

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

диссертационного совета Д 212.141.17 на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» Министерства образования и науки Российской Федерации по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 23 ноября 2016 г. № 22

О присуждении Широковой Екатерине Васильевне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Моделирование процессов возбуждения рентгеновского излучения при взаимодействии киловольтных электронов с конденсированным веществом» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите 31 августа 2016 года, протокол № 17, диссертационным советом Д 212.141.17 на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» Министерства образования и науки Российской Федерации, 105005, г. Москва, ул. 2-ая Бауманская, 5, приказ № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель Широкова Екатерина Васильевна 1983 года рождения.

В 2005 году соискатель окончила государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Калужский государственный педагогический университет им. К.Э. Циолковского», с 2009 года по 2012 год обучалась в аспирантуре в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского».

В настоящее время соискатель работает старшим преподавателем кафедры «Бизнес-информатика и информационные технологии» в Калужском филиале федерального государственного образовательного бюджетного учреждения высшего образования «Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации».

Диссертация выполнена на кафедре высшей математики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук Степович Михаил Адольфович, профессор, федеральное государственное бюджетное

образовательное учреждение высшего образования «Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского», профессор кафедры высшей математики.

Официальные оппоненты:

Заморянская Мария Владимировна – доктор физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, заведующий лабораторией диффузии и дефектообразования в полупроводниках;

Татаринцев Андрей Андреевич – кандидат физико-математических наук, Физический факультет федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», отделение радиофизики и электроники, старший научный сотрудник кафедры физической электроники дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов Российской академии наук (ИПТМ РАН), г. Черноголовка Московской области, в своем положительном заключении, подписанном Барбаненковым Михаилом Юрьевичем, доктором физико-математических наук, ведущим научным сотрудником, руководителем научного семинара «Рентгеновская оптика» и утвержденном Рощупкиным Дмитрием Валентиновичем, доктором физико-математических наук, временно исполняющим обязанности директора ИПТМ РАН, указала, что диссертационная работа Широковой Екатерины Васильевны является законченной научно-квалификационной работой, в которой на основе изучения физической природы зависимости рентгеновского излучения от химического состава конденсированного вещества, рассмотрения основных физических закономерностей взаимодействия пучка киловольтных электронов с мишенью предложен новый подход к количественному описанию рентгеновского характеристического излучения (РХИ), вышедшего из мишени. Новое выражение функции распределения РХИ по массовой толщине учитывает основные физические закономерности взаимодействия пучка киловольтных электронов с конденсированным веществом, а разработанные на ее основе матричные поправки на поглощение РХИ и обратное рассеяние электронов апробированы при решении задач количественного рентгеноспектрального микроанализа (КРСМА) для широкого круга элементов: от бора по уран – при энергиях пучка электронов от 4 до 30 кэВ.

Результаты диссертационного исследования Широковой Е.В. могут быть использованы на предприятиях, в научно-исследовательских центрах и институтах, деятельность которых связана с разработкой новых перспективных

материалов, диагностикой микрообластей различных материалов (таких как ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», ФГБУН Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, ФГБУН Геологический институт СО РАН, ФГБУН Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО РАН и др.).

Соискатель имеет 19 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 19 работ, общим объемом 7,82 п.л., из которых 3,95 п.л. принадлежат лично соискателю, и 2 свидетельства о регистрации программ в Фонде алгоритмов и программ Сибирского отделения РАН. В рецензируемых научных изданиях опубликованы 7 работ, из них 4 имеют переводные версии. Требования п.п. 11 и 13 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемые к публикации основных научных результатов диссертации, выполняются. Требования, установленные п. 14 действующего Положения о присуждении ученых степеней, соблюдаются. Сведения об опубликованных работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Михеев Н. Н., Степович М. А., Широкова Е. В. Функция распределения по глубине рентгеновского характеристического излучения при локальном электронно-зондовом анализе // Известия РАН. Серия физическая. 2010. Т. 74, № 7. С. 1043–1047. (0,55 п.л./0,15 п.л.).

2. Михеев Н. Н., Степович М. А., Широкова Е. В. Новый способ расчета матричных поправок в рентгеноспектральном микроанализе // Прикладная физика. 2012. № 2. С. 31–35. (0,47 п.л./0,20 п.л.).

3. Михеев Н. Н., Степович М. А., Широкова Е. В. Распределение средних потерь энергии пучка электронов по глубине образца: применение в задачах количественного рентгеноспектрального микроанализа // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2013. № 12. С. 84–89. (0,64 п.л. /0,05 п.л.).

4. Методика количественного рентгеноспектрального микроанализа с учетом матричных эффектов / Е. В. Широкова [и др.] // Перспективные материалы. 2014. № 2. С. 77–82. (0,58 п.л./0,12 п.л.).

На диссертацию и автореферат поступили отзывы от: **Рыжова В.Н.**, доктора физико-математических наук, заместителя директора по научной работе ФГБУН Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН; **Огнева Л.И.**, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника отдела теории плазмы БТИ КЯТК ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»; **Сухановой Т.Е.**, доктора физи-

ко-математических наук, заведующего лабораторией морфологии полимеров ФГБУН Институт высокомолекулярных соединений РАН; **Ефимченко В.С.**, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника лаборатории физики высоких давлений ФГБУН Институт физики твердого тела РАН; **Романова А.В.**, кандидата физико-математических наук, заместителя начальника отдела разработки аналитических систем АО «Витасофт»; **Морченко А.Т.**, кандидата физико-математических наук, доцента кафедры технологии материалов электроники ФГАОУ ВО Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»; **Мохова А.В.**, доктора геолого-минералогических наук, старшего научного сотрудника, заведующего лабораторией кристаллохимии минералов имени Н.В. Белова ФГБУН Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН; **Новикова Ю.А.**, доктора физико-математических наук, старшего научного сотрудника, главного научного сотрудника Центра естественнонаучных исследований ФГБУН Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН.

Все отзывы положительные. В качестве замечаний отмечено, что в автореферате отсутствует информация о возможной модификации разработанных моделей при исследовании образцов с низкой электрической проводимостью, в чем зачастую возникает потребность на практике (Морченко А.Т.); при проведении моделирования недостаточно использован аппарат теоретической физики, значительная часть работы опирается на имеющиеся эмпирические подходы к описанию рассматриваемых процессов. Хорошо было бы, если бы сравнение было проведено и с результатами, полученными недавно, в т.ч. и самим диссертантом (Рыжов В.Н.); недостаточно четко описаны преимущества предлагаемого подхода к вычислению поправок на матричные эффекты относительно существующих (Романов А.В.); имеется неточность в формулировке некоторых выражений, например, на стр. 12 следовало бы указать, какой конкретно лучший результат погрешности на исследованных системах получен автором в диссертационной работе. Для убедительности разработанного подхода логично было бы провести сравнение результатов погрешности при расчете матричных поправок изученных систем известными в литературе методами с результатами, полученными с помощью нового разработанного автором метода расчета. Как в новом аналитическом выражении распределения РХИ по массовой толщине φ (pz) ведется учет изменения величины тормозной способности для многокомпонентной системы в локальной микрообласти по глубине? На стр.1 автореферата сказано: «КРСМА позволяет определять содержания (правильно - содержание) элементов от Ве по U». Однако, далее по тексту: «от В по U» (стр. 2, 4, 13). Следует уточнить, какую нижнюю границу применимости имеет метод КРСМА.

Он применим для элементов с атомным номером более 4-х (бериллий) или 5-и (бор)? (Суханова Т.Е.).

В отзывах сделан вывод о том, что диссертационная работа Широковой Екатерины Васильевны отвечает требованиям, предъявляемым ВАК Минобрнауки РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Выбор официальных оппонентов обоснован тем, что официальные оппоненты являются компетентными учеными в области теоретических и экспериментальных исследований, связанных с рентгеноспектральным микроанализом гетероструктур (Заморянская М.В.) и в области комплексных исследований в растровой электронной микроскопии (Татаринцев А.А.). Выбор ведущей организации обусловлен тем, что ИПТМ РАН активно занимается фундаментальными, поисковыми и прикладными научными исследованиями в области физических основ рентгеновской оптики, разработкой методов рентгеновской спектроскопии и микроскопии.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана универсальная математическая модель физического процесса распределения РХИ $\varphi(\rho z)$ по массовой толщине ρz для широкого круга элементов (от В по U) с энергией пучка электронов 1-30 кэВ. Данное выражение учитывает основные физические параметры объекта исследования, влияющие на область формирования РХИ по глубине, а именно: атомный номер, атомный вес, коэффициент обратного рассеяния электронов пучка, плотность вещества, пробег первичных электронов, транспортный пробег первичных электронов, наиболее вероятный пробег электронов пучка, сечения упругого и неупругого рассеяния электронов в образце, средний потенциал ионизации и первичную энергию пучка электронов. Новая модель позволяет учитывать следующие физические явления, происходящие при взаимодействии изучаемого образца с пучком электронов: наличие обратно рассеянных первичных электронов, влияние неупругого рассеяния электронов пучка на распределение интенсивности РХИ в образцах, пространственную симметрию формирования РХИ многократно рассеянными электронами;

предложен единый подход к расчету поправок для широкого диапазона элементов от В по U для КРСМА. В рамках данного подхода, на основе универсального выражения функции распределения РХИ по массовой толщине $\varphi(\rho z)$, были получены выражения для матричной поправки на поглощение РХИ F_A и для обратного рассеяния первичных электронов F_B ;

доказана перспективность использования новых матричных поправок в КРСМА;

введены новые модельные представления количественного описания РХИ по массовой толщине образца.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что: **доказано**, что новое выражение $\varphi(\rho z)$ с точностью, достаточной для практических приложений, описывает распределение РХИ по массовой толщине при взаимодействии пучка электронов с конденсированным веществом для широкого круга элементов;

применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использованы разработанная в ней функция $\varphi(\rho z)$ и модели новых матричных поправок (на поглощение РХИ и обратное рассеяние первичных электронов в конденсированном веществе) для исследования возможности использования новых поправок в КРСМА;

изложены результаты исследования, характеризующие оценку точности новых выражений, представленных в работе;

раскрыты особенности распределения РХИ в образце, генерированного теми электронами пучка, которые испытали многократное рассеяние в образце;

изучена возможность применения новых матричных поправок на поглощение РХИ и обратное рассеяние в КРСМА для следующих составов: Si-N, U-Fe, Cu-Ni, Au-Cu, Ti-B, Ta-B, W-C, Mo-B, Fe-N, Al-Fe, Fe-C, Al-B, U-C, Ag-Au, Mg-Al, а также для чистых элементов: Al, Cu, Au, Ti;

проведена модернизация моделей матричных поправок на поглощение РХИ и торможение электронов в веществе, входящие в классическую ZAF-коррекцию (Z – атомный номер «Atomic number», A – поглощение «Absorption» и F – флуоресценция «Fluorescence»).

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработаны и зарегистрированы в Фонде алгоритмов и программ Сибирского отделения РАН: программа, реализующая расчет функции РХИ по массовой толщине при локальном электронно-зондовом анализе материала (№ PR13027), и программа, реализующая решение прямой задачи количественного рентгеноспектрального микроанализа с использованием новых аналитических выражений для матричных поправок (№ PR14005);

определены перспективы применения новых матричных поправок;

создана методика расчета концентрации анализируемого элемента с помощью новых аналитических выражений для матричных поправок;

представлены результаты количественной оценки новых матричных поправок и функции $\varphi(\rho z)$.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

все теоретические положения и полученные результаты моделирования со-

гласуются с опубликованными теоретическими и экспериментальными данными, зарекомендовавшими себя в научном мире как наиболее достоверные; **идеи** базируются на обобщении большого количества литературных данных и классического представления взаимодействия киловольтных электронов с конденсированным веществом;

использовано сравнение полученных данных с экспериментальными данными других авторов;

установлено количественное совпадение полученных в работе результатов (в пределах разброса погрешности измерения) с независимыми экспериментальными данными (Pouchou J.L. and Pichoir F., Castaing R. and Henoc J., Descamps J., Ziebold T.O. and Ogilvie R.E., Reed S.J.B., Vignes A. and Dez G. et al.);

использованы программа, реализующая компьютерные методы расчета значений математических выражений, методики расчета матричных поправок ZAF – коррекции программы CITZAF.

Личный вклад соискателя состоит в: разработке представленных в диссертации моделей и их анализе, в разработке алгоритмов и программ для реализации этих моделей, в получении оценок погрешностей полученных моделей в сравнении с экспериментальными данными, в анализе и обобщении полученных результатов.

Диссертационная работа соответствует пунктам 1, 6 паспорта научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертационная работа Широковой Екатерины Васильевны «Моделирование процессов возбуждения рентгеновского излучения при взаимодействии киловольтных электронов с конденсированным веществом» соответствует критериям, установленным п.п. 9 и 10 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. Она является самостоятельной завершенной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение важной для физики конденсированного состояния научной задачи, связанной с установлением физических закономерностей взаимодействия киловольтных электронов с конденсированным веществом. Диссертация Широковой Е.В. обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, и свидетельствует о личном вкладе автора в науку.

На заседании 23 ноября 2016 года диссертационный совет принял решение присудить Широковой Е.В. ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 17 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 21 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 18, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель
диссертационного совета



Коржавый Алексей Пантелеевич

Ученый секретарь
диссертационного совета



Лоскутов Сергей Александрович

Дата оформления Заключения 23 ноября 2016 года