Гайнуллин Иван Камилевич, доцент Физического факультета МГУ.

Тема доклада: "Трёхмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с металлическими поверхностями"

(представление диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук)

*Работа посвящена компьютерному моделированию резонансного электронного обмена при взаимодействии ионных пучков с металлическими поверхностями. Электронный обмен важен для создания источников отрицательных ионов и диагностики поверхности методом рассеяния медленных ионов (РМИ). Докладчиком создан комплекс программ для решения трехмерного нестационарного уравнения Шредингера, обладающий высокой производительностью за счет специально разработанной гибридной численной схемы и эффективного распараллеливания расчетов на графических вычислителях. Производительность комплекса программ в несколько раз превосходит существующие аналоги, а поддерживаемый размер расчётной области до 105 нм3 делает его уникальным для моделирования задач электронного обмена. Также была усовершенствована физическая модель и разработана методика трехмерного моделирования электронного обмена, учитывающие неадиабатические эффекты, неоднородную атомную и электронную структуру металла. Что в несколько раз повысило точность расчетов по сравнению с ранее применяемыми двумерными/адиабатическими подходами и позволило количественно (с точностью 10%) описывать экспериментальные данные. Был численно промоделирован эффект анизотропии распространения электрона вдоль поверхности и показано, что эффективность электронного обмена с наносистемами зависит от ее размеров (квантово-размерный эффект) и латерального положения атомной частицы. Также дано количественное объяснение ряда важных экспериментальных закономерностей электронного обмена, включая зависимость от азимутального направления движения ионов, немонотонную зависимость вероятности нейтрализации положительных ионов от энергии, сильное увеличение вероятности нейтрализации на нанокластерах.*