

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. изложено содержание диссертационного исследования, посвященного разработке метода математического моделирования процесса напыления тонких пленок, а также расчету их структуры и свойств методом молекулярной динамики.

Актуальность работы обусловлена широким применением многослойных структур в бытовых и промышленных устройствах различного назначения. Математическое моделирование на микроскопическом уровне позволяет исследовать физико-химические процессы, сопровождающие рост пленки, а также устанавливать зависимости структуры и свойств тонких пленок от параметров напыления в вакуумной камере.

Выбор классической молекулярной динамики (МД) в качестве основного метода моделирования представляется адекватным поставленным целям и задачам, так как этот метод позволяет конструировать и исследовать кластеры тонких пленок требуемых размеров, до нескольких десятков нанометров. На основе моделирования методом классической МД и с учетом экспериментальных условий автором разработаны модели подложки и источника осаждаемых атомов. Информация о декартовых координатах атомов в полученных кластерах позволяет рассчитывать такие важные характеристики пленки, как шероховатость, пористость и др.

Новизна рецензируемой диссертационной работы состоит в том, что в ней, в частности, разработано применение технологий параллельных

вычислений и суперкомпьютеров для атомистического моделирования тонких пленок. Это позволило впервые построить атомистические модели кластеров тонких пленок толщиной порядка 100 нм, что близко к технологической толщине одного слоя многослойных структур, используемых в различных светоизлучающих и фотовольтаических устройствах. Автором разработаны оригинальные методы расчета структурных характеристик пленки, позволяющие работать с кластерами, содержащими порядка сотен тысяч и даже миллионов атомов.

Значительное внимание в диссертационной работе уделено сравнению экспериментальных и рассчитанных параметров пленки. Показано, что используемые методы моделирования позволяют воспроизвести экспериментальные особенности структуры тонких пленок, определяемые энергией напыляемых атомов. В соответствии с экспериментом напыление с высокой энергией формирует плотные и однородные пленки, в то время как низкоэнергетическое напыление приводит к образованию в пленке пор различного размера и формы. Разработана модель пост-процессинга пленки, в рамках которой продемонстрировано уменьшение плотности пленки, концентрации в ней точечных дефектов, а также увеличение ее толщины. Изменение показателя преломления пленки, рассчитанное через изменение ее плотности, находится в интервале экспериментальных значений.

Практическая значимость диссертационной работы обусловлена возможностью применения разработанных методов для исследования зависимости практически важных структурных и механических характеристик пленок от технологических параметров процесса напыления. Моделирование с использованием разработанных автором методов позволит частично заменить натурные эксперименты численными на основе применения современных суперкомпьютерных технологий вычислительного эксперимента.

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».

Главный научный сотрудник Центра фотохимии Федерального государственного учреждения "Федеральный научно-исследовательский центр "Кристаллография и фотоника" Российской академии наук", доктор химических наук, профессор РАН

Багатурьянц Александр Александрович

19 декабря 2019 г.

Контактные данные:

тел.: 8 (916)5317022, e-mail: sasha@photonics.ru

Адрес места работы: Москва. 119421, ул. Новаторов, д.7а, корп.1.

Подпись сотрудника Центра Фотохимии Александра Александровича

Багатурьянца удостоверяю:

Ученый секретарь ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН,