

## 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

Диссертация Мусиным А.И. посвящена исследованию ионного распыления монокристаллов металлов методами молекулярной динамики. Объектом исследования являлись механизмы формирования распределений атомов, распыленных с поверхности монокристалла под действием ионной бомбардировки.

**Актуальность** работы Мусина А.И. обусловлена рядом причин, имеющих как фундаментальное, так и прикладное значение. Во-первых, распыление частиц с поверхности твердого тела является одним из физико-химических методов исследования структуры и элементного состава поверхности, как например масс-спектрометрия распыленных нейтральных атомов и масс-спектрометрия вторичных ионов. Во-вторых, сам процесс ионного распыления (травления) используется для решения практических задач, таких как создание необходимого рельефа на поверхности, создание наноструктур, напыление тонких пленок и т.д., поэтому необходимо совершенствование теории этих процессов.

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. Объём и структура работы соответствуют требованиям к работам подобного рода.

Во **Введении** автором представлена общая характеристика работы: обоснована актуальность, указаны объекты исследования, сформулированы цели и задачи, научная новизна, теоретическая и практическая значимость, основные положения, выносимые на защиту. Указана информация о публикациях автора в научных журналах, индексируемых в Web of Science, Scopus, RSCI, иных публикациях, также сведения об апробации работы, описан личный вклад, приводится структура и объём диссертации.

**Первая глава** содержит обзор литературы по ионному распылению. Описаны основные механизмы – каскадные и поверхностные, которые использовались для объяснения анизотропии углового распределения атомов, распыленных с поверхности монокристаллов (пятна Венеры). Описаны вычислительные модели, используемые автором для получения научных результатов: упрощенная модель 20 атомов поверхности и полномасштабная молекулярно-динамическая модель с падением ионов на поверхность.

**Вторая глава** содержит результаты моделирования эмиссии атомов с поверхности монокристалла (001) Ni, полученные по модели 20 атомов. В **разделе 2.1** представлено расчетное угловое распределение распыленных атомов, которое хорошо соответствует характерному угловому распределению, получаемому экспериментально на плоском коллекторе при распылении грани (001). В **разделе 2.2** анализируются двумерные распределения эмитированных атомов с разрешением по полярному углу и энергии. В этих распределениях отмечены особенности, которые объясняют экспериментально наблюдаемый эффект сдвига максимума энергетического распределения в сторону меньших энергий при увеличении полярного угла наблюдения. В **разделе 2.3** определен вклад особой группы распыленных атомов – перефокусированных по азимутальному углу. Обсуждается возможность многозначности, который необходимо учитывать при обратном

преобразовании распределений распыленных атомов, полученных экспериментально. В последнем **разделе 2.4** анализируются механизмы вылета перефокусированных атомов с помощью распределений распыленных атомов по начальным параметрам вылета и траекторий вылета отдельных атомов. В конце главы сформулированы выводы.

В **третьей главе** исследовано изменение распределений распыленных атомов при изменении параметров мишени, таких как атомный номер, энергия связи и магнитное состояние (для никеля – ферромагнитное и парамагнитное). В **разделах 3.1** и **3.2** рассматривается эволюция распределений распыленных атомов по энергии и полярному углу с изменением атомного номера вещества мишени. **Раздел 3.3** посвящен вычислению параметра  $m_{\text{eff}}$  в зависимости коэффициента распыления от энергии связи, который численно показывает, насколько сильно атомы перераспределяются по углам и энергии в процессе вылета с поверхности. **Раздел 3.4** посвящен анализу изменения коэффициента распыления и смещения максимумов перефокусированных атомов при фазовом переходе никеля из парамагнитного в ферромагнитное состояние. В конце главы сформулированы выводы, в них отражено, в частности, то, что перефокусированные атомы чувствительны к изменению параметров бомбардируемой мишени.

В **четвертой главе** диссертации представлены результаты, полученные в рамках полномасштабной молекулярно-динамической модели, эти результаты сопоставляются с результатами, полученными в рамках упрощенной модели 20 атомов, которые представлены в главах 2-3. В **разделе 4.1** рассчитан интегральный коэффициент распыления и также выявлен немонотонный сдвиг максимума распределения распыленных атомов по полярному углу с разрешением по энергии, который имеет место в эксперименте и в модели 20 атомов. В **разделе 4.2** обсуждается зависимость распыления от температуры, влияние которой моделировалось с помощью

так называемой «ванны» Берендсена. В разделе 4.3 обнаружены и проанализированы отдельные максимумы в распределениях распыленных атомов, наблюдаемых в выбранном интервале азимутального угла. В конце главы сформулированы выводы, в них отмечается хорошее согласие результатов, полученных на основе двух авторских моделей друг с другом.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы работы. Наиболее важные из них следующие:

1. Обнаружена многозначность перефокусированных атомов по начальному азимутальному углу вылета, этот эффект получил объяснение после анализа траекторий атомов и связан с двумя различными типами рассеяния: на одном или на двух атомах поверхности.
2. Найдены такие телесные углы и значения энергии наблюдения, в которых все распыленные атомы на 100% являются перефокусированными. Показано, что сигнал перефокусированных атомов можно выделить экспериментально при достаточном разрешении по углам и энергии.
3. Доказано преимущественное влияние поверхностных механизмов фокусировки на формирование пятен Венера в угловом распределении распыленных атомов, поскольку картина с пятнами Венера наблюдается в авторской модели 20 атомов, в которой каскадные механизмы не учитываются.

Результаты, полученные в диссертационной работе А. И. Мусина, являются **важными** и **новыми**. **Достоверность** результатов не вызывает сомнений, поскольку они получены широко распространенным методом молекулярной динамики.

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. Тема диссертации А.И. Мусина является одним из направлений общей задачи дифракции частиц на периодических структурах, причем в условиях деградации таких структур при бомбардировке одиночными атомами или ионами. Помимо твердых кристаллических тел, металлов, других неорганических материалов, такая задача актуальна и для органических полимеров со слабыми межатомными связями. При этом значительную роль имеет степень упорядочения таких полимерных материалов и возможность восстановления дефектов после вылета распыленных атомов. Во Введении автором отмечается, что даже в аморфных материалах наблюдаются неравномерности углового распределения распыленных атомов поверхности. В связи с этим, было бы целесообразно оценить пределы возможного разупорядочения структуры мишени, при которых результаты моделирования угловых распределений распыленных атомов поверхности монокристалла меняются незначительно. Т.е. было бы полезно обозначить подходы к оценке устойчивости найденных решений по отношению к нарушениям кристаллической решетки в виде точечных дефектов.
2. В Главе 4 автором рассматривается влияние температуры мишени (кристалл Ni) на угловые распределения распыленных атомов (пятна Венера). Явно видны различия для случаев 0К и 300К, что согласуется и с экспериментальными данными с подогревом мишени. Однако в целом следует отметить, что в диссертации рассмотрены случаи бомбардировки атомами с различной энергией, но не рассматриваются

процессы диссипации энергии и характерные времена релаксации атомов мишени, которые определяются энергией межатомных связей и температурой. Очевидно, что характерные времена релаксации, инерционность атомов мишени с различным атомным номером, для которых производились расчеты, могут также достаточно сильно влиять на результаты, как и другие параметры исследованных систем. Было бы необходимо обсудить основные критерии, по которым такие параметры как время релаксации, коэффициент диффузии, являются менее значимы, чем основные рассмотренные: энергии расплывающихся атомов (ионов), энергии связи и атомные номера мишени и температура.

3. В диссертации и автореферате есть незначительные орфографические ошибки, несогласованность падежей, опечатки и пропущенные слова, что иногда искажает смысл отдельных предложений. Например, в автореферате на стр. 11 во втором абзаце: «выявлены механизмы возникновения многозначности перефокусированных по начальному углу» пропущено требуемое по смыслу слово «атомов» .

Приведенные замечания не влияют на общую оценку работы. 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.

Учитывая сказанное выше, 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,  
главный научный сотрудник лаборатории алмазной электроники  
Технологического института сверхтвердых и новых  
углеродных материалов

Буга Сергей Геннадьевич

16.05.2023 г.

Контактные данные:

тел. \_\_\_\_\_, e-mail: \_\_\_\_\_

Научная специальность: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

ФГБНУ «Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов». 108840, г. Москва, г. Троицк, ул. Центральная, д. 7а,  
тел: 8 (499) 400-62-25, доб. 208, email: [buga@tisnum.ru](mailto:buga@tisnum.ru)

Подпись С.Г. Буги удостоверяю

Нач. отдела к  
ФГБНУ ТИС

Т.В. Кропивянская

