

## **Отзыв**

на автореферат диссертации Федотова Алексея Юрьевича  
"Многоуровневое математическое моделирование процессов  
формирования наноструктур в газовой среде", представленной  
на соискание ученой степени доктора технических наук по  
специальности 1.2.2 – Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Диссертационная работа Федотова Алексея Юрьевича направлена на развитие многоуровневых моделей в области исследования газосодержащих наносистем. Работа выполнена на актуальную тему. Это связано, в первую очередь, с тем, что зачастую процессы изготовления и функционирования наноструктурированных материалов тесно связаны с газообразными средами. В газообразных или вакуумных средах происходит их формирование, закладываются основные структурные особенности и эксплуатационные свойства. Эффективность использования наноструктурированных и наноразмерных материалов в большой степени определяется пониманием физических и химических процессов, происходящих при их формировании и функционировании.

Новизна диссертационных исследований определяется, главным образом, построением и адаптацией трехуровневой математической модели, включающей в себя этап вычисления геометрических и силовых параметров методами квантовой механики, стадию конденсации атомов и молекул, опирающуюся на ранее полученные параметрические расчетные данные и реализованную на основе уравнений классической молекулярной динамики, и уровень мезодинамики частиц, описывающий поведение и конденсацию сформированных нанообъектов с учетом их вращательного движения. Математическая модель позволяет описывать закономерности объединения наночастиц, проводить анализ процессов их кинетики, агрегации и встраивания в подложки и нанопленки.

Практическая значимость работы обуславливается созданием программного комплекса, позволяющего исследовать и корректировать технологические процессы изготовления наноматериалов, и, таким образом, сокращающего на стадии проектирования временные и экономические издержки. Также в работе представлены результаты численных и экспериментальных исследований для газосодержащих наноструктурированных систем, некоторые из которых, например, газогенератор пожаротушащего наноаэрозоля, имеют несомненное важное прикладное значение.

Достоверность результатов, судя по автореферату, обеспечивается использованием апробированных математических моделей, опирающихся на положения квантовой механики, классической молекулярной динамики, механики сплошных сред. В работе представлено сопоставление результатов моделирования и экспериментальных исследований, которое показало хорошее соответствие полученных данных.

Результаты диссертационной работы полностью опубликованы в 48 печатных работах, включая 12 статей в журналах, рекомендованных ВАК РФ, 19 статей, цитируемых в базах данных Web of Science и Scopus, 8 статьях из базы RSCI, а также – в 2-х патентах РФ и в 1 свидетельстве о регистрации электронного ресурса. Основные результаты диссертации прошли апробацию на многочисленных российских и международных конференциях.

В результате ознакомления с авторефератом возникает ряд вопросов, среди которых можно выделить следующие:

1. Не понятно происходит ли в математической модели учет образования новых или разрыва уже существующих химических связей. Образование и разрыв химических

связей могут существенно повлиять на результат исследований, например, привести к образованию других устойчивых соединений, изменить скорость конденсации и состав наночастиц.

2. В автореферате диссертации нет детального анализа выбранного критерия объединения атомов и молекул в наночастицу.

Тем не менее, несмотря на замечания, необходимо отметить, что автором проделана колоссальная научная работа, направленная на решение важной научной проблемы, а именно ориентированная на построение и реализацию математической модели для описания процессов конденсации, формирования, роста и внедрения наноструктур в технических системах для повышения качественных и функциональных характеристик наноматериалов.

Оценивая работу в целом, считаю, что она удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям (Пункт 9) "Положения о порядке присуждения ученых степеней", утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Федотов Алексей Юрьевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора технических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Научный руководитель лаборатории оптики и электрофизики  
Федерального государственного бюджетного учреждения  
науки Институт автоматики и процессов управления  
Дальневосточного отделения Российской академии  
наук (ИАПУ ДВО РАН), доктор физико-математических  
наук, профессор по специальности  
01.04.10 – Физика полупроводников

— Н.Г. Галкин

09 августа 2022

Контактные данные:

e-mail: ngalk@iacp.dvo.ru,  
служебный телефон: (423) 2310687,  
рабочий адрес: 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 5.

Я, Галкин Николай Геннадьевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации и их дальнейшей обработкой.

Подпись Н.Г. Галкина удостоверяю  
заместитель директора по НР ИАПУ ДВО РАН  
член-корреспондент РАН, д. ф.-м. н.



— А.А. Саранин