

## 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

Для анализа элементного состава и структуры поверхности твердого тела широко используются такие методы, как масс-спектрометрия вторичных ионов и масс-спектрометрия распыленных нейтральных атомов. Из-за влияния поверхностного поля регистрируемые в рамках данных методов частицы распределены по углам и энергии не так, как они были распределены в момент вылета с поверхности. Недостаточное понимание механизмов перераспределения вторичных частиц по углам и энергии в процессе вылета затрудняет обратное преобразование экспериментального распределения.

Целью диссертационной работы Мусина А.И. являлось исследование механизмов формирования угловых и энергетических распределений атомов при эмиссии с поверхности грани (001) монокристалла никеля. **Актуальность** данной темы не вызывает сомнений, поскольку детальное изучение этих механизмов поможет улучшить существующие методы элементного и структурного анализа твердых тел.

Для достижения цели соискателем был решен ряд задач, в частности:

1. Была написана программа для расчета эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni и программа для обработки полученных данных.
2. Были рассчитаны распределения распыленных атомов по энергии, по полярному углу, по азимутальному углу.
3. Были выделены группы фокусированных и перифокусированных атомов, траектории которых качественно отличаются по азимутальному углу.

4. Были найдены интервалы полярного и азимутального углов вылета и энергии наблюдения, для которых сигнал формируется в основном за счет перефокусированных атомов.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения с основными результатами и выводами, списка цитируемой литературы и отдельного списка публикаций автора по теме диссертационной работы, списка сокращений и словаря терминов. Работа изложена на 136 страницах машинописного текста, содержит 66 рисунков и список литературы из 143 наименований. Объем и структура работы соответствуют требованиям к работам подобного рода.

**Введение** отражает общую характеристику работы. Здесь соискатель обосновывает актуальность выбранной темы, приводит формулировку объекта и предмета исследования, целей и задач, указывает научную новизну, теоретическую и практическую значимость работы, выносимые на защиту научные положения. Приводится информация о публикациях автора диссертации в журналах, индексируемых Web of Science, Scopus, RSCI, в иных изданиях, об апробации работы, описан личный вклад соискателя, указывается структура и объем диссертации.

В **первой главе** соискателем выполнен обзор по теме ионного распыления, в котором основной акцент делается на фундаментальных процессах, ответственных за распыление атомов с поверхности. Описаны классические модели распыления (Зигмунда, Силсби и др.), указаны имеющиеся подходы, которые позволяют учесть дискретность поверхности. Описаны основы метода молекулярной динамики применительно к задаче распыления. Указано влияние фазовых переходов I и II рода на распыление.

В конце главы описываются численные модели, использованные соискателем для получения научных результатов: модель 20 атомов и полномасштабная МД-модель с падением ионов. Приводятся выводы.

Во **второй главе** соискатель обсуждает результаты, полученные в рамках модели 20 атомов: угловое распределение распыленных атомов с

пятнами Венера, эффект фокусировки на линзе из двух ближайших атомов поверхности. Разбирается случай рассеяния на одиночном атоме и на линзе из двух атомов. Показывается наличие особой группы атомов, т.н. «перефокусированных» атомов по азимутальному углу, для которых азимутальный угол наблюдения  $\varphi$  находится по другую сторону от центра линзы, чем азимутальный угол вылета  $\varphi_0$ . Обсуждается эффект многозначности перефокусированных атомов, который усложняет задачу обратного преобразования распределения распыленных атомов. Показывается, что эта многозначность вызвана двумя разными типами рассеяния перефокусированного атома – на одном или на двух атомах-соседах. В конце главы сформулированы выводы.

В третьей главе соискатель исследует вопрос, насколько распыленные атомы чувствительны к изменению параметров бомбардируемой мишени. Для этого автор снова использует модель 20 атомов, с измененным атомным номером  $Z$  вещества мишени, при этом распределение распыленных атомов сдвигается по направлению к нормали к поверхности. Далее исследуется вопрос об изменении коэффициента распыления при изменении энергии связи. Обсуждается вопрос о влиянии изменения энергии связи мишени на эффект перефокусировки атомов по азимутальному углу, влияние магнитного фазового перехода, при котором также изменяется энергия связи. В конце главы сформулированы выводы.

В четвертой главе соискатель обсуждает результаты, полученные в рамках полномасштабной МД-модели с падением ионов, и сравнивает их с результатами из глав 2-3. В полномасштабной модели фиксировались энергия и углы распыленного атома не только вдалеке, но и вблизи поверхности, что позволило выяснить вклад поверхностных механизмов в процессе их вылета. В частности, в распределении по полярному углу вылета отсутствует максимум на угле  $45^\circ$ , из чего автор делает вывод, что данный максимум формируется только за счет влияния поверхности.

Далее соискатель обсуждает влияние температуры мишени на распыление, используя две контрольные точки: 0 К и 300 К. В распределениях распыленных атомов для несимметричного интервала азимутального угла при 0 К обнаружены отдельные хребты, некоторые из них соответствуют перефокусированным атомам, что открывает возможность их экспериментальной регистрации. В конце главы сформулированы выводы.

Диссертация соискателя завершается разделом, в котором сформулированы **основные результаты и выводы** работы. Среди них наиболее важными представляются следующие.

1. Доказано, что именно поверхностные механизмы фокусировки ответственны за формирование пятен Венера в угловом распределении распыленных атомов, поскольку максимумы в направлениях на пятна отсутствуют в распределении по начальному полярному углу, рассчитанному на расстоянии  $0.3 \text{ \AA}$  от поверхности.
2. Установлено хорошее согласие модели 20 атомов и полномасштабной МД-модели. В рамках обеих моделей обнаружен немонотонный сдвиг максимума распределения распыленных атомов по полярному углу с увеличением энергии наблюдения, который наблюдается экспериментально.
3. В полномасштабной модели перефокусированные атомы составляют 36% (при 0 К) и 33% (при 300 К) всех распыленных атомов. Было показано, что в экспериментах по распылению грани (001) Ni с разрешением одновременно по углам и энергии возможно выделение отдельного сигнала перефокусированных атомов.

Все результаты, полученные соискателем в работе, являются **важными и новыми**. Достоверность результатов подтверждается грамотным выбором и реализацией методов исследования, а также авторскими публикациями в научных изданиях.

О личном вкладе и апробации работы соискателя свидетельствуют опубликованные им в соавторстве статьи в журналах, индексируемых Web of

Science, Scopus, RSCI, статьи в сборниках трудов конференций, тезисы докладов.

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

**В качестве замечаний можно отметить следующие:**

1. Не обоснован выбор никеля в качестве материала мишени. Да, в никеле возможен фазовый переход II рода, но в разделе 1.6 диссертации также рассматривается вопрос о влиянии фазовых переходов I рода на распыление, который в работе не получил развития. Вместе с тем, было бы важным проследить, как поверхностные механизмы фокусировки меняются при смене типа кристаллической решетки и индексов Миллера.
2. Соискатель в основном сравнивает результаты, полученные в рамках двух моделей, друг с другом, при этом ссылается на экспериментальные данные, в которых наблюдался один из эффектов – немонотонный сдвиг максимума полярного углового распределения с увеличением энергии наблюдения. Необходимо сопоставить данные моделирования с экспериментальными данными.
3. К сожалению, текст диссертации и автореферата содержит ошибки и опечатки. Например, в диссертации на стр. 13 «рассения» вместо «рассеяния», на стр. 15 «коэффициент» вместо «коэффициент», на стр. 20 «калометрии» вместо «калориметрии». В автореферате сбита нумерация разделов в главе 3, научное содержание отражено верно, однако текст, отнесенный к разделам 3.1 и 3.2, должен быть отнесен к разделу 3.1 диссертации, отнесенный к 3.3 – к разделу 3.2 диссертации, отнесенный к 3.4 – к разделу 3.3 диссертации.

Приведенные замечания, тем не менее, не снижают высокий уровень работы и достоверность полученных результатов. По всем критериям представленная диссертация отвечает требованиям, установленным

Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к диссертациям на соискание степени кандидата наук.

Содержание диссертации Мусина А.И. 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», 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.

По итогу рассмотрения диссертации 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,  
заведующий кафедрой «Физико-технические проблемы метрологии»

Института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ

Борисюк Петр Викторович

11.05.2023 \_\_\_\_\_  
ДАТА

Контактные данные:

тел. e-mail: [pvborisyuk@mephi.ru](mailto:pvborisyuk@mephi.ru)

Научная специальность: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

ФГАОУ ВО «Национальный

«МИФИ». 115409, Москва, Кап

тел. +7 495 788-56-99, e-mail: [in](mailto:in)