

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертацию Абгарян Каринэ Карленовны «Теоретические основы построения многомасштабных моделей и информационных систем для анализа физических явлений и процессов», представленной к защите на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.17-Теоретические основы информатики

Современные исследования в области физики в целом и микроэлектроники, в частности, без математического моделирования немыслимы. Это связано с тем, что сегодня уровень развития вычислительных мощностей в ряде случаев в значительной степени позволяет заменить более дорогостоящий и трудоемкий физический эксперимент. Однако, это возможно только в случае наличия детализированных физических моделей и адекватного математического аппарата, лежащего в основе специализированного программного обеспечения (ПО). **Актуальность** темы диссертационной работы Абгарян К.К. **с научной точки зрения** обусловлена тем, что она направлена на разработку такого математического аппарата для создания будущего отечественного ПО. Причем, следует отметить, что такой аппарат строится в виде иерархической структуры взаимосвязанных математических моделей и вычислительных алгоритмов физических явлений в различных масштабах пространства и времени, имеющих причинно-следственные связи в цепочке квантовых, молекулярных и макроскопических явлений. Базирующаяся на такой парадигме работа претендует на то, чтобы стать научной базой для создания ПО, построенных «из первых принципов», способных с единых позиций строения вещества описывать не только явления на уровне атомов, молекул и даже непрерывных сред, но также прогнозировать базовые характеристики твердотельных приборов. **Актуальность** темы **с практической точки зрения** также не вызывает сомнений, поскольку ее разработка приближает нас к созданию специализированного в области физики отечественного ПО с открытыми кодами доступа.

Научная новизна результатов работы характеризуется следующими положениями.

Разработка оригинального модельно-ориентированного подхода к построению программных систем многомасштабного моделирования, в котором сначала создаются базовые модели-композиции (БК), описывающие отдельные явления, характеризующиеся своими пространственными и (или) временными масштабами, а затем на их основе строится общая архитектура (в терминологии автора - многомасштабные композиции - МК) реального физического процесса. Для описания разработанной технологии применен теоретико-множественный аппарат, что позволяет передать вычислительную сущность многомасштабных вычислительных процессов.

Разработан математический аппарат для построения и работы с МК, включающий новые подходы к построению информационной платформы, построение иерархии причинно-следственных связей между БК в МК, адекватной природе описываемого комплекса явлений, группировку промежуточных документов и другие компоненты.

В качестве демонстрации конкретных возможностей разработанного подхода к многомасштабному моделированию, автор разработал методы решения нескольких конкретных задач. Среди них:

- поиск устойчивых кристаллографических структур, в том числе в системах с полифазной диаграммой состояний, когда для заданного стехиометрического состава, путем квантово-механического моделирования электронной плотности атомов ближней координационной сферы с учетом законов кристаллографии осуществляется поиск локальных экстремумов свободной энергии системы и, следовательно, определяется ее наиболее вероятное кристаллографическое и фазовое состояние;
- расчет электронных состояний на границе полупроводниковой гетероструктуры, на основе самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона, а также расчет концентрации и подвижности свободных электронов в двумерном электронном газе;
- модель динамического взаимодействия быстро летящих тел с твердой преградой, в рамках которой детализированы этапы и результаты такого взаимодействия, а также впервые обнаружен специфический эффект пробития преграды, связанный с ее «пластическим раскливанием».

Предложенные **положения новизны** в достаточной степени **обоснованы**, поскольку базируются на доказанных положениях математики, а результаты расчетов, выполненные с помощью ПО на основе разработанных подходов, не противоречат экспериментам в области физики твердого тела, физики полупроводников и высокоэнергетического взаимодействия твердых тел.

Общая **практическая значимость** результатов работы, как уже указывалось, состоит в том, что они закладывают научную основу для создания унифицированной программной среды, позволяющей моделировать элементарные и комплексные физические процессы на основе первых принципов атомарного строения вещества, поскольку в качестве истока используют квантово-механические расчеты на атомарном уровне. Частная значимость для различных дисциплин, где могут быть **рекомендованы к использованию** полученные результаты лежит в следующих областях:

- расчет стехиометрии переходных областей на интерфейсе гетероструктуры и плотности поверхностных состояний, а также поиск фаз для High-K материалов подзатворных диэлектриков полевых транзисторов;
- расчет остаточной поляризации сегнетоэлектрических пленок в составе полупроводниковых структур энергонезависимой ферроэлектрической памяти;
- прогноз частотных свойств НЕМТ структур СВЧ микроэлектроники на основе A^3B^5 , A^2B^6 и других высокотемпературных широкозонных полупроводниковых материалов;
- задачи защиты обтекателей космических и баллистических ракет от мелких метеоритов, а также другие задачи высокодинамичного удара и кинетического поражения.

Достоверность полученных результатов подтверждается результатами тестирования разработанных в диссертации алгоритмов и программ, проведенного путем сравнения с аналитическими решениями, численными решениями других авторов, экспериментальными данными.

По материалам диссертации **опубликовано 2 монографии и 22 работы в журналах**, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК, в том числе индексируемых в международных системах Scopus, Web of Science. Основные результаты докладывались на авторитетных всероссийских и международных конференциях.

Автореферат адекватно и достаточно полно отражает содержание диссертации. Диссертация содержит Введение и шесть глав, в первой из которых выполнен аналитический обзор, а в остальных изложены оригинальные материалы работы. В главе 2 представлены авторские методы и средства информационной поддержки решения задачи поиска устойчивых кристаллических структур. Разработана процедура обмена данными между системами кристаллографического и квантово-механического моделирования. В главе 3 представлены методы и средства информационной поддержки решения задачи молекулярно-динамического моделирования и параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия. В главе 4 представлена многомасштабная дискретно-элементная вычислительная модель высокоскоростного внедрения при столкновении твердого тела с мишенью. Осуществлена идентификация зависимости энергии межатомной связи от динамической твердости материалов. В главе 5 представлена схема многомасштабного моделирования микроэлектронных полупроводниковых гетероструктур, объединяющая квантово-механические расчеты на атомарном уровне для получения плотности зарядов на интерфейсах. Представлены данные, подтверждающие сходимость теории и эксперимента при оценке концентрации и подвижности электронов в двумерном электронном газе. В главе 6 представлены теоретические основы формирования интеграционных систем для информационной поддержки многомасштабного моделирования, сформулированы базовые принципы построения архитектуры системы, включающие доменное представление взаимосвязанных вычислительных, информационных и управляющих программных компонент, формализацию и унификацию сценариев всех стадий вычислительных экспериментов.

Содержание диссертации хорошо структурировано и заслуживает высокой научной оценки.

В то же время следует указать на несколько замечаний, которые ни в коей мере не умоляют научных достоинств диссертационной работы в целом.

В п.2.1. главы 2, описаны методы решения оптимизационных задач для моделей ионно-атомных радиусов учитывающие свойства симметрии и периодичности кристаллов. При этом не приведено должного обоснования выбора используемых методов дискретной оптимизации.

В главе 5 (п.5.1, 5.3) рассмотрены полупроводниковые структуры на основе нитрида галлия. При расчете концентрации электронов в двумерном электронном газе на границе раздела гетероструктуры на основе GaN решается система уравнение Шредингера и Пуассона, т.е. используется абсолютно полупроводниковый подход. Между тем эффекты в таких структурах, в отличие от структур на основе GaAs, уже не чисто полупроводниковые, а еще и пьезоэлектрические. Насколько это положение адекватно учитывается в расчетах из диссертации не ясно.

В главе 5 также подробно описывается метод ускорения глобальных итераций для согласования решений спектральной задачи Штурма - Лиувилля (уравнение Шредингера), краевой задачи для уравнения Пуассона. При этом вопросам о численных методах решения данных задач не уделено должного внимания. Это же замечание касается раздела, посвященного решению обратных задач, где внимание уделено, главным

образом, получению сопряженного уравнения для вычисления градиента минимизируемого функционала.

И, наконец, в диссертации, закладывающей физико-математические архитектуры расчета сложных процессов в виде причинно-следственной цепочки разномасштабных в пространстве и времени явлений, хотелось бы видеть не только примеры решения конкретных задач, но также обнаружить авторский стартовый список специализированного ПО, которое можно было бы разработать на основе базиса данной работы.

Несмотря на приведенные замечания, диссертационная работа А.Б. Абгарян выполнена на высоком научном уровне.

Диссертационная работа Абгарян Каринэ Карленовны представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, характеризующую высоким уровнем актуальности и научной новизны результатов, совокупность которых следует квалифицировать как научную алгоритмическую базу для создания специализированного программного обеспечения, позволяющего проводить математическое моделирование сложной комбинации физических процессов различных пространственно-временных масштабов, в том числе для решения задач физики твердого тела, физики полупроводников и микроэлектроники. Диссертация полностью соответствует требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Абгарян Каринэ Карленовна, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.17 «Теоретические основы информатики».

Официальный оппонент

доктор физико-математических наук Итальянцев Александр Георгиевич, акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники» (АО НИИМЭ), начальник отдела.

Почтовый адрес: 124460, г.Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд, д.12, стр.1
Тел.: 7 915 163-00-73, E-mail: aitalyantsev@niime.ru

Подпись Итальянцева А.Г. удостоверяю:

Заместитель генерального директора ОА «НИИМЭ» по орг. развитию и управлению персоналом

Поликарпова Лилиана Владимировна

Ученый секретарь НТС АО «НИИМЭ»

Нечипоренко Александр Петрович

«01» октябрь 2018 г.