

ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертацию *Мусина Артема Игоревича*

«Исследование механизмов распыления монокристаллов методами молекулярной динамики»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния

Мусин А.И. поступил в аспирантуру Московского государственного областного университета в 2018 г. сразу после окончания магистратуры физического факультета МГУ им М.В. Ломоносова. В настоящее время является ассистентом кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Московского государственного областного педагогического университета.

Диссертация Мусина А.И. посвящена механизмам ионного распыления монокристаллов. Понимание этих механизмов необходимо для широкого спектра прикладных задач, самым значительным применением является элементный и структурный анализ поверхности путем регистрации вторичных частиц, возникающих в процессе распыления. Одной из главных проблем на этом пути является обратное преобразование распределения вторичных частиц. Эта задача является весьма сложной из-за сильного влияния поверхности на эмитируемые атомы. Решение задачи обратного преобразования распределения распыленных атомов по углам и энергии наблюдения в будущем поможет раскрыть весь потенциал таких методов анализа поверхности, как SNMS и SIMS.

В своей работе Мусин А.И. исследовал механизмы распыления монокристаллов на финальной стадии распыления – эмиссии с поверхности, с помощью методов молекулярной динамики. Исследования в диссертации проводились в рамках двух моделей: 20 атомов поверхности (без падения ионов) и полномасштабной МД-модели (с падением ионов).

Исследования по теме диссертации выполнялись Мусиным А.И. в течение многих лет, с момента распределения на кафедру общей физики в 2014 г., когда он стал активно участвовать в работе лаборатории «Теоретические исследования процессов на поверхности кристаллов» и стал руководителем счетных проектов на суперкомпьютерах СКЦ МГУ.

Диссертация состоит из обзора (глава 1) и трех оригинальных частей (главы 2-4).

В первой оригинальной части Мусин А.И. с помощью модели 20 атомов провел исследование эффекта перефокусировки атомов при эмиссии с поверхности грани (001) Ni. Построенные угловые распределения эмитированных атомов имеют особенности, схожие с экспериментальными распределениями. Двумерные распределения с разрешением одновременно по полярному углу и энергии наблюдения имеют четкую структуру, которая позволяет объяснить эффект немонотонного сдвига максимума энергоспектра при увеличении полярного угла наблюдения. В двумерном распределении для несимметричного относительно направления $\langle 100 \rangle$ интервала азимутального угла впервые были найдены отдельные хребты – максимумы распределений для фокусированных и перефокусированных атомов. Автором было доказано, что перефокусированные атомы на 100% формируют наблюдаемый сигнал в окрестности максимума. Следовательно, в экспериментах с разрешением по углам и энергии принципиально возможно выделение отдельного сигнала перефокусированных атомов.

Во второй оригинальной части Мусин А.И. исследовал влияние изменения параметров мишени, таких как атомный номер, энергия связи и магнитное состояние, на сдвиги максимумов фокусированных и перефокусированных атомов. Было найдено, что увеличение атомного номера, из-за увеличения жесткости потенциала межатомного взаимодействия, приводит к отклонению эмитируемых атомов в сторону нормали. В распределениях по энергии это приводит к сдвигу максимумов фокусированных и перефокусированных атомов в сторону меньших энергий. Увеличение энергии связи мишени приводит к сдвигу максимумов в сторону больших энергий. Фазовый переход из парамагнитного в ферромагнитное состояние также приводит к сдвигу максимумов в сторону больших энергий из-за увеличения энергии связи и эффекта спинового обменного взаимодействия.

В третьей оригинальной части Мусин А.И. проводил вычисления по полномасштабной МД-модели, наиболее приближенной к реальному эксперименту, в которой атомный блок монокристалла (001) Ni бомбардировался ионами Ag с энергией 200 эВ. Был рассчитан интегральный коэффициент распыления. Путем анализа начальных углов и энергии вылетающих атомов (вблизи поверхности) было доказано слабое влияние каскадных механизмов на формирование пятен Венера. В несимметричных относительно направления $\langle 100 \rangle$ интервалах азимутального угла в полномасштабной МД-модели также наблюдаются перефокусированные атомы. Подобно модели 20 атомов, в двумерном распределении по полярному углу и энергии наблюдаются отдельные хребты, что подтверждает теоретическую возможность регистрации перефокусированных атомов в эксперименте с хорошим угловым и энергетическим разрешением.

Все результаты, полученные в диссертации Мусина А.И., являются новыми и важными. Они опубликованы в рецензируемых научных журналах, таких как *Известия РАН. Серия физическая* и *Поверхность*, все статьи были изданы в переводных версиях на английском языке. Результаты представлялись на Международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью», Международной Тулиновской конференции «Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами», Всероссийской (впоследствии Международной) школе-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века».

В процессе обучения в МГУ, а затем в аспирантуре Мусин А.И. проявил себя как творчески мыслящий физик-исследователь и как программист. Он может сформулировать цель исследования, самостоятельно провести моделирование, обработать данные и проанализировать результаты. Таким образом, Мусин А.И. является квалифицированным специалистом, способным к постановке и решению научной задачи. Благодаря ему были созданы счетные проекты на суперкомпьютерах МГУ, один из них в коллаборации с зарубежными учеными, руководителем которых он является и по сей день. Мусин А.И. ориентируется в научной литературе по своей тематике, в методах моделирования, умеет ярко и доступно представить свои научные результаты, что и проделывал много раз на научных конференциях.

Таким образом, можно заключить, что диссертационная работа Мусина А.И. выполнена на высоком научном уровне, удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и может быть рекомендована к защите по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Доцент кафедры общей физики
физического факультета
МГУ им. М.В. Ломоносова
к.ф.-м.н.

В.Н. Самойлов

Подпись к.ф.-м.н. В.Н. Самойлова удостоверяю:
Ученый секретарь Ученого Совета
физического факультета
МГУ им. М.В. Ломоносова
профессор

В.А. Караваев