

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мусина Артема Игоревича «Исследование механизмов распыления монокристаллов методами молекулярной динамики»

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности

1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Проблема ионного распыления, которой посвящена рассматриваемая диссертация, имеет давнюю историю, но до сих пор является актуальной в связи с ее практическим значением для диагностики твердых тел, особенно для изучения физики и химии поверхности. Между тем, ряд принципиально важных вопросов теории распыления твердых тел остается не решенным, и только с повышением компьютерных мощностей, используемых в современных методах численного моделирования, возникла реальная перспектива их корректного решения. С этой точки зрения тема диссертации А.И. Мусина безусловно является актуальной.

Судя по автореферату диссертации, автору удалось успешно справиться с поставленными целями и задачами, получив ряд новых важных результатов, которые должны заинтересовать научное сообщество, а также специалистов, занимающихся определением состава и структуры кристаллических материалов.

Среди наиболее интересных результатов хочу отметить то, что расчеты, выполненные методом молекулярной динамики, позволили установить определяющее значение поверхностных явлений для наблюдаемых закономерностей угловых и энергетических распределений распыленных атомов. Важным результатом является также установление того факта, что из данных масс-спектрометрии распыленных атомов в заряженном и нейтральном состояниях можно получить информацию не только о составе, но и о структуре поверхности.

Вместе с тем, считаю нужным отметить следующие недостатки.

1. В разделе «Степень достоверности и апробация результатов» автором отмечена только апробация (хотя достоверность следует из полученных результатов).

2. Не ясно, почему в упрощенном варианте молекулярного моделирования автор выбрал кристалл из 20 атомов. Можно ли для получения достаточно адекватных результатов ограничиться меньшим числом атомов? Или, наоборот, требуется использовать большее количество? Эти вопросы были бы сняты в случае варьирования числа атомов модельного кристалла при расчетах.

3. Требует более подробного обсуждения вопрос об адекватном выборе вида потенциала межатомного взаимодействия и его параметризации. Насколько чувствительны результаты молекулярно-динамического расчета к вариации параметров потенциала и в каких пределах?

Сделанные замечания носят скорее характер пожеланий и не снижают высокую оценку диссертации. Диссертация является законченным научным исследованием, свидетельствующим о высокой квалификации автора. Она удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Мусин Артем Игоревич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник НИФТИ

ННГУ им. Н.И. Лобачевского,

доктор физико-математических наук, профессор

Тетельбаум Давид Исаакович

«11» 22.02 2023 г.

Контактная информация: 603022, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23, корп.3
Научно-исследовательский физико-технический институт федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» (НИФТИ ННГУ); e-mail: tetelbaum@phys.unn.ru