).

2. Чем обусловлен выбор логарифмического представления угла падения ионов на рис. 2.

3. В автореферате встречаются выражения вида «влияние ямы в потенциалах взаимодействия .. » (стр. 11 и др.). Необходимо конкретно указывать о влиянии формы кривой, глубины потенциальной ямы.

Отзыв от Гаспаряна Юрия Микаэловича, к.ф-м.н., доц. кафедры физики плазмы Национального исследовательского Ядерного университета «МИФИ» положительный и содержит 1 замечание.

1. Стоит отметить неточность, допущенную во введении, где среди материалов первой стенки и дивертора ИТЭР упоминается углерод. В финальном дизайне токамака ИТЭР в качестве обращенных к плазме материалов будут использованы только вольфрам и бериллий, а углеродные материалы были исключены из-за возможности повышенного накопления трития.

Отзыв от Корнича Григория Владимировича, д.ф-м.н., проф., зав. кафедрой системного анализа и вычислительной математики Национального университета «Запорожская политехника» и содержит 5 замечаний.

1. В списке цитируемой литературы автореферата для демонстрации актуальности тематики, исключая не подверженные влиянию времени

классические работы, следовало бы привести больше статей за последние годы.

2. На стр.16 в предпоследней строке, очевидно, вместо словосочетания «коэффициент отражения»; должно быть «коэффициент распыления», поскольку на рис. 8, на который идет ссылка по тексту, приведены коэффициенты распыления.

3. На рис.8 по оси ординат не приведена размерность коэффициента распыления, возможно потому, что она и так очевидна.

4. Очевидно, ставить в один ряд перечисления вместе со SRIM, MARLOWE инструментальную МД среду LAMMPS на стр. 8 не следовало. Использовались ли другие среды программирования, например C/C++, методы распараллеливания вычислительных потоков.

5. Если моделировалась температура в условиях первой стенки реактора, то какие использовались термостаты.

Диссертационный совет отмечает, что в рамках выполненных соискателем исследований получен ряд важных результатов, а именно: показано, что взаимодействие атома с поверхностью описывается потенциалом, отличным от известных моделей парного потенциала; в результате моделирования рассеяния лёгких атомных частиц на поверхности мишеней из бериллия, углерода и вольфрама получен ряд величин, по которым ограничены или вовсе отсутствуют экспериментальные данные; проведён подробный анализ влияния глубины притягивающей ямы в потенциалах взаимодействия «налетающая частица - твёрдое тело» на процесс отражения атомов от твёрдого тела, а также оценено влияние глубины ямы на величину пробега атома в аморфной мишени; предложена оригинальная модель, объясняющая универсальность поведения коэффициентов распыления в припороговой

области при бомбардировке вольфрама легкими ионами; обнаружено, что при энергиях ниже 100 кэВ при бомбардировке аморфной поверхности вольфрама атомами дейтерия максимум энерговыведения лежит вблизи поверхности облучаемого материала; обнаружено, что в режиме каналирования образуется устойчивая пространственная структура пучка частиц, сохраняющаяся на большей части пути частиц в канале.

Научная и практическая значимость исследования заключается в том, что в данной работе проведено моделирование взаимодействия атомных частиц с материалами, имеющими первостепенное значение для термоядерных исследований: вольфрамом, бериллием и углеродом. При проведении расчётов коэффициентов отражения и распыления, пробегов и энерговыведения учитывалось частичное или полное отсутствие экспериментальных данных, поэтому результаты моделирования могут быть использованы для восполнения существующих пробелов. Исследование радужного рассеяния атомов на поверхности кристаллов и оценка влияния притягивающей части потенциалов взаимодействия на отражение и глубину проникновения атомных частиц позволили оценить применимость широко используемых моделей парных потенциалов.

Достоверность полученных данных и выводов, сделанных на их основе, обусловлена тем, что результаты моделирования, проведенного в рамках диссертационного исследования, хорошо согласуются с результатами экспериментов. Основные потенциалы взаимодействия, которые использовались в данной работе, были разработаны с использованием теории функционала плотности, которая является широко применяемым вычислительным методом расчёта электронной структуры молекул и конденсированного вещества.

Личный вклад автора состоит в разработке и усовершенствовании численных кодов для моделирования взаимодействия атомных частиц с твёрдым телом, проведении описанных в работе численных экспериментов, обработке и обобщении полученных результатов.

Диссертация Мелузовой Д. С. является законченным научным исследованием, вносящим существенный вклад в развитие представлений о взаимодействии пучков атомов и ионов с веществом.

При проведении открытого голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 6 докторов по специальности 01.04.04 «Физическая электроника», участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 18, против – 0, воздержавшихся – 0.

На заседании 27 мая 2021 года диссертационный совет принял решение присудить Мелузовой Д.С. учёную степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.04 «Физическая электроника».

Председатель  
диссертационного совета  
докт. физ.-мат. наук

О. С. Васютинский

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
канд. физ.-мат. наук

А. В. Белашов

Дата: 27 мая 2021 года.