

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертацию Мусина Артема Игоревича на тему: «Исследование механизмов распыления монокристаллов методами молекулярной динамики», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Мусина Артема Игоревича посвящена исследованию механизмов формирования распределений атомов, распыленных с поверхности монокристалла при ионной бомбардировке – на примере монокристалла Ni (001). Для получения научных результатов им была создана авторская программа, в которой использовался распространенный метод компьютерного моделирования – метод молекулярной динамики.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка цитируемой литературы, списка сокращений и словаря терминов. Работа изложена на 136 страницах машинописного текста, содержит 66 рисунков и список литературы из 143 наименований. Следует отметить, что объём и структура работы вполне соответствуют требованиям «Положения» по оформлению диссертации.

Актуальность диссертационной работы. Распыление поверхности твердых тел ионной бомбардировкой широко используется в практических целях для напыления тонких пленок, при анализе состава поверхностного слоя методами электронной и ионной спектроскопии, формировании на поверхности микро- и наноструктур. К настоящему времени накоплен большой объём экспериментальных и теоретических результатов, посвященных изучению механизмов распыления. Одним из инструментов исследования процессов взаимодействия ускоренных ионов с поверхностью является компьютерное моделирование. Существуют различные программы,

в том числе коммерческие (TRIM, TRIDYN, SDTrimSP, LAMMPS и др.) использующие методы Монте-Карло или молекулярной динамики. Представляют особый интерес авторские программы на основе метода молекулярной динамики, которые позволяют получать детальную картину процесса распыления с получением информации, описывающих распределения (энергетические и пространственные) распыленных атомов, координаты атомов, участвующих в каскаде соударений при различных параметрах ионного облучения. Поэтому актуальность темы диссертационной работы А.И. Мусина, посвященной исследованию влияния поверхностного слоя на вылет распыленных атомов методом молекулярной динамики с помощью созданной программы не вызывает сомнений.

Новизна полученных результатов. В работе получен целый ряд новых результатов, среди которых можно выделить следующие:

- создана вычислительная модель, содержащая 20 атомов, которая позволяет методом молекулярной динамики исследовать влияние поверхностных атомов на энергетические и угловые распределения распыленных частиц, которая позволяет существенно сократить время расчетов по сравнению с использованием полномасштабной МД модели;
- показано, что в формирование пятен Венера при распылении монокристалла Ni существенный вклад вносит взаимодействие вылетающих атомов с ближайшими атомами верхнего слоя кристалла;
- рассчитаны энергетические распределения распыленных с поверхности монокристалла (001) Ni атомов в различных угловых направлениях;
- установлено, что при магнитном фазовом переходе количество распыленных атомов увеличивается при переходе из ферро- в парамагнитное состояние, что обусловлено уменьшением энергии связи атомов на поверхности.

Степень обоснованности и достоверности полученных положений, основных результатов и выводов подтверждается хорошим согласием результатов с экспериментальными данными, в частности, получены реалистичные сдвиги максимума энергетического распределения при изменении полярного угла выхода распыленных атомов и изменение коэффициента распыления никеля при магнитном фазовом переходе. Полученные результаты также согласуются с результатами расчетов в рамках предложенной автором полномасштабной молекулярно-динамической модели, наиболее приближенной к эксперименту.

Практическая значимость результатов. Полученные результаты представляют практический интерес при проведении химического анализа поверхности методами вторично-ионной и вторично-нейтральной масс-спектрометрии с квадрупольным масс-анализатором, когда требуется выбор геометрии расположения образца и входной апертуры анализатора для максимального сбора распыленных частиц, а также для настройки энергоанализатора перед масс-анализатором на наибольшую интенсивность регистрируемого сигнала.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы достаточно полно изложены в трех статьях в рецензируемых журналах, индексируемых в базе данных РИНЦ, WoS, Scopus, в пяти статьях в сборниках трудов конференций, индексируемых в РИНЦ и 17 тезисах докладов, представленных на Международных и Всероссийских конференциях.

Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации, раскрывает основные результаты и выводы диссертации, соответствует перечню опубликованных работ.

Замечания по работе.

1. Не совсем корректно заявлять представленные в работе результаты по изменению энергетических и угловых распределений распыленных атомов при изменении атомного номера мишени Z от 28 (Ni) до 79 (Au), поскольку при этом не учитываются параметры решетки поверхностных атомов.

2. В тексте диссертации не приводятся пояснений, в каких относительных единицах измеряются представленные значения коэффициентов распыления и их производные по энергии и углам. Поэтому вызывает недоумение их величины.

3. К сожалению, в тексте диссертации и автореферата имеются неточности. В формуле 1.6 (стр. 19) пропущена постоянная Авогадро, для обозначения коэффициента распыления в разных местах диссертации используются обозначения Y и S , на рис. 2.8 и 2.9 на оси ординат азимутальный угол обозначен ρh вместо ϕ , высота потенциального барьера в автореферате указана в \AA , а не в эВ.

Однако, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. В целом, по объёму представленного материала, научной новизне, фундаментальности и достоверности результатов, обоснованности защищаемых положений, практической значимости представленная диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода.

Содержание диссертации, посвященной исследованию распыления монокристалла никеля, соответствует специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния (по физико-математическим наукам), а именно следующему ее направлению: «Теоретическое и экспериментальное исследование воздействия различных видов излучений, высокотемпературной плазмы на природу изменений физических свойств конденсированных веществ», также соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова. Работа оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Таким образом, считаю, что соискатель Мусин Артем Игоревич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук, доцент,

ведущий научный сотрудник лаборатории

«Диагностика микро- и наноструктур»

Ярославского филиала Физико-технологического института

им. К.А. Валиева РАН (ЯФ ФТИАН РАН)

БАЧУРИН Владимир Иванович

02 мая 2023

Контактные данные:

тел. +7(910)970-46-97, e-mail: vibachurin@mail.ru

Научная специальность: 01.04.04 – физическая электроника

Ярославский Филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технологического института им. К.А. Валиева Российской академии наук. 150007, г. Ярославль, ул. Университетская, д. 21, (4852) 24-65-52

email: director@yf-ftian.ru

Подпись ведущего научного сотрудника ЯФ ФТИАН РАН доктора физико-математических наук, доцента БАЧУРИНА В.И. удостоверяю

Врио директора

ЯФ ФТИАН им. К.А. Валиева РАН

доктор физико-математических наук

Трушин О.С.

02 мая 2023 года