

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА,

доктора физико-математических наук, профессора кафедры 1203 Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московского авиационного института (национального исследовательского университета)» Борисова Анатолия Михайловича на диссертацию Бабенко Павла Юрьевича «Торможение, рассеяние и распыление при столкновениях атомов кэВ-энергий с твердым телом», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.5 – «физическая электроника»

Актуальность темы исследования

Столкновения атомных частиц имеют место в технике и явлениях природы, что ведет к необходимости их всестороннего изучения. Существенные успехи современной физики связаны с исследованием взаимодействия пучков заряженных частиц с твердым телом и многочисленными приложениями пучковых технологий для создания новых материалов и диагностики твердого тела. Ионная имплантация используется для легирования полупроводников в микроэлектронике, металлов и сплавов в инженерии поверхности конструкционных материалов широкого применения. Распыление материалов при ионной бомбардировке используется для очистки и послойного травления поверхностей, для изготовления тонких пленок, для анализа поверхности, а также в распылительных ионных источниках. Исследования рассеяния налетающих частиц твердыми мишенями имеют большое теоретическое и прикладное значение. При энергиях частиц 100 кэВ – 2 МэВ они широко используются при анализе поверхностного слоя глубиной ~1 мкм методом спектроскопии резерфордовского рассеяния ионов. При энергиях частиц ~1 кэВ метод спектроскопии медленных рассеянных ионов позволяет с высокой чувствительностью исследовать состав поверхностного монослоя. Атомные и молекулярные физические процессы играют существенную роль в нагреве, охлаждении, потерях, диагностике и моделировании высокотемпературной плазмы. Распыление, обратное рассеяние и имплантация оказывают решающее воздействие на стенки термоядерных устройств и плазменных установок. Важной проблемой является повышение стойкости конструкционных материалов под действием атомных частиц. В последние годы исследования столкновений атомных частиц с твердым телом интенсивно развиваются в России и во всем мире. Диссертация Бабенко Павла Юрьевича находится в русле актуальных проблем взаимодействия пучков заряженных частиц с твердым телом и посвящена торможению, рассеянию и распылению при столкновениях атомов кэВ-энергий с твердым телом.

Содержание диссертации из 7 глав в полной мере отражает и обосновывает положения, выносимые на защиту. В первой главе на основе обзора литературных данных показано, что существующие теории, описывающие электронные тормозные потери не в полной мере учитывают перестройку электронных оболочек при атомных столкновениях,

выявлены проблемы по учету ядерных и электронных потерь энергии при прохождении атомных частиц через вещество, проанализированы потенциалы межатомного взаимодействия для компьютерного моделирования отражения и распыления материалов при бомбардировке атомами. Вторая глава посвящена разработанным и используемым автором компьютерным программам и методикам моделирования взаимодействия атомных частиц с поверхностью твердого тела. В 3 главе обосновывается новая модель торможения ионов средних масс кэВ-энергий, учитывающая доминирующий вклад в неупругие потери образования автоионизационных состояний при столкновениях атомов. То, что непрерывная составляющая в спектрах электронов, образующихся при столкновениях атомов средних масс, обусловлена переходами электронов в континуум убедительно показывается в главе 4. Влияние многократных столкновений на результаты измерений электронных потерь энергии методом обратного рассеяния и методом прохождения пучка через тонкую пленку, соотношение вклада процессов перезарядки, возбуждения и ионизации в электронных тормозной способности, расчеты ядерных тормозных способностей для 48 систем при использовании DFT потенциалов рассматриваются и обосновываются в главах 4 и 5. Предсказан дополнительный пик в энергетической зависимости сечения ядерных потерь, связанный с рассеянием на потенциальной яме, показано значительное отличие потенциалов, применяемых для описания рассеяния в газовой фазе и твердом теле, предложены аналитические формулы для потенциалов, учитывающие изменение экранировки при столкновениях частиц в металле. В 6 и 7 главах приводятся графики рассчитанных автором энергетических зависимостей коэффициентов отражения и распыления для ионов H, D, T, Be, C, N, O, Ne, Ar, W в широком диапазоне энергий $10-10^5$ эВ на мишенях из Be и W, рассматриваемых как перспективные материалы для токамака-реактора. Предложена и теоретически обоснована модель распыления легкими частицами твердотельных мишеней для расчета коэффициента распыления и средней энергии распыленных частиц и предложено оригинальное аналитическое выражение для энергетического порога распыления.

В целом, представленная к защите диссертация Бабенко П.Ю. содержит подробное описание различных подходов к решению поставленных задач, отличается высоким уровнем обоснованности выводов и наличием практической значимости.

Степень обоснованности научных положений и выводов

Научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные в диссертационной работе, являются обоснованными и достоверными. Их доказательная база построена на комплексном применении современных методов теоретического исследования и компьютерного моделирования. Достоверность результатов компьютерного моделирования обеспечивается, прежде всего, их подтверждением имеющимися экспериментальными данными и результатами компьютерного моделирования, полученными другими авторами. Таким образом, научные положения и

выводы работы подкреплены результатами многочисленных компьютерных расчетов, их воспроизводимостью и корректной обработкой.

Достоверность результатов

Достоверность полученных данных определяется сравнением результатов моделирования с экспериментальными данными и с расчетами других научных групп. Также проводилось сравнение расчетов в приближении парных взаимодействий с расчетом методом молекулярной динамики, сравнение расчетов показало их хорошее согласие. Результаты исследований были обсуждены на научных семинарах в ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, МИФИ, НИИЯФ МГУ имени Д.В. Скобельцына, ННГУ имени Н.И. Лобачевского, ЯрГУ им. П.Г. Демидова, РГРТУ имени В.Ф. Уткина и докладывались автором на целом ряде всероссийских и международных конференций. В том числе автором было сделано на этих конференциях 3 приглашенных доклада. Основные выводы диссертации отражены в ведущих российских и международных научных журналах, в том числе в обзоре в УФН. Все это позволяет считать представленные результаты обоснованными, достоверными и отвечающими современному мировому уровню научных исследований.

Научная новизна диссертации

1. Предложен механизм торможения частиц в веществе, учитывающий образование автоионизационных состояний при столкновениях атомных частиц, который вносит основной вклад в электронные тормозные способности для атомов средних масс и методика расчета вклада указанного механизма.
2. Предложено количественное описание основных механизмов образования электронов с непрерывным энергетическим распределением при атомных столкновениях, включающих динамическую ионизацию и оже-переходы в квазимолекуле в процессе столкновения.
3. Впервые определены потенциалы межатомного взаимодействия для столкновений атомных частиц в твердом теле из анализа экспериментальных данных по многократному рассеянию протонов на мишени из золота и прохождению частиц через пленку золота. Предложена теоретическая модель, учитывающая влияние электронов проводимости металла на экранировку в потенциале при взаимодействии частиц, количественно описывающая экспериментальные данные.
4. Получены потенциалы, описывающие радужное рассеяние атомов инертных газов на полуканалах кристаллов Al и Ag. Установлено значительное различие потенциалов, описывающих радужное рассеяние, от традиционных моделей, применяемых для описания атомных столкновений в газовой фазе.
5. Рассчитаны сечения ядерных тормозных потерь с использованием DFT (Density Functional Theory) потенциалов для большого количества систем. Обнаружен дополнительный пик в зависимости сечения ядерных тормозных потерь от энергии

соударения, связанный с рассеянием на потенциальной яме. Установлено, что это явление значительно увеличивает тормозные потери при энергиях соударения 1 - 30 эВ.

6. Предложена модель, описывающая зависимость коэффициента распыления и средней энергии распыленных частиц от энергии соударения для столкновения легких частиц с тяжелой мишенью и формула для оценки энергетического порога распыления.

7. Рассчитаны коэффициенты отражения и распыления при соударениях изотопов водорода, гелия и ионов примесей с мишенями из Be и W - перспективных материалов для токамака-реактора.

Соответствие содержания автореферата диссертации

Диссертация написана в четком и ясном стиле, имеет оптимальную структуру и объем глав, содержание автореферата соответствует тексту диссертации.

Замечания по диссертационной работе

1). При моделировании не учитывалась шероховатость поверхности, которая может оказывать значительное влияние на прохождение, отражение и распыление частиц.

2). Моделирование отражения и распыления, а также оценка энергетического порога распыления ограничено падением частиц по нормали к поверхности. Это сужает область применения полученных результатов.

3). Не совсем ясно, как влияет выбор потенциала межатомного взаимодействия при описании рассеяния частиц в твердом теле на получаемые в компьютерном расчете значения коэффициента распыления.

4) Полезным представляется сравнение расчетов порога распыления по предложенным формулам с известными и применяемыми формулами, полученными в работе Y. Yamamura, J. Bohdanky, Few collisions approach for threshold sputtering // Vacuum 35 (1985) 561–571.

5) Полезными для практического использования полученных расчетов были бы аппроксимации полученных данных аналитическими формулами, аналогичных формулам Экштайна, аппроксимирующих результаты компьютерного моделирования с помощью программы TRIM-SP.

6) Есть замечания по оформлению диссертации. В частности, непонятна рубрика «заключение» перед выводами к главе 7, после которой опять идет «Заключение» по всей работе.

Приведенные замечания не умаляют значения проделанной работы и полученных результатов.

Заключение

Диссертационная работа «Торможение, рассеяние и распыление при столкновениях атомов кэВ-энергий с твердым телом» Бабенко Павла Юрьевича представляет собой законченную научно-квалификационную работу, совокупность новых научных положений которой можно квалифицировать как научное достижение в области взаимодействия пучков заряженных частиц с твердым телом.

Считаю, что диссертационная работа Бабенко Павла Юрьевича "Торможение, рассеяние и распыление при столкновениях атомов кэВ-энергий с твердым телом" отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.5 "Физическая электроника" согласно Положению о присуждении ученых степеней в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук, а ее автор Бабенко П.Ю. заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук.

Борисов Анатолий Михайлович, официальный оппонент,
доктор физико-математических наук по специальностям
01.04.08 – физика плазмы, 01.04.01 – Приборы и методы
экспериментальной физики, профессор кафедры 1203
Федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Московский авиационный институт (национальный
исследовательский университет)»

125993, Волоколамское шоссе, д. 4, г. Москва, А-80, ГСП-3

E-mail: anatoly_borisov@mail.ru

Телефон: 8 (499) 158 92 09

 /Борисов А. М./

Дата: 05.03.2026г



