

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Гайнуллина Ивана Камилевича «Трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с металлическими поверхностями» 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

Диссертация И.К. Гайнуллина посвящена разработке, детальному анализу особенностей, применению и верификации нового подхода к теоретическому описанию и моделированию процесса электронного обмена ионов, рассеянных от поверхности металлов. Оригинальность данного подхода состоит в учете неадиабатичности процесса электронного обмена и его трехмерном моделировании вместо ранее применявшихся двумерных методов моделирования.

Тема диссертационной работы и полученные в ней результаты обладают несомненной **актуальностью**. Они чрезвычайно важны для специалистов, использующих метод рассеяния медленных ионов (РМИ) с целью диагностики поверхности. Значение этого метода существенно возрастает по мере все большей миниатюризации размеров элементов электронной техники. При этом роль процессов, протекающих непосредственно на поверхности и/или в нескольких приповерхностных атомных слоях матрицы, а также в нанокластерах, становится определяющей, и это обстоятельство влияет на интерпретацию данных, получаемых методом РМИ. В диссертации убедительно показано, что неучет неадиабатичности и особенностей, связанных с трехмерностью, может приводить к существенным погрешностям.

Результаты диссертации важны и для ряда других проблем, таких как создание эффективных источников отрицательных ионов, газовых детекторов, катализаторов химических реакций и т.д. С фундаментальной точки зрения эти результаты актуальны для дальнейшего развития физики и химии поверхности и методики компьютерного моделирования соответствующих физико-химических процессов.

Целью работы является совершенствование расчетно-теоретических моделей и создание программных средств для трехмерного неадиабатического моделирования электронного обмена ионов с поверхностью. В процессе достижения этой цели были получены следующие основные **новые оригинальные результаты**:

- разработана физическая модель формирования конечного зарядового состояния рассеянной атомной частицы с учетом ее скорости и рельефа поверхности;

- разработана методика трехмерного моделирования электронного обмена, создана гибридная численная схема расчета и высокопроизводительный комплекс программ для моделирования;

- путем моделирования установлен и изучен эффект анизотропии распространения электрона вдоль поверхности кристалла, что позволило объяснить наблюдаемую экспериментально азимутальную зависимость процесса электронного обмена;

- установлен и количественно изучен эффект усиления степени нейтрализации при взаимодействии ионов на нанокластерах, связанный с фундаментальным фактором – взаимодействием иона с зарядами изображения;

- количественно объяснена немонотонность энергетической зависимости вероятности нейтрализации ионов на поверхности металлов, обладающих высокой работой выхода.

Диссертация И.К. Гайнуллина состоит из Введения, пяти глав, Заключение и Списка литературы, содержащего 438 наименований. Общий объем диссертации составляет 460 страниц, включая 192 рисунка и 14 таблиц.

Во **Введении** обоснована актуальность выполненных исследований, сформулированы цель и задачи работы, указаны научная новизна, теоретическая и практическая значимость диссертации, описана методология, сформулированы защищаемые положения, обоснована достоверность полученных результатов, указан личный вклад автора.

Первая глава посвящена анализу литературы по теме диссертации. На основе анализа сделан вывод о недостаточности существующего подхода, не учитывающего неадиабатичность и трехмерный характер электронного обмена,

показана необходимость разработки нового подхода, учитывающего данные факторы.

Во второй главе дана постановка задачи электронного обмена атомной частицы с поверхностью металла, подробно описан трехмерный неадиабатический подход к решению этой задачи, включая:

- усовершенствованную физическую модель формирования конечного зарядового состояния атомной частицы;
- физическую методику трехмерного моделирования электронного обмена ионов с поверхностью металлов;
- гибридную численную схему;
- комплекс программ для моделирования электронного обмена.

Третья глава посвящена теоретическому исследованию новых эффектов, которые проявляются при рассмотрении задачи электронного обмена в трехмерной постановке. Продемонстрированы следствия эффекта анизотропии процессов распространения электрона и его торможения, связанных с влиянием кристаллической структуры металла. Установлены особенности электронного обмена с наносистемами, обусловленные дискретностью их электронной структуры и проявляющиеся в виде латерального и квантово-размерного эффектов электронного обмена.

Представляет интерес установленное явление образования «квантовых вихрей», которое, как показано в диссертации, может быть объяснено только при трехмерном моделировании. Это демонстрирует прогностическое значение авторского подхода.

В четвертой главе разработанный в предыдущих разделах подход применен для моделирования и проверки ряда конкретных зависимостей и закономерностей, полученных в различных экспериментальных работах. Автором количественно рассмотрено около двух десятков экспериментов и представлены объяснения следующих эффектов:

- увеличение вероятности нейтрализации при рассеянии на нанокластерах;
- немонотонность энергетической зависимости вероятности нейтрализации ионов на поверхностях металлов с большой работой выхода;

- влияние азимутального направления ионного пучка на вероятность электронного перехода.

В данной главе проведена также оценка погрешностей расчетов, производимых без учета и с учетом неадиабатичности и трехмерности задач. Убедительно показано преимущество подхода, предложенного автором диссертации.

Пятая глава посвящена формулировке рекомендаций по практическому использованию результатов диссертации. Здесь на конкретных примерах проанализированы ошибки, к которым может приводить метод эталонных образцов при определении состава поверхности методом РМИ из-за неучета нейтрализации, показаны преимущества прямого расчета элементной чувствительности, обоснованы рекомендации по использованию ионов щелочных металлов для количественного анализа элементного состава поверхности.

В разделе «Заключение» приведены основные результаты проведенных исследований.

Диссертация И.К. Гайнуллина представляет собой крупное фундаментальное исследование мирового уровня. Об этом свидетельствуют цитирование его публикаций в трудах известных зарубежных ученых и активное участие диссертанта в совместных с зарубежными учеными работах.

Основные результаты, выводы и рекомендации обладают существенной **новизной**: автором впервые решены физические и расчетно-теоретические проблемы, связанные с учетом неадиабатичности процессов и трехмерностью зарядового обмена рассеянных поверхностью твердого тела частиц.

Обоснованность и достоверность защищаемых положений и выводов подтверждается в целом хорошим согласием полученных результатов с результатами многочисленных экспериментов.

Результаты по теме диссертации **опубликованы** в рейтинговых изданиях, индексируемых в WoS, Scopus, RSCI – 33 статьи; кроме того опубликованы 19 тезисов докладов. Особо следует отметить обзорную статью, опубликованную в одном из наиболее престижных отечественных журналов – «Успехи физических наук».

Научное значение диссертации состоит в разработке нового подхода к проблеме электронного обмена медленных ионов с металлами, что обогащает наши знания в области физики поверхности конденсированных сред. **Практическое значение** работы заключается в выработке важных рекомендаций, касающихся использования метода рассеяния медленных ионов. Созданный автором комплекс программ представляет самостоятельную ценность для теоретической и прикладной физики.

Диссертация не лишена некоторых замечаний.

1. Неоднократно употребляется термин «неоднородность поверхности», но четкого единого определения этого термина не приведено, в частности, оно отсутствует и в «Словаре терминов». В большинстве случаев из контекста ясно, что под «неоднородностью» понимается неплоский рельеф поверхности (хотя в этом случае – термин «неоднородность поверхности» не совсем удачен: в атомарном масштабе любая поверхность кристалла неоднородна).

2. При описании используемых в моделировании приближений не всегда дается достаточно полное обоснование их справедливости. Очевидно, что отказ от приближений привел бы к неоправданному увеличению времени расчетов. Однако, уместным было бы рассмотрение вопроса о том, к каким качественным последствиям может привести такой отказ, каковы результаты возможного решения задач ожидаются при учете тех или иных дополнительных факторов. Это относится к отказу от учета тепловых колебаний (с. 168), к использованию модели «желе» при рассмотрении нанообъектов и др.

3. На рис. 4.10, в пределах точности визуального восприятия, для меди приведенная энергетическая зависимость монотонна (в отличие от экспериментальной). Однако, автор не комментирует это обстоятельство.

Сделанные замечания не влияют на положительную оценку диссертации в целом и не снижают ценности полученных результатов. Диссертационная работа И.К. Гайнуллина представляет собой цельное и законченное научное исследование. В ней изложены новые **научно обоснованные положения, выводы и рекомендации** по трехмерному расчетно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с поверхностями металлов. Совокупность разработанных теоретических положений, несомненно, можно квалифицировать как **научное**

достижение и развитие нового научного направления – создание трехмерного неадиабатического подхода к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с поверхностью металлов с учетом их электронной и атомной структуры. Автореферат полностью соответствует тексту диссертации.

Результаты диссертационной работы имеют **значительное фундаментальное и практическое значение** для нескольких областей науки. Разработанный трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена важен для понимания фундаментальных закономерностей электронного обмена ионных пучков с поверхностью.

Диссертационная работа И.К. Гайнуллина **полностью соответствует критериям**, установленным Положением о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а ее автор, Гайнуллин Иван Камилевич, безусловно **заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальностям 1.3.5. Физическая электроника и 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.**

Официальный оппонент

доктор физ.-мат. наук, профессор

Тетельбаум Давид Исаакович

Ведущий научный сотрудник научно-исследовательского физико-технического института федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный университет им.Н.И. Лобачевского»; Адрес: 603950, г. Нижний Новгород, просп. Гагарина, 23, корп. 3; e-mail: tetelbaum@phys.unn.ru; телефон:+79601711942