

Отзыв

на автореферат диссертационной работы

Ивана Камилевича Гайнуллина

**«Трехмерный неадиабатический подход
к расчетно-теоретическому описанию
электронного обмена ионных пучков
с металлическими поверхностями»,**

представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальностям 1.3.5. Физическая электроника и 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

В диссертационной работе И. К. Гайнуллина изучается электронный обмен ионов и атомов с металлическими поверхностями. Данная тематика актуальна для исследования состава поверхности твердых тел методом рассеяния медленных ионов и разработки источников отрицательных ионов в интересах термоядерного синтеза.

В работе усовершенствована физическая модель формирования конечного зарядового состояния атомной частицы и дана методика трехмерного моделирования электронного обмена с учетом атомной структуры поверхности. Также в работе предложена и апробирована новая численная схема и, на ее основе, создан комплекс программ для моделирования электронного обмена атомных частиц с металлическими поверхностями. Физические результаты, полученные в работе, хорошо согласуются с данными эксперимента. Изучены особенности электронного обмена, проявляющиеся при трехмерном рассмотрении процесса. Впервые была продемонстрирована анизотропия распространения переходящего электрона вдоль кристаллической поверхности. На основе эффекта анизотропии дано теоретическое объяснение зависимости вероятности электронного обмена от азимутального угла при скользящем рассеянии ионных пучков. Подробно исследованы особенности электронного обмена атомных частиц с наносистемами. Показано соответствие результатов моделирования данным сканирующей туннельной микроскопии. Объяснена экспериментальная закономерность увеличения вероятности нейтрализации ионов на нанокластерах золота при уменьшении размера кластера. Основные результаты представлены в профильных журналах, включая Успехи Физических Наук, Computer Physics Communications, Physical Review, Математическое Моделирование. Основываясь на содержании

автореферата и публикаций автора, можно заключить, что диссертационная работа представляет собой законченное научное исследование и выполнена на высоком профессиональном уровне. Усовершенствованная физическая модель адекватно описывает эксперименты. Применяемая математическая модель и разработанные численные методы соответствуют физической модели. Предложенный комплекс программ демонстрирует высокую производительность и представляет самостоятельный интерес.

Следует отметить что, непосредственно в тексте автореферата гибридная численная схема и высокопроизводительный комплекс программ для моделирования электронного обмена описаны не достаточно подробно. Сделанное замечание, однако, не снижает общую высокую оценку работы.

Диссертационная работа соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание степени докторской степени, сформулированным в Положении о присуждении ученых степеней МГУ им. М. В. Ломоносова, а ее автор, Иван Камилевич Гайнуллин, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальностям 1.3.5. Физическая электроника и 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Директор ИПМ им. М. В. Келдыша РАН,
член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических наук,
профессор

А. И. Аптекарев

Федеральное государственное учреждение «Федеральный
исследовательский центр Институт прикладной математики
им. М. В. Келдыша Российской академии наук»

125047 Москва, Миусская пл., д. 4, ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

тел.: +7 499 978-13-14

факс: +7 499 972-07-37

e-mail: aptekaa@keldysh.ru