

**ОТЗЫВ на автореферат диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
Григорьева Федора Васильевича
на тему: «Математическое моделирование процесса напыления
тонких пленок, их структуры и свойств»
по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ»**

В автореферате Григорьева Ф.В. кратко изложены результаты диссертационного исследования, темой которого является моделирование напыления тонких пленок и расчет по результатам моделирования их свойств. Актуальность работы обусловлена широким использованием тонких пленок в составе многослойных оптических покрытий, являющихся основным структурным элементом современных оптических и оптоэлектронных устройств. В качестве метода моделирования выбрана классическая молекулярная динамика, что обусловлено, с одной стороны, необходимостью описания физико-химических процессов, сопровождающих рост пленки, на атомистическом уровне, а с другой стороны – необходимостью описания наномасштабных неоднородностей структуры, влияющих на оптические свойства тонких пленка.

В качестве пленкообразующего материала выбран диоксид кремния, что обусловлено его широким применением в оптике. Для расчета энергии межатомного взаимодействия разработано силовое поле, параметризованное таким образом, чтобы воспроизводить структурные свойства стеклообразного диоксида кремния.

В работе проведено моделирование роста тонких пленок в зависимости от условий напыления: энергии напыляемых атомов, угла между потоком атомов и нормалью к подложке, температуры подложки. Разработан метод моделирования процедуры отжига, применяемой после

окончания напыления для улучшения технологических характеристик пленки.

Значительное внимание в работе уделено сравнению экспериментальных и расчетных результатов. Показано, что в соответствии с экспериментом напыление с высокой энергией приводит к формированию плотных и однородных пленок, в то время как при напылении с низкой энергией в пленке образуются поры различных размера и формы. Отжиг приводит к уменьшению плотности пленок и увеличению ее толщины. Изменение показателя преломления, рассчитанное по его линейной корреляции с плотностью, находится в интервале экспериментальных значений.

Автором разработан ряд оригинальных методов расчета таких важных структурных свойств, как шероховатость, пористость, статистика структурных колец. Эти методы ориентированы на работу с атомистическими кластерами, содержащими несколько сот тысяч атомов и имеющими характерный размер до сотни нанометров.

Достоверность вынесенных на защиту положений обусловлена использованием известных моделей, методов и уравнений молекулярной динамики и подтверждается воспроизведением при моделировании известных характеристик стеклообразного диоксида кремния, экспериментальной проверкой предсказанных свойств напыленных тонких пленок, а также сравнением результатов проведенных численных экспериментов с результатами моделирования и экспериментов, известными из литературы.

Замечаний к автореферату нет.

Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (по физико-математическим наукам), а

также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Таким образом, соискатель Григорьев Федор Васильевич заслуживает присуждения ученой степени физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

д.х.н., профессор, химический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова,
кафедра физической химии

Немухин Александр Владимирович

20.11.2019

Контактные данные:

тел.: 8(495)9394840 e-mail: anem@lcc.chem.msu.ru

Адрес места работы:

119234, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, МГУ, дом 1.

Подпись сотрудника МГУ имени М. В. Ломоносова Немухина Александра Владимировича удостоверяю:

