

**Отзыв официального оппонента**  
**на диссертацию Мелузовой Дарьи Сергеевны**  
**«МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ И АМОРФНЫХ**  
**МИШЕНЕЙ, ВКЛЮЧАЯ МАТЕРИАЛЫ ПЕРВОЙ СТЕНКИ ТОКАМАКА-РЕАКТОРА»,**  
представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук  
по специальности 01.04.04 – Физическая электроника.

Диссертационная работа Д.С.Мелузовой рассматривает процессы взаимодействия пучков ускоренных ионов с различными мишенями. Облучение поверхности пучками ионов широко применяется в качестве инструмента исследований свойств вещества, а также и для решения различных технических задач. Несмотря на уже довольно длинную историю исследований в этой области, до сих пор остается много нерешенных проблем. В частности, понимание результатов воздействия потоков ионов на различные материалы необходимо для практической реализации устройств термоядерной энергетики. Действительно, при работе реактора материалы первой стенки и дивертора будут подвергаться воздействию чрезвычайно интенсивных потоков быстрых ионов, нейтронов, электронов и гамма-излучения. Понятно, что при бомбардировке частицами, покидающими плазму, будет происходить как изменение свойств материалов первой стенки и дивертора (за счет радиационно-стимулированного образования нарушений структуры и имплантации ионов), так и состава плазмы (вследствие обратного отражения ионов и поступления в плазму распыляемого материала мишеней). Оба указанных явления, несомненно, будут оказывать существенное влияние на работу термоядерного реактора. Исследования процессов взаимодействия ускоренных ионов с реакторными материалами ведутся экспериментальными, теоретическими и расчетными методами. В то же время, с одной стороны, экспериментальные данные по взаимодействию ионов изотопов водорода с реакторными материалами либо отсутствуют, либо крайне ограничены, а с другой, – результаты моделирования не всегда хорошо соответствуют таким данным. Улучшение моделей должно позволить существенно улучшить предсказание воздействия потоков частиц из плазмы на свойства реакторных материалов, в том числе и для случаев, еще не исследованных экспериментально. Как раз развитию методов численного моделирования взаимодействия атомных пучков с твердым телом и проведению моделирования основных процессов, имеющих место при ионном облучении кристаллических и аморфных мишеней, включая материалы первой стенки термоядерного реактора, и посвящена диссертация. Таким образом, тема представленного исследования **является актуальной и практически значимой.**

Основная часть диссертации состоит из введения, трех глав и заключения и представляет собой законченное исследование. Первая глава содержит обзор результатов, полученных другими исследователями. Проводя анализ опубликованных ранее данных, автор описывает имеющиеся экспериментальные данные, рассматривает развитые подходы к теоретическому и численному моделированию взаимодействия ускоренных ионов с веществом. Показывает достоинства и недостатки различных расчетных методов, в частности, подхода в рамках приближения парных столкновений (ВСА), метода молекулярной динамики и метода траекторий. Список процитированной литературы достаточно полно отражает существующие публикации по тематике работы и содержит ссылки на 101 источник. Далее автор обосновывает собственный подход к решению задачи моделирования. Помимо вопросов моделирования, в обзоре довольно подробно описаны имеющиеся экспериментальные данные о проникновении ионов в мишень и распылении. Показано, что для целого ряда практически важных комбинаций атомов ион-мишень требуется уточнение потенциалов, из чего делается вывод о необходимости дальнейшего развития методик их определения, в том числе на основе новых экспериментальных данных. При разработке методики расчетов автор достаточно внимательно и глубоко подходит к имеющимся проблемам, отдельно фокусируясь на

критических параметрах, влияющих на результат. Сравнение получаемых им результатов с литературными данными показывает неплохое согласие в части, где это возможно, что подтверждает их **корректность и надежность**.

В частности, в работе развита методика получения параметров потенциала взаимодействия «налетающая частица - поверхность» из экспериментальных данных. На основании исследования явления радужного рассеяния показано, что взаимодействие ускоренного иона с поверхностью описывается потенциалом, отличным от известных моделей парного потенциала. Разработан численный код для моделирования взаимодействия пучков ионов и атомов с твёрдым телом, который успешно применен для моделирования рассеяния ионов при прохождении через твердую мишень в монокристаллическом и аморфном состоянии, ее распыление. Проведён подробный анализ влияния притягивающей ямы в потенциалах взаимодействия «налетающая частица - твёрдое тело» на процесс отражения атомов от твёрдого тела. Выполнено моделирование рассеяния лёгких атомных частиц на поверхности мишеней из бериллия, углерода и вольфрама. Получены значения коэффициентов отражения для большого числа комбинаций атомов и мишеней, а также коэффициентов распыления и их угловых зависимостей, по которым ограничены или отсутствуют экспериментальные данные (в частности, для случая бомбардировки аморфного вольфрама ионами бериллия). Показано, что при энергиях ниже 100 кэВ максимум энерговыделения при бомбардировке аморфной поверхности вольфрама атомами дейтерия лежит ближе к поверхности облучаемого материала, чем предполагалось ранее. Разработана модель для аналитического расчёта коэффициентов распыления вольфрама лёгкими ионами. Предложено объяснение универсальности зависимостей коэффициентов распыления от энергии в припороговой области. Обнаружено, что в режиме каналирования образуется устойчивая пространственная структура пучка частиц, сохраняющаяся на большей части пути частиц в канале. Все описанные результаты **получены автором впервые**.

На основании изложенного считаю правильным заключить, что аргументация подхода к исследованиям, анализ полученных данных вполне удовлетворительны, а сделанные **выводы обоснованы и достоверны**. Полученные автором результаты **являются новыми** и расширяют наше представление о процессах, происходящих в твердых мишенях при их бомбардировке ускоренными ионами. Нет сомнений в том, что Д.С.Мелузова **лично внесла основной вклад** в постановку задач и разработку методики исследования, разработала расчетные программные коды, выполнила моделирование и проанализировала полученные данные. Накопленный материал существенно улучшает понимание механизмов взаимодействия ионов с веществом, что делает работу **значимой теоретически**. Результаты исследования **являются** также и **практически значимыми**, поскольку открывают возможности для более детального описания воздействия плазмы на материалы первой стенки и дивертора термоядерного реактора. **Основные результаты**, описанные в диссертации, **достаточно полно отражены** в 13 статьях, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК, и были представлены на 8 международных конференциях. Автореферат вполне корректно отражает содержание диссертации.

В то же время, при прочтении работы у меня возник ряд вопросов и замечаний.

1. Известно, что заряд быстрой частицы в твердом теле зависит от ее скорости. В то же время при описании пути учета электронных тормозных способностей автор указывает, что атомы, влетающие в твёрдое тело, становятся заряженными уже через несколько столкновений с атомами твёрдого тела, но не рассматривает этот вопрос подробно.
2. Почему смещения атомов, выбранные для анализа роли тепловых колебаний, вдоль осей  $x$  и  $y$  задаются совпадающими случайными величинами?
3. Автор указывает, что при моделировании радужного рассеяния методом ВСА для комбинации  $Ar-Al$  достигается удовлетворительное согласие расчетных и

экспериментальных данных только для энергии ионов 10 кэВ. Для более низких энергий требуется использование метода траекторий. Можно ли получить удовлетворительный результат расчетов методом ВСА для более высоких энергий? Для пары Ag-Ag согласия не удастся достичь даже при существенно более высокой энергии 18 кэВ. Есть ли порог, после превышения которого и для этой пары будет работать приближение парных столкновений?

4. При расчете коэффициентов отражения и распыления автор рассматривает атомно-чистые поверхности мишеней. В то же время, наличие окисных пленок и других загрязнений может оказать влияние на происходящие процессы. Этот вопрос не рассмотрен.

Однако, указанные замечания не снижают общего высокого мнения о представленной работе. В соответствии со сказанным выше считаю, что *диссертация* «Моделирование ионного облучения кристаллических и аморфных мишеней, включая материалы первой стенки токамака-реактора» *отвечает всем требованиям*, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а *соискатель*, Мелузова Дарья Сергеевна, *достойна присуждения ученой степени* кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.04 – Физическая электроника.

Официальный оппонент

Карасев Платон Александрович  
доктор физико-математических наук, доцент,  
профессор высшей инженерно-физической школы  
института физики нанотехнологий и  
телекоммуникаций федерального государственного  
автономного образовательного учреждения высшего  
образования «Санкт-Петербургский политехнический  
университет Петра Великого»  
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
Тел. (812) 552 7516; e-mail: platon.karaseov@spbstu.ru