

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Гайнуллина Ивана Камилевича “Трёхмерный неадиабатический подход к расчётно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с металлическими поверхностями” на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальностям 1.3.5 — физическая электроника и 1.2.2 — математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Диссертация Гайнуллина И.К. посвящена трёхмерному расчётно-теоретическому изучению резонансного электронного обмена атомных частиц с металлическими поверхностями. В терминах специальности 1.2.2: 1) формулируется физико-математическая модель феномена взаимодействия атомных частиц с поверхностью; 2) разрабатываются алгоритмы расчета соответствующих уравнений модели; 3) осуществляется вычислительный эксперимент; 4) приводится сравнение вычислительных и экспериментальных данных. Другими словами, диссертант строит цифровой образ феномена резонансного электронного обмена атомных частиц с металлическими поверхностями.

Актуальность темы не вызывает сомнений, поскольку процессы электронного обмена, имеющие место при взаимодействии атомных частиц (ионов) с поверхностью твердого тела, дают важную информацию, как о поверхности, так и самом твердом теле. Добытая информация, как в экспериментальном, так и в теоретическом форматах, включая проведение вычислительного (цифрового) эксперимента, находит широкое применение в различных областях науки и техники. Исследования, проведённые соискателем, позволяют существенно расширить наши знания об электронном обмене атомных частиц с металлическими поверхностями и с различного рода наноструктурами. Полученные результаты имеют важное практическое значение в части повышения точности анализа состава поверхности методом рассеяния медленных ионов.

Объектом и предметом исследования в диссертации выступили ионные пучки, отдельные атомы, взаимодействующие с поверхностью металла, а также физико-математический механизм резонансного электронного обмена между частицей и металлической поверхностью.

Целью диссертации Гайнуллина И.К. явилось системное сравнение существующих вычислительных моделей с моделью трёхмерного моделирования электронного обмена ионов с поверхностью. Учитывались: неадиабатические эффекты, а также реальная электронная и атомная структура поверхности. Для достижения поставленной цели были проведены следующие мероприятия: 1) усовершенствована физическая модель формирования конечного зарядового состояния атомной частицы; 2) построена вычислительная методика трёхмерного моделирования электронного обмена; 3) разработаны численная схема и комплекс программ для построения цифровой модели изучаемого механизма резонансного электронного обмена между ионами и металлической поверхностью.

Диссертация представлена на 460 страницах и состоит из введения, пяти глав и заключения, списка цитированной литературы из 438 наименований, а также содержит 192 рисунка, 14 таблиц и 3 приложения.

Во введении приводится постановка задачи, содержится описание актуальности, новизны, степени достоверности и аprobации, а также практической значимости предлагаемого направления исследования и поставленных задач.

В первой главе приведён детальный обзор литературы по теме диссертации. Тематический охват обзора включает: 1) анализ множества физико-математических моделей механизма резонансного электронного обмена в системе “частица-поверхность”; 2) перечисление имеющихся и перспективных численных методов решения уравнения Шредингера; 3) обоснование актуальности перехода к численному решению трехмерного уравнения Шредингера; 4) краткое описание сверхвысоковакуумной экспериментальной установки по наблюдению за исследуемым феноменом.

Во второй главе описывается физико-математическая постановка задачи электронного обмена и трёхмерный неадиабатический подход к её решению. Представлена основная физическая модель формирования конечного зарядового состояния атомной частицы и подробно обоснованы общепринятые приближения, используемые в базовой модели. Рассмотрено усовершенствование физической модели за счёт учёта конфигурации индуцированных зарядов для неплоских поверхностей и смещения распределения волновой функции электрона в пространстве волновых векторов. Численная методика трёхмерного моделирования электронного обмена построена на основе ранее известного метода распространения волновых пакетов.

Новизна представленной методики определяется решением нестационарного уравнения Шредингера в формате трёхмерных вычислений, когда исследуется эволюция волнового пакета активного электрона в совокупности с трёхмерным потенциалом, полученным с помощью теории функционала плотности. Для трёхмерных вычислений применяется метод конечных разностей. Соискателю удалось значительно оптимизировать объем расчётов при переходе в цилиндрическую систему координат. Была предложена и апробирована оригинальная численная схема, сочетающая в себе явные и неявные способы представления и решения разностных схем.

Высокая производительность созданного программного комплекса была достигнута за счёт применения современных технологий параллельных расчётов, включая использование технологии MPI и графических вычислений типа CUDA/GPU. Отмечу кропотливую работу соискателя в части оптимизации программного кода с целью достижения максимальной производительности трехмерных расчётов. В диссертации аккуратно изложена крупноблочная методология распараллеливания, которая, по сравнению с рядом других методик, позволила добиться значительного прироста вычислительной производительности.

В третьей главе представлены результаты трёхмерного моделирования, демонстрирующие новые возможности в части численного моделирования электронного обмена с помощью вычислительного эксперимента на базе разработанного соискателем комплекса программ. В диссертации показано, что трёхмерное моделирование электронного обмена в ряде случаев более предпочтительно, чем двумерное, оно позволяет более реалистично описывать изучаемый феномен. Трехмерный вариант расчетов привел к описанию ряда новых физических явлений и их экспериментальному соотнесению и подтверждению: 1) эффекту торможения туннелируемого электрона; 2) теоретическому предсказанию анизотропного распространения электрона; 3) теоретическому предсказанию

проявления квантово-размерного эффекта электронного обмена с наноразмерными кластерами, включая идентификацию квантовых вихрей.

В четвёртой главе проводится сравнение вычислительного эксперимента в лице трёхмерного неадиабатического подхода к описанию электронного обмена и натурного эксперимента. Из наиболее любопытных результатов сравнения отмечу объяснения: 1) кратного увеличения вероятности нейтрализации ионов на металлических нанокластерах; 2) немонотонной энергетической зависимости вероятности нейтрализации щелочных металлов при рассеянии на ряде металлических поверхностей с ограниченным движением электрона; 3) впервые были объяснены экспериментальные результаты по зависимости вероятности формирования ионов водорода от азимутального угла при скользящем рассеянии на поверхности . Приведенный неполный перечень объяснений говорит о том, что соискатель в лице трехмерного неадиабатического подхода предложил и обосновал достаточно универсальный цифровой способ описания электронного обмена атомов с поверхностью металлов.

В пятой главе рассматриваются возможные практические приложения, полученных в диссертации результатов. В частности, с учетом ряда примеров формулируется убедительный и обоснованный итог: 1) необходимо учитывать электронный обмен в системе “атом (ион)-металл” при анализе структуры и состава поверхности; 2) этот же механизм электронного обмена выступает в качестве теоретической базы разработки рекомендаций по повышению эффективности источников отрицательных ионов за счёт использования кинематического эффекта (параллельной скорости).

Оценивая рецензируемую диссертационную работу в целом, отмечу подробный и комплексный характер проведённых исследований с учетом использования современных цифровых технологий распараллеливания при решении соответствующих физико-математических уравнений. Разработаны подходящие физические модели, для численного решения которых подготовлены адекватные расчётные методики. На примере ряда новых задач показана важность учета трёхмерных эффектов электронного обмена. Результаты диссертации, несомненно, актуальны для совершенствования современных измерительных методик и приборов. Кроме того, результаты работы не менее актуальны в части развития методологии математического моделирования, вычислительного эксперимента и разработки комплекса программ, что соответствует специальности 1.2.2. Высокая оценка работы И.К. Гайнуллина подтверждается также сотрудничеством с ведущими отечественными и международными учёными и грантами, регулярно выделяемыми на поддержку фундаментальных исследований по теме диссертации.

Все результаты, выносимые на защиту, являются новыми и оригинальными. Они были опубликованы в 33 статьях в реферируемых журналах, включая Physical Review A, Physical Review B, Computer Physics Communications. Отметим обзорную статью непосредственно по теме диссертации в журнале «Успехи физических наук». Результаты диссертации неоднократно докладывались на ведущих российских и международных конференциях, что отмечено в диссертации в виде списка тезисов в количестве 19.

К тексту диссертации есть несколько замечаний:

1. Рецензент обнаружил несколько опечаток в текстовых ссылках на номера формул (см., например, на стр.184, строка №1).

2. Зачастую формулы в тексте выступают как графические вставки и по размеру не очень согласуются с положением строки с текстом.
3. В тексте диссертации в заголовках разделов нет названий: Глава 1, Глава 2 и пр. Объемы глав слишком разные. В частности, без потери содержания главу 5 можно было бы присоединить к главе 4.
4. В диссертации не исследована возможность применения известного в теории разностных схем локально-одномерного метода при численном решении многомерных параболических уравнений, который, возможно, позволил бы ограничиться прогонками по каждой из координат и вернул главное преимущество неявных схем — отсутствие ограничений на шаг интегрирования по времени.

Указанные замечания не носят принципиального характера, они не умаляют научной и практической значимости диссертации и не влияют на общую положительную оценку работы.

Диссертационная работа, представленная на соискание учёной степени доктора физико-математических наук, выполнена на высоком научном уровне, развивает новое направление — трёхмерное численное моделирование электронных обменных процессов при взаимодействии ионных пучков с поверхностью. В диссертации изложены защищаемые положения, выводы и рекомендации, обоснованность, достоверность и новизна которых подтверждается оригинальными публикациями автора, согласием результатов моделирования с экспериментальными данными, известными из литературы.

Диссертация Гайнуллина Ивана Камилевича полностью соответствует требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям в Положении о присуждении учёных степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а её автор — Гайнуллин Иван Камиевич безусловно заслуживает присуждения учёной 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 физико-математических наук **К.Э. Плохотников**, ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования “Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Физический факультет, Отделение прикладной математики, Кафедра математического моделирования и информатики.

Адрес: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, Физический факультет. Тел. +7 (495) 939-13-32. E-mail: konstantin_plo@rambler.ru

29.05.2023 г. _____ /К.Э. Плохотников/

Подпись доктора физико-математических наук К.Э. Плохотникова заверяю

“ ____ ” 2023 г. _____ /В.А. Караваев/

Учёный секретарь Учёного Совета физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, доктор физико-математических наук, профессор **В.А. Караваев**.