

ОТЗЫВ
на автореферат диссертации И.К. 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».

Тема, рассмотренная автором, является актуальной для области исследований ионных пучков, которые применяются для диагностики поверхности твердых тел, контролируемой модификации её свойств, создания функциональных покрытий, лечения онкологических заболеваний и решения прочих задач, связанных с анализом и изменением физических свойств объектов на атомном уровне.

Основным вопросом, поставленным на рассмотрение в работе, является совершенствование существующих расчетно-теоретических моделей и построение методов трехмерного моделирования электронного обмена ионов с поверхностью, учитывающих неадиабатические эффекты, реальную электронную и атомную структуру поверхности. Рассмотренная тематика представляет интерес для специалистов в области взаимодействия ионных пучков с поверхностью.

В работе четко выделен предмет исследования - резонансный электронный обмен между атомной частицей и металлической поверхностью и объект исследования - ионные пучки и отдельные атомные частицы, взаимодействующие с металлическими поверхностями.

В тексте автореферата автор обосновывает научную новизну и выносит на защиту пять положений, суть которых заключается в следующем:

1. Усовершенствована физическая модель формирования конечного зарядового состояния атомной частицы.

2. Построена физическая методика трехмерного моделирования электронного обмена между атомными частицами и металлическими поверхностями.

3. Разработанная численная схема и эффективное распараллеливание расчетов на графических вычислителях увеличили производительность и масштабируемость комплекса программ минимум в 3 раза и довели размер счетной области до 10^5 нм³.

4. Обнаружены:

- квантово-размерный эффект.
- зависимость вероятности электронного обмена от азимутального направления ионного пучка.

5. Предложенный подход описывает широкий спектр экспериментальных данных с точностью ~10%.

Апробация работы выполнена как на сравнении с другими теоретическими данными, так и на сравнении с экспериментом. Результаты работы изложены в 33 статьях.

Описывая базовую физическую модель перезарядки, автор указывает на достаточность описания состояния электрона на траектории удаления от поверхности в полях собственно иона, поверхности металла и её модификации под

действием иона, то есть в поле изображения и реализует неадиабатическую постановку квантовой задачи.

Разработка параллельного MPI-варианта на графических ускорителях для комбинированной разностной схемы нестационарного уравнения Шредингера позволила решать трехмерные задачи с миллиардом пространственных точек за приемлемое время в пределах суток.

В итоге применения трехмерных подхода и псевдопотенциалов впервые была получена реалистичная картина электронного перехода с детализацией на атомном уровне. Для поверхности Cu(110) был обнаружен интересный трехмерный эффект – анизотропия распространения электрона вдоль поверхности. Описываютя квантовые вихри и обнаруженный квантово-размерный эффект. Сравнение результатов ряда расчетов с экспериментальными данными, проведено для опытов по:

- рассеянию на нанокластерах Au с уменьшением размеров кластера до 1 нм;
- нейтрализации ионов щелочных металлов на поверхностях с большой работой выхода;
- тонким неадиабатическим эффектам, таким как, например, различия в вероятности выхода ионов H- при рассеянии поверхностях Ag(110) и Ag(111);
- электронному обмену при скользящем рассеянии;
- и другие, всего 18 экспериментов.

Укажем, что разработанный трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена имеет практическое значение для анализа элементного состава с помощью рассеяния медленных ионов и повышения эффективности источников отрицательных ионов.

Отмечу достоинства работы. В области физической электроники И.К. Гайнуллин решает задачу квантовой механики в нестационарном виде уравнения Шредингера, принесшем ряд находок в расчете 18 экспериментов, отражающих различные аспекты электронного обмена. Точность расчетов была повышена в ~2,5 раза по сравнению с ранее применяемыми адиабатическими подходами, что позволило количественно (с точностью 10%) описывать экспериментальные данные. Применение разработанного подхода к случаю искривленной поверхности позволило объяснить экспериментальный факт роста вероятности нейтрализации Na⁺ с 3% при рассеянии на массивном образце Au до 50% при рассеянии на нанокластере Au радиусом 1 нм. Следующий нетривиальный шаг состоит в построении трехмерных псевдопотенциалов, позволивший отследить анизотропию взаимодействия и наблюдать квантовые вихри.

В области математических методов автор построил аппарат решения нестационарной задачи с быстро осциллирующим членом с временной производной комбинируя явную и неявную схемы для получения устойчивого решения в аномально большом для квантовых задач размере (10^5 нанометров в кубе) для чего обратился к самым передовым вычислительным технологиям - графическим ускорителям - определяющим прогресс в супервычислениях.

К замечаниям отнесу:

1. Физическая модель, ограниченная одним электроном, при учете обменно-корреляционных взаимодействий, зависящих от полной электронной плотности, то есть суммарной плотности описываемого электрона и электронов его окружения - иона и поверхности - затрудняет ответ на основной вопрос теории функционала

плотности - какой из обилия видов потенциалов наилучшим образом подходит для данной задачи.

2. Несясн статистический итог перезарядки - результат является средним значением, а его квантовая флуктуация не определена.

Сделанные замечания имеют характер пожеланий по развитию исследований и не влияют на общую высокую оценку работы.

Выводы:

1. Созданная автором новая методика описания процесса перезарядки является важным этапом в развитии представлений о деталях процесса и открывает новые возможности в понимании экспериментальных результатов и последующем совершенствовании диагностических и технологических методов, использующих перезарядку.
2. Диссертационная работа соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание докторской степени, сформулированным в Положении о присуждении ученых степеней МГУ им. М.В. Ломоносова, а ее автор И.К. 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».

Ведущий научный сотрудник
лаборатории 0203, кандидат физ.-мат. наук

Карепов В.А.

Федеральное государственное унитарное предприятие РОССИЙСКИЙ
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР Всероссийский научно-исследовательский
институт экспериментальной физики (ФГУП «РФЯЦ–ВНИИЭФ») пр. Мира, д.37,
г. Саров, Нижегородская обл., 607188
тел.: (831)30-28347 E-mail: karep@vniief.ru