

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Гайнуллина Ивана Камилевича «Трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с металлическими поверхностями», представленную 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.

Целью работы являлось совершенствование теоретических моделей и построение методов трехмерного моделирования электронного обмена ионов с поверхностью, учитывающих реальную электронную и атомную структуру поверхности, а также влияние неадиабатических эффектов.

Актуальность решаемой задачи связана с ее фундаментальной значимостью - понимание механизмов обмена зарядом при взаимодействии иона с поверхностью важно для физики поверхности, атомной физики и смежных областей. Электронный обмен при столкновениях частиц с поверхностью используется на практике при создании интенсивных пучков отрицательных ионов, при разработке газовых сенсоров, а также при диагностике состава поверхности методом рассеяния медленных ионов, обладающим уникальной чувствительностью для измерения состава поверхностного монослоя.

Научная новизна представленной работы характеризуется двумя важными моментами – применение метода описания столкновения с помощью техники разложения волновой функции активного электрона через набор волновых пакетов позволило учесть поправки, связанные с нарушением неадиабатичности столкновения. Другим новым шагом явилась разработка методов трехмерного математического моделирования волновой функции активного электрона, что позволило учесть влияние атомной и электронной структуры на процесс обмена зарядом в системе ион-поверхность. Примененный подход позволил объяснить эффекты влияния ориентации поверхности на вероятность отлета частицы в определенном зарядовом состоянии. Без применения трехмерных расчетов было бы невозможно описать процесс электронного обмена с поверхностью, содержащей островки наноразмеров или квантовые точки.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы и 3 приложений, 460 стр. текста, 192 рис. и 14 таблиц.

Во введении характеризуется актуальность темы и кратко текущее состояние исследований, ставятся цели и задачи исследований. Сформулирована научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы. Формулируются защищаемые положения. Характеризуется личный вклад диссертанта - большинство работ было выполнено им лично.

В первой главе приводится расширенный литературный обзор, характеризующий общие сведения о состоянии исследований ионов с поверхностью. Основное внимание обращено на описание рассеяния ионов поверхностью и изучение процессов зарядового обмена ионов с поверхностью. Рассмотрено применение метода рассеяния медленных ионов для анализа состава поверхности. Рассмотрены различные теоретические подходы для описания зарядового состояния частиц при рассеянии ионов поверхностью. В конце обзора сформулированы актуальные проблемы в расчетно-теоретическом описании электронного обмена.

Во второй главе рассматривается физическая модель описания процесса электронного обмена при взаимодействии иона с поверхностью. Базовая модель была усовершенствована диссидентом с учетом влияния реального рельефа поверхности. Чтобы учесть поправки, связанные с неадиабатическими эффектами, автором предложено использовать нестационарное решение уравнение Шредингера с описанием волновой функции активного электрона методом волновых пакетов. Большое внимание уделено построению псевдопотенциалов для описания поверхности. Описаны подходы применения методов параллельного вычисления и проведена верификация используемых физических подходов и численных расчетов.

В третьей главе рассмотрены особенности, проявляющиеся при трехмерном рассмотрении электронного обмена. Из полученных результатов следует отметить полученное диссидентом объяснение влияния ориентации кристаллических осей поверхности кристалла меди на значение вероятности электронного обмена. Без применения трехмерных расчетов этот эффект не объяснить. Заслуживает внимания эффект торможения электрона в металле при скользящем рассеянии. Большое внимание уделено рассмотрению электронного обмена на островках металла на поверхности. Полученные диссидентом результаты важны для повышения эффективности получения пучков отрицательных ионов с применением мишеней с островками металлов наноразмера на поверхности.

Четвертая глава посвящена моделированию экспериментов при изучении состава поверхности методом рассеяния медленных ионов. Учет электронного обмена позволяет значительно повысить точность определения состава поверхности. Было проанализировано 18 различных экспериментов

(см.табл.11) и достигнута точность порядка 10%. Без учета поправок на электронный обмен средняя ошибка была более 100%.

В пятой главе даются рекомендации по практическому применению результатов диссертации. Обращено внимание на повышение точности количественного анализа состава поверхностного монослоя с помощью рассеяния медленных ионов и на увеличение эффективности источников отрицательных ионов, мощные пучки которых используются для нагрева плазмы в современных термоядерных установках.

В заключении сформулированы основные выводы проделанной диссертационной работы и кратко сформулированы перспективы дальнейших исследований.

Диссертационная работа развивает новое научное направление в физической электронике и методах математического моделирования – создан трехмерный неадиабатический подход к описанию обмена электроном при взаимодействии иона с поверхностью металла. Она содержит обширный и добротный расчетный материал, на основе которого сформулированы основные выводы диссертации, обоснованность, достоверность и новизна которых подтверждается оригинальными публикациями автора, многочисленными обсуждениями на международных конференциях. Полученные результаты обобщены в обзоре, опубликованном диссертантом в ведущем научном журнале Успехи физических наук. Большая часть результатов получена автором впервые. Научная новизна диссертационной работы заключается в разработке оригинального подхода к описанию процессов зарядового обмена, учитывающего с одной стороны неадиабатические эффекты, а с другой стороны позволившего проводить трехмерные расчеты с учетом реальной атомной и электронной структуры поверхности. В диссертации изложены новые научно обоснованные положения, выводы и рекомендации.

Результаты диссертационной работы развивают теоретические представления о процессах зарядового обмена иона с поверхностью и имеют практическое значение для применения метода рассеяния медленных ионов, для исследования островков наноразмера на поверхности, для создания мощных источников отрицательных ионов для инжекторов частиц для нагрева плазмы.

По содержанию диссертации имеется ряд замечаний:

1. Обзор написан на мой взгляд излишне подробно. Ряд результатов обсуждается повторно в оригинальной части работы, например рис.1.54. В оригинальной части было бы целесообразно сопоставить

полученные результаты диссидентом с данными предшествующих работ и тем самым избежать повторов.

2. На стр. 27 диссидентии приводится длина экранирования Фирсова. Вместо нее ошибочно дана формула для длины экранирования в потенциале ZBL.
3. На стр.86 делается утверждение «на траекторию частицы не влияют электронные переходы». Это в общем случае неверно. Электронный переход может менять терм, по которому происходит рассеяние. Как известно, при пересечении термов траектория частицы описывается другим потенциалом, т.е. меняется.
4. На стр. 100 введено понятие мнимой плоскости металла. Можно догадываться, что она обозначена на рис.1.42 как середина потенциального барьера. Следовало бы это понятие яснее определить.

Автореферат полно и точно отражает содержание диссертационной работы. Основные материалы диссертационной работы опубликованы в отечественных и зарубежных журналах из списка Web of Science и Scopus, докладывались на многочисленных международных научных конференциях. Автором проделан большой объем исследований и диссертация выполнена на высоком научном уровне.

Диссертационная работа Гайнуллина И.К. полностью соответствует требованиям, установленным Положением о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а ее автор, заслуживает присвоения 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

Зиновьев Александр Николаевич

Доктор физико-математических наук,  
Заведующий лабораторией атомных столкновений в твердых телах  
ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН  
Адрес института: 194021, Россия, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.  
Телефон: 88122974144  
e-mail: Zinoviev@inprof.ioffe.ru

Подпись Зиновьева А.Н. «ЗАВЕРЯЮ».  
Ученый секретарь ФТИ им. А.Ф. Иоффе  
Патров М.И.  
21 мая 2023 г.