

Заключение диссертационного совета МГУ.013.7
по диссертации на соискание ученой степени доктора наук

Решение диссертационного совета от 15 июня 2023 г., № 3

О присуждении Гайнуллину Ивану Камилевичу, гражданину РФ, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с металлическими поверхностями» по специальностям 1.3.5. Физическая электроника и 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ принята к защите диссертационным советом 23 марта 2023 г., протокол № 3П.

Соискатель Гайнуллин Иван Камилевич, 1979 года рождения, диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Расчет электронного обмена между атомной частицей и системами пониженной размерности» защитил в 2005 году, в диссертационном совете на базе Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Соискатель работает доцентом кафедры физической электроники Физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Диссертация выполнена на кафедре физической электроники Физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Официальные оппоненты:

Зиновьев Александр Николаевич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией, лаборатория атомных столкновений в твердых телах, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,

Плохотников Константин Эдуардович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Кафедра математического моделирования и информатики, Физический факультет, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»,

Тетельбаум Давид Исаакович, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник, отдел твердотельной электроники и оптоэлектроники, лаборатория физики

и технологии тонких пленок, Научно-исследовательский физико-технический институт федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Нижегородский государственный университет им.Н.И. Лобачевского" дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 95 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 52 работы, из них 33 статьи, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ.

1. Гайнуллин И. К., Горюнов Д. Г., Усман Е. Ю., Уразгильдин И. Ф. Квантово-размерный эффект при резонансном электронном обмене между ионом и тонкими металлическими пленками // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2002. – Т. 66. – С. 1004–1007. [IF: RSCI – 0,583; Авт. вклад - 0,3 из 0,5 ПЛ]
2. Gainullin I. K., Usman E. Yu., Song Y. W., Urazgil'din I. F. Electron-exchange processes between hydrogen negative ion and thin aluminum films // Vacuum. — 2003. – V. 72. – P. 263. [IF: WoS – 4,11; Авт. вклад - 0,3 из 0,5 ПЛ]
3. Гайнуллин И. К., Усман Е. Ю., Сонг Ё. В., Уразгильдин И. Ф. Резонансная перезарядка при взаимодействии иона H- и тонкой металлической пленки // Известия Российской академии наук. Серия физическая. — 2004. — Т. 68. — С. 351. [IF: RSCI – 0,583; Авт. вклад - 0,3 из 0,5 ПЛ]
4. Gainullin I. K., Usman E. Y., Urazgil'din I. F. Electron exchange between hydrogen ion and thin disk: Quantum-size effect observation // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 2005. – V. 232. – P. 22. [IF: WoS – 1,279; Авт. вклад - 0,3 из 0,5 ПЛ]
5. Гайнуллин И. К., Сатарин К. К., Усман Е. Ю., Уразгильдин И. Ф. Особенности электронного обмена между ионом и тонким металлическим диском. Наблюдение квантово-размерного эффекта // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2005. — № 1. — С. 39–42. [IF: RSCI – 0,863; Авт. вклад - 0,3 из 0,5 ПЛ]
6. Гайнуллин И. К., Уразгильдин И. Ф. Особенности электронного обмена при столкновении иона H- с тонким металлическим диском // Известия Российской академии наук. Серия физическая. — 2006. — Т. 70. — С. 897–901. [IF: RSCI – 0,583; Авт. вклад - 0,3 из 0,5 ПЛ]
7. Gainullin I. K., Urazgildin I. F. Quantum size effect in the electron exchange between a H⁻ ion and a thin metal disk // Physical Review B. – 2006. – V. 74. – N. 20. – P. 205403. [IF: WoS – 3,908; Авт. вклад - 0,4 из 0,6 ПЛ]
8. Сатарин К. К., Шестаков Д. К., Гайнуллин И. К., Уразгильдин И. Ф. Переход электрона вдоль атомной цепочки // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2007. — Т. 7. — С. 98–101. [IF: RSCI – 0,863; Авт. вклад - 0,2 из 0,5 ПЛ]
9. Магунов А. А., Гайнуллин И. К., Уразгильдин И. Ф. Особенности электронного обмена

при столкновении отрицательного иона водорода с кластером атомов алюминия // Известия Российской академии наук. Серия физическая. — 2007. — Т. 71, № 10, — С. 1525. [IF: RSCI – 0,583; Авт. вклад - 0,3 из 0,5 ПЛ]

10. Магунов А. А., Шестаков Д. К., Гайнуллин И. К., Уразгильдин И. Ф. Квантово-размерный эффект при электронном обмене между отрицательным ионом водорода и кластером атомов алюминия // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2008. — № 9. — С. 93–96. [IF: RSCI – 0,863; Авт. вклад - 0,2 из 0,5 ПЛ]

11. Шестаков Д. К., Гайнуллин И. К., Уразгильдин И. Ф. Особенности электронного обмена при скользящем рассеянии ионов H⁻ на тонком алюминиевом диске // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2009. — № 1. — С. 38–42. [IF: RSCI – 0,863; Авт. вклад - 0,2 из 0,5 ПЛ]

12. Shestakov D. K., Polivnikova T. Yu., Gainullin I. K., Urazgildin I. F. Electron exchange between an H⁻ ion and a spherical cluster of aluminum atoms // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 2009. — V. 267. — P. 2596. [IF: WoS – 1,279; Авт. вклад - 0,2 из 0,5 ПЛ]

13. Аманбаев Е. Р., Шестаков Д. К., Гайнуллин И. К. Особенности электронного обмена при скользящем рассеянии ионов водорода на шаровом кластере атомов алюминия // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2009. — № 11. — С. 23–26. [IF: RSCI – 0,863; Авт. вклад - 0,3 из 0,5 ПЛ]

14. Сатарин К. К., Аманбаев Е. Р., Гайнуллин И. К. Особенности электронного транспорта вдоль неоднородных атомных цепочек // Известия Российской академии наук. Серия физическая. — 2010. — Т. 74. — С. 167–171. [IF: RSCI – 0,583; Авт. вклад - 0,3 из 0,5 ПЛ]

15. Поливникова Т. Н., Сатарин К. К., Хайдаров А. А., Гайнуллин И. К. Особенности электронного обмена отрицательного иона водорода с атомными цепочками // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2010. — № 9. — С. 105–108. [IF: RSCI – 0,863; Авт. вклад - 0,3 из 0,5 ПЛ]

16. Amanbaev E. R., Gainullin I. K., Zyкова E. Y., Urazgildin I. F. Electron exchange between atomic particle and thin metal island films // Thin Solid Films. — 2011. — V. 519. — P. 4737. [IF: WoS – 2,358; Авт. вклад - 0,3 из 0,6 ПЛ]

17. Аманбаев Е. Р., Зыкова Е. Ю., Клавсюк А.Л., Поливникова Т. Н., Хайдаров А. А., Гайнуллин И. К. Расчет электронной структуры металлических островковых пленок // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2011. — № 7. — С. 70. [IF: RSCI – 0,863; Авт. вклад - 0,3 из 0,5 ПЛ]

18. Gainullin I. K., Sonkin M. A. High-performance parallel solver for 3D time-dependent Schrodinger equation for large-scale nanosystems // Computer Physics Communications. — 2015. — V. 188. — P. 68-75. [IF: WoS – 4,717; Авт. вклад - 0,9 из 1,0 ПЛ]

19. Gainullin I. K., Sonkin M. A. Three-dimensional effects in resonant charge transfer between atomic particles and nanosystems // *Physical Review A*. – 2015. – V. 92. – P. 022710. [IF: WoS – 2,971; Авт. вклад - 1,9 из 2,0 ПЛ]
20. Gainullin I. K. High-performance GPU parallel solver for 3D modeling of electron transfer during ion–surface interaction // *Computer Physics Communications*. – 2017. – V. 210. – P. 72. [IF: WoS – 4,717; Авт. вклад - 0,9 из 0,9 ПЛ]
21. Gainullin I. K. Three-dimensional modeling of resonant charge transfer between ion beams and metallic surfaces // *Physical Review A*. – 2017. – V. 95. – N. 5. – P. 052705. [IF: WoS – 2,971; Авт. вклад - 2,0 из 2,0 ПЛ]
22. Поддельская О. В., Зыкова Е. Ю., Нищак О. Ю., Стрелецкий О. А., Гайнуллин И. К. Влияние геометрических размеров наносистемы на основные характеристики зарядового обмена с отрицательным ионом // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. — 2018. — № 6. — С. 74-82. [IF: RSCI – 0,863; Авт. вклад - 0,5 из 0,9 ПЛ]
23. Gainullin I. K. Towards quantitative LEIS with alkali metal ions // *Surface Science*. – 2018. – V. 677. – P. 324-332. [IF: WoS – 2,07; Авт. вклад - 1,1 из 1,1 ПЛ]
24. Гайнуллин И. К., Сонькин М. А. Трехмерное моделирование зарядового обмена ионов с металлическими поверхностями // *Математическое моделирование*. – 2019. – Т. 31. – С. 95. [IF: RSCI – 0,613; Авт. вклад - 1,9 из 2,0 ПЛ]
25. Gainullin I. K. Theoretical explanation of strong enhancement of alkali metal ion neutralization on Au nanoclusters // *Surface Science*. – 2019. – V. 681. – P. 158-165. [IF: WoS – 2,07; Авт. вклад - 1,0 из 1,0 ПЛ]
26. Гайнуллин И. К. Особенности электронного обмена ионов с металлическими нанокластерами // *Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия*. – 2019. – №. 5. – С. 33. [IF: WoS – 0,536; Авт. вклад - 1,0 из 1,0 ПЛ]
27. Gainullin I. K. Theoretical investigation of the ion-induced polarization-charge influence on resonant charge transfer // *Physical Review A*. – 2019. – V. 100. – P. 032712. [IF: WoS – 2,971; Авт. вклад - 1,1 из 1,1 ПЛ]
28. Александров А.Ф., Гайнуллин И. К., Сонькин М.А. Некоторые особенности электронного обмена ионов с поверхностью металлов, обусловленные ее атомной структурой // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. — 2020. — № 8. — С. 42-49. [IF: RSCI – 0,863; Авт. вклад - 0,8 из 0,9 ПЛ]
29. Liu P., Yin L., Zhang Z., Ding B., Shi Y., Li Y., Zhang X., Song X., Guo Y., Chen L., Chen X., Gainullin I. K., Esaulov V.A. Anomalous neutralization characteristics in Na⁺ neutralization on Al(111) surfaces // *Physical Review A*. – 2020. – V. 101. – P. 032706. [IF: WoS – 2,971; Авт. вклад - 0,2 из 1,0 ПЛ]
30. Gainullin I. K., Dudnikov V. G. Theoretical investigation of the negative ionization of

hydrogen particles on metal surfaces with low work function // *Plasma Research Express*. – 2020. – V. 2. – P. 045007. [IF: Scopus – N/D; Авт. вклад - 1,3 из 1,5 ПЛ]

31. Гайнуллин И. К. Резонансный электронный обмен при рассеянии ионов на металлических поверхностях // *Успехи физических наук*. – 2020. – Т. 190. – №. 9 – С. 950. [IF: WoS – 3,361; RSCI – 2,090; Авт. вклад - 2,6 из 2,6 ПЛ]

32. Гайнуллин И. К., Зыкова Е. Ю., Дудников В. Г. Теоретическое изучение вероятности отрицательной ионизации водорода, дейтерия, трития и мюония на металлических поверхностях // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. — 2022. — Т. 86. — С. 673–680. [IF: RSCI – 0,583; Авт. вклад - 0,7 из 0,9 ПЛ]

33. Shi Y., Yin L., Ding B., Song X., Zhang L., Guo Y., Chen L., Chen X., Melkozerova J. A., Klavsyuk A. L., Gainullin I.K., Esaulov V.A. Thickness-dependent neutralization of low-energy alkali-metal ions scattering on graphene // *Physical Review A*. – 2022. – V. 105. – P. 042807. [IF: WoS – 2,971; Авт. вклад - 0,2 из 0,9 ПЛ]

На диссертацию и автореферат поступило 6 дополнительных отзывов, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался тем, что они являются специалистами в области взаимодействия ионов с поверхностью, физической электроники и математического моделирования и имеют публикации по указанной тематике.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение – создание трехмерного неадиабатического подхода к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с поверхностью твердых тел с учетом их неоднородной электронной и атомной структуры, что в примерно 2,5 раза повысило точность расчетов по сравнению с ранее применяемыми адиабатическими подходами и позволило количественно (с точностью 10%) описывать экспериментальные данные.

Разработанный трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с металлическими поверхностями имеет практическое значение для анализа элементного состава поверхности с помощью рассеяния медленных ионов и повышения эффективности источников отрицательных ионов.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Усовершенствованная физическая модель формирования конечного зарядового состояния атомной частицы учитывает неоднородный рельеф поверхности и направление

скорости иона в трехмерном пространстве, что позволило объяснить ряд важных закономерностей, в том числе:

- существенное увеличение вероятности нейтрализации положительных ионов на металлических нанокластерах при уменьшении размера нанокластеров до 1 нм (с 3 до 50% при нейтрализации Na^+ на кластерах Au), которое происходит из-за ослабления взаимодействия с зарядом изображения.

- немонотонную энергетическую зависимость вероятности нейтрализации ионов щелочных металлов при рассеянии на поверхностях с большой работой выхода, которая возникает из-за конкуренции между увеличением времени взаимодействия иона с поверхностью и уменьшением расстояния, с которого начинается нейтрализация иона.

2. Построенная физическая методика трехмерного моделирования электронного обмена между атомными частицами и металлическими поверхностями за счет применения теории функционала плотности и трехмерных вычислений позволяет изучать динамику электронного перехода без применения адиабатического приближения, с детализацией на атомном уровне и учетом неоднородности поверхности. Впервые был обнаружен важный трехмерный эффект - анизотропия распространения электрона; показано, что электрон, туннелирующий из атомной частицы, распространяется вдоль направления $\langle 001 \rangle$ поверхности Cu(110) в примерно 2 раза быстрее, чем вдоль ортогонального направления.

3. За счет использования разработанной гибридной численной схемы и эффективного распараллеливания расчетов на графических вычислителях, производительность и масштабируемость комплекса программ для моделирования электронного обмена минимум в 3 раза превышают приведенные автором аналоги, что позволило впервые реализовать трехмерное моделирование электронного обмена между движущейся атомной частицей и поверхностью в большой расчетной области (до 10^5 нм^3).

4. Физическая методика трехмерного моделирования позволила впервые теоретически изучить и объяснить ряд новых физических эффектов, включая:

- квантово-размерный эффект, заключающийся в немонотонной зависимости эффективности туннелирования электрона в наносистему от радиуса островковой пленки или кластера атомов. Квантово-размерный эффект объясняется энергетическим резонансом, при возникновении которого эффективность электронного обмена с наносистемами увеличивается до 5 раз по сравнению со случаем макроскопического образца.

- зависимость вероятности электронного обмена от азимутального направления ионного пучка, экспериментально обнаруженную при скользящем рассеянии ионов водорода на поверхности Cu(110). Азимутальная зависимость объясняется анизотропией распространения электрона, вследствие чего вероятность подхвата электрона будет зависеть от азимутального направления движения атомной частицы.

На заседании 15 июня 2023 г. диссертационный совет принял решение присудить Гайнуллину И.К. ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 24 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.3.5. Физическая электроника и 5 докторов наук по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета и 5 человек дополнительно введенных на разовую защиту, проголосовали: за присуждение ученой степени – 19, против – 3, недействительных бюллетеней – 2.

Председатель

диссертационного совета,

профессор

Федянин А.А.

Ученый секретарь

диссертационного совета,

доцент

Карташов И.Н.