

ОТЗЫВ
официального оппонента
на диссертационную работу Авилова Святослава Владимировича
«Формирование иерархических структур тетраподов оксида цинка»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности
01.04.07 – физика конденсированного состояния

Оксид цинка является широкозонным прямозонным полупроводником, наноструктуры которого широко применяются в опто- и наноэлектронике. Высока востребованность оксида цинка для солнечной энергетики благодаря уникальному сочетанию термодинамических, оптических и электрофизических свойств.

Особый интерес представляют иерархические наноформы оксида цинка, позволяющие повышать производительность солнечных элементов и других приборов оптоэлектроники, работающих в широком диапазоне длин волн от ультрафиолета до видимого света.

Семейство мультиподов как новый класс иерархических намоматериалов представляет собой инновационный резерв для наноэлектроники и биотехнологий. Наиболее изучаемым представителем этого классам материалов является тетрапод оксида цинка.

Методы моделирования морфогенеза иерархических 3-D наноструктур находятся на начальном этапе развития, но их разработка необходима для предсказания свойств новых материалов. Отсутствие теории образования иерархических структур сдерживает изучение функциональных свойств и применение структур данного типа на практике.

Поэтому работа Авилова Святослава Владимировича, посвященная исследованию формирования тетраподов оксида цинка, как модельных представителей иерархических наноструктур, является **актуальной** как для теоретического осмыслиения формирования иерархических наноформ, так и для развития методов их практического применения.

Диссертационная работа изложена на 157 страницах, состоит из введения, 5 глав, заключения, списка литературы из 247 наименований и 2 приложений, включает 83 рисунка и 16 таблиц.

Работа Авилова С.В. представляет собой гармоничное объединение теоретических и экспериментальных исследований, результаты которых рассматриваются с единых позиций самоорганизации. Полученные экспериментальные данные используются как основа для разработанных

подходов к моделированию.

Научная новизна результатов работы обусловлена следующим:

- Решение поставленной перед диссертационной работой цели по созданию обобщенной модели формирования тетраподов оксида цинка впервые реализовано Авиловым Святославом Владимировичем с позиции теории самоорганизации динамической системы. Автором убедительно показано, что формирование тетраподов происходит в условиях далеких от состояния термодинамического равновесия и управляется внешними термодинамическими параметрами, что характеризует формирование тетраподов как процесс самоорганизации.

- На основе современных вычислительных методов, автором приведены всесторонние и глубокие основания структурирования полиморфных модификаций оксида цинка в условиях хаоса реакционной среды газотранспортного синтеза на этапе образования наноразмерных кластеров оксида цинка. На основе теоретических исследований введено понятие об октаэдрическом центре формирования тетрапода оксида цинка, что аргументированно подтверждает существующие гипотезы о возникновении тетраподов из наноразмерного ядра со структурой сфалерита.

- Впервые предложен механизм нанофазного полиморфного перехода при сосуществовании двух кристаллических форм — сфалерита и вюрцита при формировании микро- и наноформ оксида цинка.

- Следует особо отметить, что автором в диссертационной работе впервые предложена неклассическая модель механизма образования тетрапода, включающая этап формирования иерархически структурированной перколоационной системы. В процессе моделирования обнаружено и математически охарактеризовано новое фундаментальное свойство иерархическихnanoструктур — мультилицирование.

- На основе топологического описания управляемой симметрией наноразмерного ядра полиморфной трансформации оксида цинка сфалерит – вюрцит разработан уникальный метод эффективного моделирования самопроизвольного формирования иерархических наноформ различной сложности структурной организации.

Достоверность полученных результатов определяется использованием профессионального лабораторного экспериментального оборудования, лицензионных программных пакетов для проведения оценочных квантовохимических расчетов и совпадением результатов моделирования с использованием разработанных зарегистрированных программных пакетов с экспериментальными данными, полученными ведущими исследовательскими институтами и лабораториями, исследующими

формирование тетраподов оксида цинка и иерархических наноструктур.

Результаты работы обладают **научной и практической значимостью**:

- Тетраподы оксида цинка синтезируются и в подавляющем числе случаев используются на практике как массивы хаотически распределенных в пространстве наноформ. Возможности разработанного численного метода интерактивно в реальном времени моделировать формирование пространственно-распределенных массивов иерархических структур тетраподов, оптимально и эффективно отражая кинетику процесса их формирования при фазовом переходе газ-твердое тело, позволят более эффективно моделировать устройство и предсказывать свойства оптоэлектронных приборов на основе тетраподов оксида цинка.

- Продемонстрированное в диссертационной работе развитие разработанного для тетраподов нелинейного подхода до метода описания дендритных кристаллов и их массивов явно указывает на вариативность стохастической модели и применимость ее для описания наносистем, формирование которых характеризуется самоорганизацией в виде пространственно-распределенного массива идентичных самоорганизованных наноформ.

- Систематическое применение разработанной нелинейной стохастической модели способно более полно отразить разнообразие наноформ кристаллических веществ и послужить основой для классификации иерархически структурированных материалов по параметру симметрии наноразмерных центров формирования.

- Разработанный подход неявно указывает на схожесть процессов формирования иерархических неорганических и сложных органических микроструктур. Для обоих характерны свойства самоорганизации и вариативности, управляемые внешними термодинамическими условиями и кинетикой процессов роста. Таким образом, дальнейшее обобщение разработанного топологического подхода к описанию самоорганизации полиморфных и многокомпонентных веществ способно найти приложения в физике органических и гибридных наносистем.

- Результаты работы раскрывают новые аспекты междисциплинарной связи физики и математики: введенные модификации метода системы итерируемых функций (названные правилами принадлежности, разделения и ограничения) являются новшеством для методов моделирования формирования конденсированных сред, применяющих математический аппарат фрактальной геометрии. Демонстрация возможностей разработанного подхода и программного обеспечения по моделированию формирования наноформ других полиморфных материалов вызывает

особенный интерес.

Полученные в диссертационной работе результаты могут быть использованы в учебном процессе при изучении разделов «Теория роста кристаллов» и «Технология роста кристаллов» при подготовке бакалавров, магистров, аспирантов и о специалистов в области физики твердого тела и нанотехнологий.

По работе можно сделать следующие замечания:

1. Формирование тетраподов рассматривается как быстропротекающий процесс, однако характеристические времена формирования тетраподов подробно не обсуждаются.
2. К сожалению не произведена оценка электрофизических параметров отдельных тетраподов.
3. Не охарактеризована точность произведенных квантово-химических расчетов.

Данные замечания не снижают общую высокую оценку диссертационной работы Авилова С.В.

По своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов диссертация Авилов С.В. «Формирование иерархических структур тетраподов оксида цинка» является завершенной научно-квалификационной работой, в которой решена крупная научная проблема, вносящая весомый вклад в развитие физики конденсированного состояния. Диссертационная работа хорошо логически выстроена, автореферат правильно отражает содержание диссертации.

Результаты диссертации опубликованы в 5-и статьях в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень рекомендованных ВАК, и докладывались на 6-и международных и всероссийских научных конференциях. Зарегистрировано 2 программы для ЭВМ.

Диссертационная работа соответствует требованиям п. 9, 10 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (с изменениями Постановления от 21 апреля 2016 г. № 335) и паспорту специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния (п. 5).

Автор диссертации, Авилов Святослав Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент,
доктор технических наук, профессор,

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе
Российской академии наук,
отделение физики твердого тела,
лаборатория физико-химических свойств полупроводников,
заведующий
Теруков Евгений Иванович

Адрес: Россия, 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Телефон: +7 911 835 39 84
e-mail: eug.terukov@mail.ioffe.ru

19.10.20

Печать Е.И. Терукова
заведующего

Учебный секретарь Мещан Смирнова Е.Н.

