

ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию 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»

С Федором Григорьевым мы познакомились 24 сентября 2012 г. во время моего доклада в НИВЦ МГУ на семинаре Александра Владимировича Тихонравова. В 2017 и в 2019 годах Федор выступал с докладами по теме диссертации у нас в Новом Афоне, на Российском Симпозиуме «Фундаментальные основы атомистического моделирования». Результаты диссертационной работы докладывались им на объединенном семинаре сотрудников отдела №14 ОИВТ РАН, международной лаборатории САММА ВШЭ и лаборатории суперкомпьютерных методов в физике конденсированного состояния МФТИ, а также в 2019 году на неформальной предзащите в Новом Афоне. В процессе общения с Федором у меня сложилось впечатление, что уровень его научной квалификации соответствует степени доктора наук. Непосредственное знакомство с диссертацией и, в особенности, обсуждение с Фёдором её результатов лишь укрепили меня в этом мнении и повысили мою оценку научного уровня Фёдора.

Представленная диссертационная работа открывает новое научное направление: предсказательное моделирование свойств тонких пленок в зависимости от технологических параметров их изготовления – распределения по энергии и скоростям осаждаемых атомов, температуры подложки, угла осаждения и др. Для этого были развиты математические методы, позволяющие моделировать напыление тонких оптических

покрытий, рассчитывать их структурные и механические свойства, в том числе пористость и статистику структурных колец. Методы ориентированы на использование технологий параллельных вычислений, что впервые позволило достичь технологически значимых размеров кластеров моделирования, порядка 100 нм, при использовании метода классической молекулярной динамики с явным представлением всех атомов. Кластеры такого размера необходимы для расчета шероховатости, напряжений в пленках, исследования характерных структур высокопористых пленок.

Наиболее существенными результатами, полученными в работе, представляются следующие:

1) Разработано двухчастичное эмпирическое силовое поле DESIL для диоксида кремния, воспроизводящее структурные (Табл. 2, стр. 42,) и механические свойства стеклообразной фазы (Табл. 9, 10, стр. 122, 123). Силовое поле DESIL обладает высокой численной эффективностью, позволяет моделировать напыление пленок при высоких, до 10 эВ, энергиях осаждаемых атомов. На основе DESIL может быть создано семейство силовых полей для других пленкообразующих материалов.

Достоверность полученных с помощью силового поля DESIL результатов обусловлена сравнением рассчитанных и экспериментальных структурных и механических характеристик стеклообразного диоксида кремния, а также сравнением рассчитанных характеристик с известными из литературы результатами моделирования. Величина плотности пленки диоксида кремния, полученная моделированием высокоэнергетического напыления с использованием силового поля DESIL, подтверждена экспериментально при напылении на подложку из кварцевого стекла КУ-1 методом реактивного ионно-лучевого распыления с ионным ассистированием (Рис. 48, стр.115-116).

На мой взгляд, автор недостаточное внимание уделил описанию структуры стеклообразной и аморфной фаз конденсированного состояния, их сходства и различий с кристаллической фазой.

Исследование зависимости результатов от шага интегрирования уравнений движения при напылении атомами с энергией 10 эВ требует более подробного описания в сравнении с представленным в диссертации. Дело в том, что при увеличении энергии атомов требуется уменьшать шаг интегрирования, чтобы изменение энергии на одном шаге по-прежнему оставалось много меньше самой энергии (по модулю).

2) Проведено моделирование напряжений в пленках стеклообразного диоксида кремния. Показано уменьшение абсолютных величин напряжений с ростом толщины пленки при высокоэнергетическом напылении. С ростом температуры подложки напряжение в пленке падает по абсолютной величине. С увеличением энергии напыляемых атомов кремния величина напряжений растет.

Достоверность полученных результатов обусловлена сравнением рассчитанных и экспериментальных величин модулей Юнга, объемного модуля упругости, коэффициента Пуассона.

Полученные абсолютные значения напряжения, порядка 10^2 МПа, находятся в интервале экспериментальных значений.

3) Проведено моделирование пленок с высокой пористостью, формируемых при напылении под углами более 70° между потоком атомов и нормалью к поверхности (glancing angle deposition, GLAD).

В соответствии с экспериментом показано формирование в пленках наклонных отдельных колончатых структур. Воспроизведена экспериментальная плотность GLAD-пленок и их показатель преломления. При GLAD-напылении с изменением знака угла осаждения воспроизведено формирование древовидных и зигзагообразных структур в зависимости от частоты альтернирования.

Предсказана возможность формирования пленки диоксида кремния с низким отражением при чередовании больших и малых углов напыления. При таком напылении пленка с высокой пористостью и низким показателем преломления «запечатывается» тонким – 20-30 нм – слоем плотной пленки, предотвращающим деградацию фазы с высокой пористостью при перенесении покрытия из вакуумной камеры в атмосферу (стр. 165, 166, Рис. 72, 73).

4) Проведено моделирование пористости пленок. Показано, что в пленках SiO_2 , полученных высокоэнергетическим напылением, концентрация пор, способных вместить малые молекулы и атомы и размером более 0,2 нм, не превышает 10^{-3} %. В случае низкоэнергетического напыления поры, способные вместить атомы и малые молекулы, занимают до нескольких процентов объема. Разработаны эмпирические методы, позволяющие рассчитывать шероховатость и распределение структурных колец по числу атомов в кластере с характерным размером до нескольких десятков нанометров (Рис. 23, 24, стр. 79, 80). Эти методы могут использоваться для исследования структуры различных состояний конденсированной фазы вещества, в том числе аморфных пленок, полученных быстрым охлаждением.

При расчете пористости достоверность полученных результатов обусловлена исследованием зависимостей полученных распределений от основного параметра метода – числа попыток найти пору. Относительное изменение рассчитываемых характеристик пленки с ростом числа попыток составляет менее одного процента.

Достоверность всех описанных результатов обусловлена:

1) Проверкой устойчивости результатов моделирования при варьировании параметров молекулярно-динамического моделирования: временные интервалы между масштабированием скоростей при использовании термостата, временные интервалы между масштабированием координат и сжимаемость при использовании

баростатов, радиус обрезания взаимодействия Ван-дер-Ваальса, параметры метода particles mesh Ewald, используемого для расчета электростатических взаимодействий.

2) Проверкой достижения равновесия моделируемой системы по потенциальной и кинетической энергии, объему (при моделировании в NPT ансамбле), давлению (при моделировании в NVT ансамбле).

3) Усреднением рассчитанных структурных и механических характеристик пленки по различным наборам случайных чисел, используемых для задания начальных координат напыляемых атомов.

К сожалению, в диссертационной работе отсутствуют попытки замкнуть результаты молекулярной динамики аналитическими подходами и формульным описанием этих результатов. Это несколько снижает возможность широкого использования полученных результатов.

Практическая значимость работы обусловлена широким применением тонких пленок как основного структурного элемента многослойных оптических покрытий, широко используемых в современных оптических и оптоэлектронных устройствах. Разработанные математические методы позволяют исследовать зависимости структурных и механических свойств пленок, важных с точки зрения практического использования, от технологически параметров процесса напыления, и в перспективе помогут усовершенствовать технологии проектирования и изготовления новых оптических покрытий с заданными свойствами, снизить их стоимость за счет частичной замены натуральных экспериментальных исследований численными.

В работе не рассматривается возможность напыления пленки кластерами, содержащими до нескольких десятков атомов. Эта технология развивается в корпорации Sony в сопровождении молекулярным моделированием.

Указанные в отзыве замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. 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».

Официальный оппонент:

д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник, и. о. заведующего Международной лабораторией суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики».

Норман Генри Эдгарович

Норман
29 декабря 2019 г. (подпись, дата)

Контактные данные: тел. 8(495)7729590, доб. 15016 e-mail gnorman@hse.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена диссертация: 01.04.08 – физика и химия плазмы

Адрес места работы: 101000, Россия, г. Москва, ул. Мясницкая, дом 20, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Международная лаборатория суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа.
тел.: 8(495)7729590, доб. 15016 e-mail: gnorman@hse.ru
101000, г. Москва, ул. Мясницкая, д. 20.

Подпись сотрудника Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» Нормана Генри Эдгаровича удостоверяю:

Кадровый работник, либо ученый секретарь ученого совета
научного/образовательного учреждения

Подпись заверяю

6

