

Отзыв

на автореферат диссертации Гайнуллина Ивана Камилевича «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»

Диссертационная работа Гайнуллина Ивана Камилевича посвящена моделированию электронного обмена ионных пучков с металлическими поверхностями. Перезарядка ионов вблизи поверхности твердых тел изучена недостаточно хорошо по сравнению с другими процессами, происходящими при взаимодействии ионов с поверхностью. Это связано со сложностью как экспериментального, так и теоретического изучения данного процесса. В то же время, знание зарядового состояния важно для анализа поверхности твердого тела. Поэтому тема представленной диссертации, безусловно, **является актуальной**.

Наиболее важные результаты диссертации сформулированы в виде защищаемых положений:

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, тунNELирующий с атомной частицы, распространяется вдоль направления $<001>$ поверхности Cu(110) в ~ 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 существующие аналоги, что позволило впервые реализовать трехмерное моделирование электронного обмена между движущейся атомной частицей и поверхностью в большой расчетной области (до 10^5 нм³).

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.

5. Трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена, основанный на усовершенствованной физической модели и физической методике трехмерного моделирования, описывает широкий спектр экспериментальных данных с точностью ~10%, что в ~2,5 раза улучшает точность расчетов по сравнению с ранее применяемыми подходами.

Полученные в диссертации результаты являются **новыми и соответствуют мировому уровню исследований**. Достоверность полученных результатов подтверждается обоснованием выбора физической модели, численных методик, а также сопоставлением с известными теоретическими и экспериментальными данными. Основное содержание диссертационной работы отражено в публикациях соискателя. Список публикаций насчитывает 52 позиции, в том числе 33 статьи и 19 тезисов докладов. Наиболее важные результаты опубликованы в журналах Успехи Физических Наук, Physical Review, Surface Science и Computer Physics Communications.

Научная значимость диссертационного исследования заключается в разработке расчетно-теоретической модели и создании комплекса программ для решения задачи электронного обмена в трехмерной постановке. Полученные **результаты важны** для спектроскопии рассеяния медленных ионов, т.к. они позволяют существенно повысить точность измерения состава поверхности.

В целом диссертационная работа Гайнуллина И. К. представляет собой **законченное исследование** электронного обмена ионных пучков с металлическими поверхностями. Работа написана хорошим языком и последовательна в

изложении. Проект автореферата полностью соответствует содержанию диссертации. 23 ноября 2019 г. материалы диссертации были представлены Гайнуллиным И.К. на заседании кафедры вакуумной электроники Физтех-школы электроники, фотоники и молекулярной физики и получили высокую оценку.

Диссертация «Трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с металлическими поверхностями» удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям в Положении о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а ее автор Гайнуллин Иван Камилевич, без сомнения, 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» за создание методологической основы и инструментария трехмерного расчетно-теоретического описания электронного обмена ионных пучков с поверхностью твердых тел.

Директор Института квантовых технологий МФТИ,

Доктор физико-математических наук,

член-корреспондент РАН

/В.В. Иванов/

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

Адрес института: 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9.

Тел. +7 (498) 744-65-47

Эл. почта: ivanov.vv@mipt.ru

Подпись Иванова Виктора Владимировича заверяю