

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу Федотова Алексея Юрьевича
«Многоуровневое математическое моделирование
процессов формирования наноструктур в газовой среде»,
представленную на соискание ученой степени доктора технических
наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Актуальность темы диссертационного исследования

В современных условиях активно развивающихся высокотехнологичных производств становится особенно востребованной разработка и проектирование новых перспективных наноматериалов. Инновационное материаловедение тесно связано с использованием и внедрением таких наноструктурированных объектов, как наночастицы, нанопленки, нанокompозиты. Изготовление данных объектов происходит в атмосфере инертных газов или в условиях высокого вакуума, что обусловлено требованиями высокой чистоты формируемого материала и необходимостью контроля посторонних примесей. Механизмы взаимодействия, формирования, роста и структурирования наноэлементов, протекающие в газовых средах, требуют тщательного изучения, в том числе и теоретическими методами.

Актуальность темы исследования связана с необходимостью разработки и развития математических моделей, направленных на исследование свойств наночастиц, нанопленок, наноструктурных материалов и ориентированных на повышение качественных и функциональных характеристик готовых изделий и устройств на основе наноструктур.

Структура диссертации и основные научные результаты

Диссертационная работа состоит из введения, семи глав, заключения, перечня основных сокращений и обозначений, списка литературы из 299 источников, трех приложений. Работа изложена на 359 страницах основного текста, включает в себя 210 рисунков и 7 таблиц.

Введение содержит информацию об актуальности темы исследования, степени ее разработанности, целях и задачах, научной новизне и значимости работы, теоретической и практической полезности и положениях, выносимых на защиту. Приведено краткое описание содержания глав.

В **первой главе** представлены методология и основы построения многоуровневой математической модели для описания процессов формирования, конденсации и роста наноструктур в газовой среде. Модель состоит из уровня квантовой механики, уровня молекулярной динамики и уровня мезодинамики частиц. Уровни модели для описания характеристик исследуемых систем используются последовательно. В отличие от существующих подходов и алгоритмов предложенная в работе модель позволяет наблюдать за эволюцией наносистемы на протяжении всего ее жизненного цикла, начиная от уровня строения молекул и заканчивая верхним масштабным уровнем наноструктурных материалов. Кроме того, модель может быть адаптирована под технологические процессы изготовления или функционирования наноматериалов.

Во **второй главе** приведено описание программного комплекса, разработанного на основе математической модели. Построение программного комплекса осуществлялось по принципу модульности, по этой причине разные уровни математической модели реализованы в отдельных блоках и подпрограммах. Также в главе рассмотрены результаты тестовых расчетов, продемонстрирована корректность работы термостатов и баростатов в рассматриваемых системах. Представленные исследования на сходимость и устойчивость свидетельствуют об адекватности математической модели и правильном выборе использованных численных методов. На программный комплекс получено свидетельство о регистрации программ для ЭВМ.

Третья глава посвящена моделированию процессов образования и конденсации наноструктур, используемых для питания растений из газовой среды. Исследования были ориентированы на установление эффективности и безопасности данной технологии. В работе была подтверждена эффективность

предложенного способа подкормки за счет анализа состава формируемых наночастиц (в него вошли необходимые минеральные элементы), анализа размера (средний размер наночастиц по данным моделирования составил 37 нм, значит они способны проникать в поры растений) и анализа концентрации, которая не превысила предельно допустимое значение для пылевых частиц.

В четвертой главе содержатся результаты численных исследований механизмов агломерации и роста металлических наночастиц. Рассмотрены процессы роста наночастиц для разных составов, в том числе сочетаний различных пропорций меди, золота, серебра, цинка. Для металлических частиц была показана возможность создания многослойной структуры на примере состава серебро-золото-цинк, и продемонстрирована процедура интервального оценивания свойств формируемых наночастиц, не зависимо от распределения координат и скоростей атомов в начальный момент времени. Статистический анализ процессов образования и роста нанокластеров серебро-медь показал, что основные структурные и количественные параметры нанообъектов (средняя плотность, средняя массовая доля серебра, средний размер и концентрация наноэлементов) согласно критерию Пирсона на уровне значимости 0,2 распределены по нормальному закону.

В пятой главе приведены результаты вычислительных экспериментов по конденсации наноструктур, которые применяются в наноаэрозольных системах и пожаротушающих газогенераторах. Проведенные исследования процессов агрегации и накопления нанообъектов, образованных в аэрозольных средах, позволили вычислить основные размерные, структурные и количественные параметры формируемых наноэлементов. На основании результатов моделирования и экспериментальных данных была подтверждена эффективность работы технических систем с газогенератором наночастиц в помещениях с электрооборудованием и определен основной механизм огнеподавления.

В шестой главе представлены результаты теоретических исследований молекулярно-лучевой эпитаксии нанопленок на сплошных подложках

кристаллического кремния. При осаждении нанопленок разного состава получены различные качественные картины и механизмы роста формируемых покрытий (послойного роста Франка – ван дер Мерве, островкового роста Вольмера – Вебера, комбинированного роста Странского – Крастанова). На основе данных моделирования был спрогнозирован новый фотоэлектрический наноматериал с внедрением квантовых точек, что приводит к росту чувствительности фотодиода до 4-5 % за счёт значительного увеличения фотоотклика в диапазоне длин волн 1200-1600 нм.

В **седьмой главе** описаны результаты моделирования образования нанопленок на матрицах пористого оксида алюминия методом дискретного термического испарения порошка в условиях высокого вакуума. Методы моделирования в данной задаче были направлены на отработку технологических процессов, ориентированных на формирование массивов идентичных и упорядоченных наноструктур. Наиболее плотное заполнение пор в подложках оксида алюминия было получено при осаждении галлия на поры радиусом 5 нм и более.

В **заклучении** содержится описание основных полученных результатов и выводов по итогам выполненного исследования, приведены некоторые рекомендации по их использованию.

В **приложениях** представлены параметры потенциальных полей для рассматриваемых прикладных задач, копии свидетельства о регистрации программы для ЭВМ и патентов, акты о внедрении результатов диссертационной работы.

Степень обоснованности и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации

В диссертационной работе использованы известные положения квантовой механики, механики дискретных сред, адаптированы и апробированы численные методы интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Решен ряд тестовых задач, показавший хорошее соответствие данных моделирования ранее известным из литературы (работа баростатов и термостатов,

распределение радиальных функций, геометрическая конфигурация стандартных молекул, автокорреляционная функция скоростей атомов). Проведено исследование устойчивости модели по отношению к начальным данным. Сходимость решений подтверждается сравнением результатов моделирования, полученных с разным шагом интегрирования по времени. Результаты расчетов соответствуют экспериментальным данным, что в совокупности с выше указанными факторами свидетельствует о **достоверности** проведенных исследований.

Защищаемые положения диссертации в необходимой степени **обоснованы**. Основные научные положения и выводы, представленные в заключении, а также рекомендации по применению результатов и дальнейшего развития математических моделей соответствуют содержанию глав диссертации и являются аргументированными.

Научная новизна основных результатов работы, их теоретическая и практическая значимость

Научная новизна работы заключается в предложенном подходе к формулировке многоуровневой модели, включающей оригинальный метод мезодинамики частиц, описывающий процессы конденсации и агломерации наноструктур с учетом их вращательного движения. С применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента проведены комплексные исследования прикладных технических наносистем с газогенератором наночастиц, в которых наноструктуры и нанопленки используются для повышения качественных и функциональных характеристик наноматериалов.

Теоретическая значимость диссертации определяется развитием многоуровневых моделей исследования наноматериалов.

Практическая значимость работы обусловлена тем, что разработанные автором математические модели и созданный на их основе программный комплекс могут быть использованы при разработке новых перспективных наноматериалов и оптимизации технологических процессов их изготовления.

Опубликование и апробация основных результатов исследований, представленных в диссертации

Основные результаты исследований, представленные в диссертации, опубликованы в 94 работах. В данный список входят 12 статей из ведущих научных журналов, входящих в перечень рецензируемых научных изданий, установленный Министерством образования и науки Российской Федерации для представления результатов докторских диссертаций. По теме диссертации имеется 26 публикаций, включенных в международные базы цитирования (WoS, Scopus, RSCI), 2 патента, свидетельство о регистрации программы для ЭВМ.

Результаты, выносимые на защиту, прошли широкую апробацию на семинарах, конференциях, форумах различного уровня, в том числе на 15 международных, 20 всероссийских и региональных научных конференциях.

Соответствие содержания автореферата содержанию диссертации и темы диссертации заявленной научной специальности

Диссертация и автореферат имеют единую структуру, обладают завершенностью в целом. Автореферат полностью отражает содержание диссертации и содержит основные цели и выводы, изложенные в диссертации.

Содержание диссертации и автореферата и основные положения, представленные в них, соответствуют паспорту специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, а именно следующим областям исследования:

- п. 4 «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента»;
- п. 5 «Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента»;
- п. 8 «Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования».

Замечания по диссертации

1. В первой главе текст диссертации содержит подробное изложение теоретических основ используемых в разработанном программном комплексе методов. На наш взгляд, можно было ограничиться ссылками на классические монографии по квантовой механике, молекулярной динамике и т.д. В то же время важные параметры моделирования – например, уровень учета электронной корреляции и используемый базис при расчете атомных зарядов методом квантовой химии – не всегда ясно указаны автором.

2. При моделировании процессов формирования наноструктур, используемых для питания растений из газовой среды, выбранные размеры области моделирования следовало обосновать более подробно, так как динамика образования наноструктур может существенно зависеть от их размеров.

3. При моделировании процессов формирования и роста металлических наноструктур в вакууме выбранные параметры моделирования нуждаются в более детальном обосновании. Например, распределение формируемых наноструктур по числу атомом и массе может существенно зависеть от объемной концентрации испаряемых атомов.

Указанные замечания не снижают общей положительной оценки диссертации.

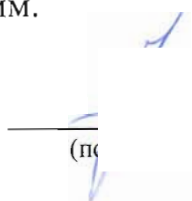
Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней

Диссертационная работа Федотова Алексея Юрьевича «Многоуровневое математическое моделирование процессов формирования наноструктур в газовой среде» является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на актуальную тему, в которой на основании проведенных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области построения многоуровневых моделей для описания процессов формирования наноструктур в газовых средах, имеющее важное значение для развития механики дискретных сред.

Результаты научных исследований, выполненных автором, имеют теоретическую и практическую значимость. Полученные результаты достоверны, выводы и заключения обоснованы. Материалы диссертации в достаточной степени опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК Российской Федерации и входящих в зарубежные базы цитирования.

Диссертация соответствует паспорту специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, удовлетворяет всем требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней (утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г.), предъявляемым к докторским диссертациям, 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.

Д-р физ.-мат. наук

 / Ф.В. Григорьев
(расшифровка подписи)

Отзыв составлен: 11.07.2022 г.

Григорьев Федор Васильевич, доктор физико-математических наук (специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ), ведущий научный сотрудник лаборатории вычислительных систем и прикладных технологий программирования Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

119991, Россия, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, дом 1, стр. 4,
телефон: +7 (495) 939-36-53, e-mail: fedor.grigoriev@gmail.com.

Подпись официального оппонента, д-ра физ.-мат. наук Ф.В. Григорьева удостоверяю:

Ученый секретарь НИВЦ

МГУ имени М.В. Ломоносова,

канд. физ.-мат. наук


О.В.
Подпись)
8 

*Подпись Григорьева Ф.В. за
Ведущий специалист*