

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу Баштової Анни Іванівни
“Моделювання просторової організації точкових дефектів в
опромінюваних системах”, яку подано на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук
зі спеціальності 01.04.02 – теоретична фізика

Дисертаційна робота А.І. Баштової присвячена розвитку теорії кластеризації дефектів в кристалічних системах, утворення в них дислокаційних петель і пор та фазового розшарування під дією сталого опромінювання.

В роботі вивчається широке коло питань, пов'язаних із впливом високоенергетичного опромінювання на внутрішню структуру кристалів і їх властивості. Оскільки під дією такого опромінювання дефектна структура кристалів суттєво змінюється з часом, її теоретичний опис в рамках єдиного підходу становить надзвичайно складну проблему. Тому в дисертації проведено дослідження дефектної структури на різних етапах еволюції з використанням найбільш адекватних моделей. Так, у другому розділі проведено дослідження процесів формування скупчення вакансій на основі швидкісної теорії, що враховує процеси дифузії і взаємодії точкових дефектів, а також динаміку їх стоків. Важливою особливістю запропонованого підходу є урахування флуктуацій динаміки дефектів і швидкості пошкоджень, що моделюються гаусівськими білими шумами.

В третьому розділі дисертації вивчаються процеси скупчення дефектів та процеси відбору структур у тонких металевих плівках. При цьому використовується досить загальна математична модель, яка дозволяє враховувати як нестійкості Грінфелда (тобто виникнення поверхневих модуляцій пружних напружень) при інтенсивному опроміненні плівок, так і коливання температури у приповерхневому шарі.

Вивчення впливу стоків на процеси утворення вакансійних пор у випадку стохастичної генерації дефектів шляхом опромінювання проведено у четвертому розділі. В рамках динамічної моделі, що базується на системі трьох зв'язаних рівнянь для концентрацій вакансій та міжвузлів, а також рівняння для радіусу пор, досліджено роль зовнішніх флуктуацій у формуванні критичного розміру пор і їх динаміки.

Нарешті, у п'ятому розділі дисертаційної роботи за допомогою кінетичної моделі вивчено явища радіаційно-індукованого розшарування у конденсованих бінарних системах. Зокрема, проведено аналіз стійкості бінарних розчинів, проаналізовано залежність структуроутворення від швидкості набору дози та

побудовано стохастичну модель фазового розшарування в бінарних системах.

Враховуючи зазначене вище, можна констатувати, що в дисертаційній роботі А.І. Баштової практично з єдиних позицій розглянуто комплекс важливих теоретичних проблем щодо впливу високоенергетичного опромінювання, швидкість набору дози якого носить стохастичний характер, на структуру кристалів. *Актуальність* цих проблем не викликає ніяких сумнівів. В цілому, результати роботи мають і очевидну *практичну цінність*, оскільки розвиток радіаційних технологій безпосередньо пов'язаний із всебічним вивченням радіаційних явищ у матеріалах, що використовуються в ядерних та термоядерних реакторах.

Отже, тема дисертаційної роботи А.І. Баштової є *актуальною*, в роботі отримані *нові* результати високого наукового рівня, *обґрунтованість* та *достовірність* яких зумовлені використанням апробованих моделей, надійних методів теоретичної фізики та чисельного моделювання. Результати дисертаційної роботи достатньо повно висвітлені в семи наукових статтях автора, які опубліковані у провідних фахових виданнях, що індексуються наукометричними базами Scopus та Web of Science, а також в семи тезах доповідей на міжнародних конференціях.

Із наукових результатів дисертаційної роботи А.І. Баштової найбільш вагомими, з моєї точки зору, є наступні:

- 1) процеси самоорганізації в системах точкових дефектів, що супроводжуються виникненням компактних кластерів, дислокаційних петель та пор, пов'язані з локальними деформаційними нестійкостями, просторовою взаємодією дефектів та флуктуаціями швидкості радіаційних пошкоджень;
- 2) флуктуації швидкості набору дози прискорюють просторовий перерозподіл дефектів у скупчень з нанометровим розміром і збільшують критичний радіус вакансійних пор;
- 3) процеси відбору структур при кластеризації вакансій у приповерхневих шарах тонких плівок відбуваються внаслідок взаємозв'язку між концентрацією дефектів і локальними змінами температури приповерхневого шару;
- 4) при збільшенні швидкості набору дози опромінення процес радіаційно-стимульованого випадіння фаз у бінарному твердому розчині за вакансійним механізмом трансформується у процес формування структур вакансій.

Обсяг, зміст та отримані в роботі результати відповідають вимогам до кандидатських дисертацій; зміст автореферату цілком відповідає основним положенням дисертації.

Разом з тим до дисертації є зауваження.

Зауваження 1. В роботі вплив флуктуацій швидкості набору дози P на процеси в опромінюваних системах вивчається у наближенні, коли $P = P_0 + \zeta(\mathbf{r}, t)$, де $\zeta(\mathbf{r}, t)$ – гаусівський білий шум. Таке наближення є корисним з математичної точки зору, оскільки в багатьох випадках дозволяє отримати аналітичні результати. В той же час, воно допускає існування від'ємних (*нефізичних*) значень швидкості набору дози, які можуть суттєво впливати на властивості опромінюваних систем. Тому, на мій погляд, теоретичний аналіз слід було б доповнити пошуком умов, при виконанні яких нефізичними флуктуаціями можна знехтувати.

Зауваження 2. Оскільки властивості опромінюваних систем залежать від температури, можна очікувати, що теплові флуктуації також відіграють важливу роль, особливо в еволюції цих систем. Хоча ці флуктуації неявно враховуються білим шумом $\zeta(\mathbf{r}, t)$, їх явне визначення (тобто визначення їх вкладу в інтенсивність білого шуму) дозволило б повністю описати температурні ефекти в даних системах.

Зауваження 3. Добре відомо, що у випадку мультиплікативних білих шумів поведінка систем може залежати від того, як саме інтерпретуються ці шуми, тобто яке обчислення стохастичних інтегралів (Іто, Стратоновича, Клімонтовича чи інше) використовується. З математичної точки зору допустимим є любий вибір інтерпретації. Але при використанні таких шумів для опису поведінки *фізичних* систем необхідно або обґрунтувати вибір їх інтерпретації, або довести (аналітично чи чисельно), що зі зміною інтерпретації поведінка систем *якісно* не змінюється. В дисертаційній же роботі мультиплікативні шуми інтерпретуються в сенсі Стратоновича без відповідного обґрунтування.

Зауваження 4. У четвертому розділі дисертації використовується наступний закон збереження: $\Delta_x(t) + q(t) = Qt^\alpha$, де $\Delta_x(t)$ – пересичення вакансій, $q(t)$ – об'єм пор, Q – ефективність зайняття вакансій, $\alpha (\geq 0)$ – показник росту пересичення вакансій. При цьому вибір правої частини закону збереження у вигляді $\sim t^\alpha$ аргументується постійно діючим опроміненням системи. Як гіпотеза, такий вибір мабуть має право на існування при скінченних t . Що ж стосується його використання при $t \rightarrow \infty$ (коли визначається, наприклад, асимптотична поведінка критичного радіусу пор), то, на мій погляд, в цьому випадку воно не є достатньо обґрунтованим. Причина полягає у тому, що в роботі розглядається просторова організація точкових дефектів в *кристалічних*

системах, тоді як стан систем, підданих опроміненню високоенергетичними частинками, не може залишатися кристалічним при $t \rightarrow \infty$.

Зауваження 5. Коректність проведеного в розділі 4.2. аналізу асимптотичної поведінки росту вакансійних пор викликає певні сумніви. Щоб пояснити суть проблеми в детерміністичному випадку, для наочності в таблиці наведено основні рівняння, які використовуються в теорії коалесценції Ліфшиця-Сльозова, і рівняння, які використані в дисертації для опису росту пор.

Теорія Ліфшиця-Сльозова (Ліфшиць, Пітаєвський, Т. 10)	Дисертаційна робота (розділ 4.2)
<p>Рівняння для радіуса зерна нової фази:</p> $\frac{d}{dt} a(\tilde{t}) = \frac{a_k^3(0)}{a(\tilde{t})} \left(\frac{1}{a_k(\tilde{t})} - \frac{1}{a(\tilde{t})} \right). \quad (1)$ $u(\tilde{t}) = \frac{a(\tilde{t})}{a_k(\tilde{t})}, \quad x(\tilde{t}) = \frac{a_k(\tilde{t})}{a_k(0)}, \quad \tau = 3 \ln x(\tilde{t})$ <p>В цих змінних рівняння (1) набуває вигляду:</p> $\frac{d}{d\tau} u(\tau) = f(u(\tau); \gamma(\tau)), \quad (2)$ <p>де</p> $f(u; \gamma) = \frac{\gamma}{3} \left(\frac{1}{u} - \frac{1}{u^2} \right) - \frac{u}{3},$ $\gamma(\tau) = \frac{d\tilde{t}}{x^2(\tilde{t}) dx(\tilde{t})}.$	<p>Рівняння для радіуса вакансійної пори</p> $\frac{d}{dt} R(t) = \frac{x_0 R_s}{vR(t)} \left(\frac{1}{R_c(t)} - \frac{1}{R(t)} \right) \quad (1^*)$ <p>у безрозмірному часі $\tilde{t} = \frac{x_0 R_s}{vR_c^3(0)} t$ має вид (1):</p> $\frac{d}{d\tilde{t}} R(\tilde{t}) = \frac{R_c^3(0)}{R(\tilde{t})} \left(\frac{1}{R_c(\tilde{t})} - \frac{1}{R(\tilde{t})} \right). \quad (2^*)$ <p>Оскільки (2*) тотожне (1), в змінних</p> $u(\tilde{t}) = \frac{R(\tilde{t})}{R_c(\tilde{t})}, \quad x(\tilde{t}) = \frac{R_c(\tilde{t})}{R_c(0)}, \quad \tau = 3 \ln x(\tilde{t})$ <p>рівняння (2*) співпадає з рівнянням (2).</p>
<p>Закон збереження розчиненої речовини:</p> $\Delta(\tilde{t}) + q(\tilde{t}) = Q \quad (3)$	<p>Модифікований закон збереження:</p> $\Delta_x(t) + q(t) = Qt^\alpha \quad (3^*)$
<p>Оскільки, згідно з (3), об'єм зерен $q(\tilde{t})$ є обмеженим при $\tilde{t} \rightarrow \infty$, функція $f(u; \gamma)$ в стаціонарному стані задовольняє умовам:</p> $f(u^*; \gamma^*) = 0, \quad \partial_u f(u^*; \gamma^*) = 0. \quad (4)$ <p>Із них випливає, що $u^* = 3/2$, $\gamma^* = 27/4$ і, як наслідок, $x(\tilde{t}) \sim (4\tilde{t}/9)^{1/3}$ ($\tilde{t} \rightarrow \infty$).</p>	<p>В дисертації для $u(\tilde{t}) = R(\tilde{t})/R_c(\tilde{t}) _{\beta=0}$ отримано рівняння</p> $\frac{d}{d\tau} u(\tau) = v(u(\tau); \chi(\tau)), \quad (4^*)$ <p>де</p> $v(u; \chi) = \frac{1+\beta}{u} - \frac{1}{u^2} - \chi u,$ <p>β – керуючий параметр.</p>

В дисертації приймається, що стаціонарні значення u і χ , тобто величини u^* і χ^* , визначаються за допомогою системи рівнянь $v(u^*; \chi^*) = 0$ і $\partial_u f(u^*; \chi^*) = 0$, подібних до (4). Але використання цих рівнянь у випадку закону збереження (3*) потребує більш ретельного аналізу, оскільки умова обмеженості функції $q(t)$ тепер не виконується.

Висловлені вище зауваження носять здебільшого характер побажань, які можуть бути враховані у подальшій роботі автора. Вони не ставлять під сумнів високий теоретичний рівень дисертаційної роботи і не знижують її загальну позитивну оцінку.

ВИСНОВОК

Таким чином, можна констатувати, що дисертація А.І. Баштової є самостійною і, в цілому, завершеною працею, яка вносить вагомий вклад в

розвиток теорії процесів структуроутворення ансамблю точкових дефектів у кристалічних системах, що знаходяться під дією сталого опромінення.

За всіма основними показниками, такими як актуальність теми дослідження, наукова новизна та значущість одержаних результатів, а також за повнотою їх викладення в опублікованих працях, дисертаційна робота “Моделювання просторової організації точкових дефектів в опромінюваних системах” задовольняє критеріям МОН України [пп. 9, 11, 12, 13 “Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника”, затвердженого постановою Кабміну України від 24.07.2013 р. № 567 зі змінами (окрім п. 3), що внесені до постанов Кабміну України, затвердженими його постановою від 12.09.2011 р. № 955] щодо дисертацій на здобуття наукового ступеня кандидата наук. З огляду на це вважаю, що автор дисертаційної роботи, Баштова Анна Іванівна, заслуговує на присудження їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика.

Офіційний опонент:

Професор кафедри електроніки, загальної та прикладної фізики Сумського державного університету МОН України, доктор фіз.-мат. наук, професор


С.І. Денисов

Підпис проф. Денисова С.І. засвідчую:

Вчений секретар

Сумського державного університету


А.І. Рубан

