

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

Анализ фазовых переходов и сопутствующих им критических явлений в конденсированных средах является сложным, трудоемким и зачастую технологически высокочувствительным процессом. С одной стороны это связано с необходимостью использования комплексного подхода при теоретических исследованиях, так как поведение разных фаз нередко описывается различными моделями или уравнениями состояния. Другая причина заключается в том, что механизмы фазовых преобразований зарождаются на нанометровом и атомарном уровнях, на которых наблюдение и эксперименты требуют современного и дорогостоящего оборудования. В связи с этим прецизионные экспериментальные исследования в критических областях сопряжены со значительными трудностями, обусловленными как с временным, так и с пространственным масштабами поведения объектов.

Обширное влияние фазовых переходов и критических явлений на эксплуатационные свойства образцов свидетельствуют о важности детального исследования структурных преобразований и возможных устойчивых состояний. Морфологический анализ дает возможность выявления локальных дефектов кристаллической структуры, фактов образования разномасштабных агрегатов, которые в дальнейшем могут послужить причинами ухудшения функциональных характеристик целевого материала. Комплексные исследования в данной области не только позволяют установить наличие неоднородностей и аномалий строения, но и сформулировать основные закономерности их зарождения и развития.

Несмотря на значительные успехи по созданию и совершенствованию теоретических методов исследования фазовых переходов в области наносистем, до сих пор остаются без ответа ряд вопросов, связанных прежде всего с

многомасштабными или многоуровневыми математическими моделями. С одной стороны, многоуровневые модели позволяют произвести охват кинетических процессов между нанообъектами в больших пространственных и временных масштабах. С другой, подобные модели требуют дополнительного согласования и корректировки. Актуальность диссертационной работы основывается на выше описанных причинах.

В диссертации А.Ю. Федотова сформулирована трехуровневая математическая модель для описания процессов формирования, конденсации и имплантации наноструктур в технических системах с газогенератором наночастиц. Модель может быть использована и, исходя из текста автореферата, успешно используется для исследования процессов осаждения нанопленок. Предложенная математическая модель позволила идентифицировать различные варианты формирования наноструктур на сплошных подложках кремния и пористых подложках оксида алюминия. В результате проведенных численных экспериментов был спрогнозированы вид и свойства нового перспективного наноматериала фотоэлектрического назначения с внедрением квантовых точек на основе галлия и сурьмы в область кремниевой нанопленки. Также в работе рассмотрены несколько конденсационных задач, основными объектами в которых являются наночастицы и их механизмы роста. Так, для задачи исследования наноструктур, используемых для питания растений из газовой среды, на основе анализа состава и размеров наночастиц показана эффективность технологии, а концентрация наночастиц $1,6-2,2 \text{ мг/м}^3$, не превышающая ПДК пылевых частиц, свидетельствует о безопасности предложенного способа подкормки растений.

Положения, выдвигаемые на защиту, аргументированы. Достоверность результатов и обоснованность выводов обеспечивается удовлетворительным соответствием результатов численных расчетов с имеющимися экспериментальными данными.

Представленная работа выполнена на высоком научном уровне с применением современных методов математического моделирования и основополагающих подходов для создания многоуровневых моделей в области

исследования свойств и особенностей фазовых переходов в наносистемах. Автореферат в полной мере отражает содержание диссертации. По теме диссертации имеется достаточное количество публикаций, как входящих в перечень ВАК, так и из зарубежных баз цитирования.

Имеется следующее замечание:

1) В моделях динамики частиц основополагающую роль играет выбор потенциала взаимодействия. Из автореферата не понятно чем обусловлен выбор тех или иных потенциалов для рассмотренных задач.

Указанное замечание не снижает общей высокой оценки диссертационной работы.

Подводя итог, по актуальности, научной новизне и практической значимости, уровню и количеству публикаций по теме исследования диссертационная работа А.Ю. Федотова «Многоуровневое математическое моделирование процессов формирования наноструктур в газовой среде» является законченной научной квалифицированной работой, соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (№ 842 от 24 сентября 2013г.), предъявляемым ВАК к диссертациям на соискание ученой степени доктора технических наук, 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.

Зав. лабораторией «Ультразвуковая техника и технология»

ФГБУН «Институт общей и неорганической химии

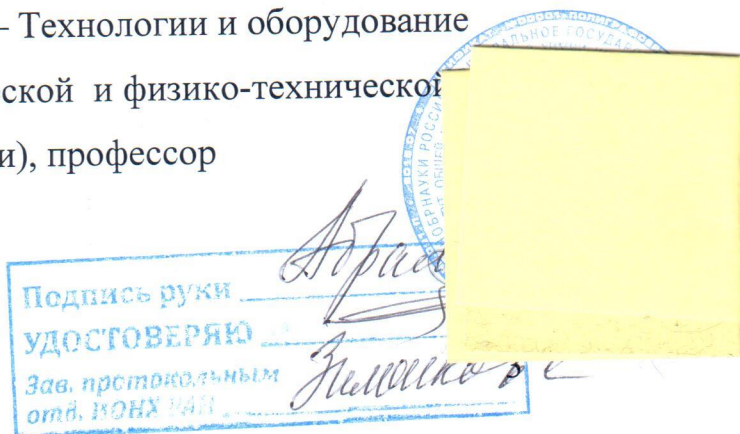
им. Н.С. Курнакова Российской академии наук»,

доктор технических наук (по специальности

05.03.01 – Технологии и оборудование

механической и физико-технической

обработки), профессор



В.О. Абрамов
Владимир Олегович

05.09.2022.