

Отзыв
официального оппонента

на диссертацию 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

Диссертация Федотова Алексея Юрьевича посвящена решению актуальной проблемы – разработке многоуровневой математической модели для описания процессов конденсации, формирования, роста и внедрения наноструктур в технических системах с газогенератором наночастиц для повышения качественных и функциональных характеристик наноматериалов и ее реализации в программном комплексе.

Актуальность диссертационной работы сомнения не вызывает. Имитационное компьютерное моделирование сложных процессов в материальных системах, связанных со структурными и фазовыми превращениями, а также функционированием технических объектов, в настоящее время является мощным средством для обнаружения неизвестных закономерностей эволюции таких систем, динамики их развития, устойчивости. Развитие моделей численного моделирования для исследования процессов формирования и эволюции наноразмерных материальных систем представляется важным в теоретическом и прикладном отношениях.

В диссертации А.Ю. Федотова создана комплексная математическая модель, дополненная впервые предложенным методом мезодинамики частиц с возможностью увеличения пространственного и временного масштабов и, в отличие от существующих моделей, не требующая поиска дополнительных параметров силового взаимодействия.

Диссертация состоит из введения, семи глав и заключения, списка литературы, трех приложений, изложенных на 371 страницах машинописного текста, включая 210 рисунков, 7 таблиц, приложений на 11 страницах. Список литературы из 299 наименований.

Во введении обосновывается актуальность направления исследования, сформулированы цели и основные задачи работы, указаны выносимые на защиту положения, а также полученные в диссертации новые научные результаты. Представлено обоснование новизны и практической ценности результатов диссертации, отмечен личный вклад диссертанта в их получении, приведены сведения об апробации работы, приведено краткое содержание разделов и приложений диссертации.

В первой главе рассмотрены вопросы построения, верификации многоуровневой математической модели для задачи формирования наноструктур в газовой среде. Описана общая структурная схема модели. Представлена физико-математическая постановка задачи в рамках квантовой механики и молекулярной динамики. Обсуждены возможные типы граничных условий, применяемых при исследовании наносистем. Приведены парные и многочастичные потенциалы взаимодействия атомов в материальных системах.

Приведены разработанные алгоритмы мезодинамики частиц, алгоритмы термостатов и баростатов для поддержания требуемых термодинамических условий в моделируемых системах. Обсуждены численные методы различного порядка точности, которые могут быть использованы для решения задач взаимодействия как атомов в нанобъектах, так и самих нанобъектов между собой.

Во второй главе описан разработанный диссертантом проблемно-адаптированный программно-инструментальный комплекс для теоретических исследований и моделирования основополагающих механизмов формирования, конденсации, роста и взаимодействия наноструктур в газовой среде. Изложена структурная схема созданного программного комплекса. Описаны функции различных блоков и модулей комплекса. Описаны основные скрипты и алгоритмы анализа результатов. Представлены описания подзадач и программных блоков, реализующих их решение в рамках моделирования образования наноразмерных объектов из газовой фазы. Продемонстрированы результаты исследований численных решений задач на сходимость и устойчивость. Рассмотрены результаты тестовых расчётов, представлены примеры работы термостатов и баростатов. Приведено сопоставление решений тестовых задач с ранее известными теоретическими и экспериментальными данными. Показано, что программный комплекс, реализующий разработанную многоуровневую модель формирования наноструктур в газовой среде, позволяет получать результаты с относительной погрешностью порядка 2-4 %. Представленные во второй главе результаты подтверждают адекватность и корректность разработанной математической модели формирования наноструктур и свидетельствуют о достоверности полученных результатов моделирования.

В третьей главе описана постановка задачи об образовании, конденсации и роста наноструктур, используемых для питания растений из газовой среды. Приведен анализ состава газовой среды, который характерен для продуктов горения специальных топливных таблеток в газогенераторе для питания растений. Определены равновесные

молекулярные конфигурации основных элементов, находящихся в наносистеме после сгорания таблеток смесей минеральных удобрений. Вычислены основные количественные и структурные свойства, а также химический состав нанообъектов. Показаны результаты исследования равномерности распределения наночастиц и свободных молекул композиционного состава внутри наносистемы. Рассмотрена возможность управления процессами агломерации и интенсивностью роста наноструктур данного состава при помощи добавления в наносистему атомов серебра. Приведены полученные диссертантом экспериментальные результаты по осаждению наноразмерных элементов из газовой среды на стеклянную поверхность. Показано, что результаты моделирования состава и содержания, формируемых наночастиц на основе разработанной модели согласуются с экспериментальными результатами, полученными в результате исследований диссертанта.

В четвертой главе приведены результаты численного исследования процессов агломерации, конденсации и роста, металлических наноструктур, сформированных атомами серебра, меди, цинка и золота. Представлены результаты расчетов характеристик образующихся наночастиц $Ag_{40}Cu_{60}$, $Ag_{26}Cu_{35}$, $Ag_{26}Cu_{18}$, $Ag_{19}Cu_{26}$ и $Ag_{16}Cu_{34}$, $Ag_{33}Zn_5$, $Ag_{29}Zn_7$, $Ag_{31}Zn_{10}$, $Ag_{57}Zn_{17}$ и $Ag_{55}Zn_{22}$ и Zn-Zn. Показаны результаты исследований равномерности и однородности полученных композиционных составов.

Рассмотрены траектории перемещений наноструктур разного размера. Проведен анализ структуры наночастиц. Представлены результаты моделирования двух- и трехкомпонентных наноструктур. Показано, что полученные данные о структуре серебряно-цинковых нанообъектов качественно согласуются с результатами, приведенными в литературе.

Представлена статистическая модель для анализа результатов исследования и оценки параметров наноструктур. Приведены результаты, полученные с ее использованием для оценки усредненной плотности, средней массовой доли серебра, среднего диаметра формирующихся частиц, количества нанообъектов в расчетной ячейке.

В пятой главе рассмотрена постановка задачи о формировании наноструктур, которые применяются в наноаэрозольных системах и газогенераторах пожаротушения.

Проведено численное исследование механизмов образования и роста нанообъектов, формируемых в аэрозольных средах. Рассчитаны основные размерные, структурные и количественные параметры наноэлементов. Представлены результаты натуральных экспериментов по осаждению наноаэрозольных частиц на поверхность. Показано

удовлетворительное количественное согласие экспериментальных и теоретических данных, полученных в рамках многоуровневого моделирования.

В шестой главе описана постановка задачи молекулярно-лучевой эпитаксии нанопленок на темплаты. Приведены картины, возникающие при напылении различных комбинаций химических элементов на темплаты. Проведен анализ процессов осаждения атомов кремния, галлия, золота, германия, сурьмы и индия. Представлены результаты моделирования динамики процессов и механизмов роста наноструктур на сплошных подложках Si(100). Проведен анализ основных параметров и свойств нанокластеров, служащих основой для структурных элементов квантовых точек и фотопреобразователей специального назначения.

В седьмой главе приведена постановка задачи процессов осаждения и формирования нанопленок на основе пористых темплатов из оксида алюминия. Представлены алгоритм ее решения, а также результаты анализа возможных вариантов эпитаксиального роста наноструктурированных покрытий, образованных атомами золота, серебра, титана, железа, галлия, меди, германия, палладия и платины. Показаны отличия протекающих процессов взаимодействия нанообъектов и механизмов зарастивания пор в зависимости от параметров пористой структуры подложек.

С помощью моделирования определены параметры и построены графические зависимости, описывающие степень и характер заполнения пор. Приведены результаты исследования ростовых процессов наноструктур и нанослоев для пор разного размера. Определены прогнозные численные значения степени кристаллизации и аморфности структуры подложки и формируемых нанопленок.

В заключении сформулированы обобщенные результаты диссертации по разработке математических моделей, численных методов, а также основные результаты исследования наноструктур в газовых средах. Сформулированы наиболее существенные положения работы и выводы проведенных исследований.

В приложениях А, Б, В приведены данные о численных значениях коэффициентов и параметров структурных элементов наносистем, использованных при моделировании; скан свидетельства о регистрации программного комплекса, акты внедрения результатов диссертационной работы.

Научная новизна диссертации А.Ю. Федотова заключается:

1. В разработке вычислительной модели, дополненной методом мезодинамики частиц, позволяющей описывать формирование наноструктур в газовой среде. Предложенный вариант модели позволяет выполнять анализ процессов в газовых системах с увеличенными пространственным и временным масштабами без введения дополнительных параметров силового взаимодействия.

2. В создании программного комплекса, включающего оригинальную программу для мезодинамических расчетов наночастиц и визуализации результатов, блоки согласования данных, многофункциональные алгоритмы анализа структурных и размерных свойств наночастиц, нанопленок, подложек.

3. В создании вычислительной методики, позволяющей определять параметры технических систем, которые обеспечивают управление механизмами агломерации наноструктур и рациональные режимы питания растений из газовой среды.

4. В научном обосновании возможности применения математического моделирования для прогнозирования образования структуры наночастиц (оболочечной, смешанной, слоистой) в промышленных технологических системах термического синтеза с учетом законов распределения свойств наноэлементов.

5. Впервые на основе анализа кумулятивных процессов, протекающих в наноаэрозольных системах, выявлены ингибирующие механизмы работы пожаротушающего газогенератора и подтверждена эффективность его эксплуатации в помещениях с вычислительной техникой.

6. При помощи математического моделирования установлены различные варианты формирования наноструктур и нанопленок на темплатах кремния - Si (100 для технологии молекулярно-лучевой эпитаксии). Предложен вид и структура нового нанокompозита с внедрением квантовых точек.

7. Разработана математическая методика для системной спецификации результатов формирования наноструктур на пористых подложках. Продемонстрирована возможность создания наноэлементов с заданной структурой, в том числе рельефных, равномерных с небольшим проседанием в области поры, островных, с отверстием над порой нанопленок.

Практическая значимость диссертации А.Ю. Федотова заключается в создании программного комплекса для ЭВМ для оптимизации и проектирования технологии получения из газовой фазы новых перспективных наноматериалов с управляемыми механическими, термоэлектрическими, оптическими и фотолюминесцентными свойствами, оптимизации процессов электронно-лучевой эпитаксии нанопленок на

пористые темплаты из оксида алюминия. Программный комплекс может быть использован в научно-технических центрах, опытно-конструкторских предприятиях и промышленных лабораториях для исследования процессов получения наноструктур из газовых сред.

Обоснованность и достоверность результатов и выводов, полученных в диссертационной работе, подтверждается математической корректностью постановок задач, качественным и количественным согласием полученных теоретических результатов с экспериментальными данными, результатами тестовых расчетов, демонстрирующих сходимость численных решений, устойчивость полученных решений, согласием результатов моделирования с полученными диссертантом экспериментальными данными, а также экспериментальными данными других авторов.

Содержание диссертации в достаточной степени отражено в публикациях автора. Результаты опубликованы в 94 печатных работах, включая 7 глав в книгах и монографиях, 2 патента, 1 свидетельство о регистрации программного комплекса, 26 публикаций, включенных в зарубежные базы цитирования Web of Science, Scopus, Russian Science Citation Index, 12 статей в изданиях из Перечня рецензируемых научных журналов ВАК, 49 статей в сборниках научных трудов и материалов конференций.

Результаты диссертации А. Ю. Федотова прошли широкую апробацию на Российских и международных конференциях.

Автореферат диссертации соответствует ее содержанию.

В диссертации А. Ю. Федотова присутствуют оригинальные научные результаты, **соответствующие паспорту специальности 1.1.2** – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, относящиеся к следующим областям:

- разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений (оригинальная математическая модель, алгоритм и метод решения задачи имитационного моделирования ударно-волнового нагружения тел);
- комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента (развитие метода мезодинамики частиц в сочетании с методом молекулярной динамики и полуэмпирическими методами решения задач квантовой механики);

- реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента (созданный оригинальный программный комплекс, защищенный свидетельством гос. регистрации).

Основные результаты диссертации А. Ю. Федотова относятся к следующим **областям исследований, включенным в паспорт специальности 1.1.2** – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ:

- 1) Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений.
- 2) Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.
- 3) Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.

Диссертационная работа А.Ю. Федотова хорошо структурирована, написана ясным научным языком, в достаточной мере проиллюстрирована.

По содержанию диссертации имеются следующие **замечания**:

1. Отметим, что величины геометрических и физических параметров в натуральных экспериментах, всегда измеряются с определенной погрешностью. Следовало бы указать погрешности измеренных диаметров размеров наночастиц, приведенных в главе 3 диссертации, с усредненными значениями которых сопоставляются результаты моделирования.

2. Выводы диссертации 3 и 5, содержащие формулировки новых научных результатов, по-видимому, не вполне относятся к специальности 1.1.2. Эти выводы касаются результатов иных научных специальностей, хотя и получены с использованием разработанных диссертантом оригинальных моделей и методов. Сами исследования, выполненные диссертантом, несомненно, соответствуют области исследования: «Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента».

Приведенные замечания не снижают высокой оценки диссертационной работы, которая выполнена на актуальную тему, обладает научной новизной, практической ценностью, является законченной научно-исследовательской работой, удовлетворяющей требованиям ВАК, предъявляемым к докторским диссертациям.

Таким образом, диссертация: «Многоуровневое математическое моделирование процессов формирования наноструктур в газовой среде» по содержанию, объему выполненных исследований, новизне, научной и практической значимости результатов полностью соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения научных степеней» с изменениями и дополнениями от 11 сентября 2021 г., утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. (ред. от 01.10.2018) N 842, (П.9) к докторским диссертациям, а ее автор, Федотов Алексей Юрьевич, заслуживает присуждения ей ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.1.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент, _____ Скрипняк Владимир Альбертович

доктор физико-математических наук,
профессор,
заведующий кафедрой механики деформируемого твердого тела,
Федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский
Томский государственный университет».
Адрес: Российская Федерация,
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36
www.tsu.ru
E-mail: skrp@ftf.tsu.ru
« 16» июня 2022 г.



УДОСТОВЕРЯЮ
ДОКУМЕНТОВЕД
ЕНТ ТЕЛАМИ

И. В. АНДРИЕНКО