

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.188.08,  
созданного на базе Федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Пермский национальный исследовательский политехнический университет»  
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации,  
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 25 июня 2019 г. № 13  
о присуждении Рыжкову Александру Владимировичу, гражданину России,  
ученой степени кандидата физико-математических наук

Диссертация «Математическое моделирование структуры и магнитодеформационного отклика феррогелей методом крупнозернистой молекулярной динамики» по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ принята к защите 23 апреля 2019 года (протокол заседания №8) диссертационным советом Д 212.188.08, созданным на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (614990, г. Пермь, ул. Комсомольский проспект, 29), приказ о создании совета № 937-664 от 23.05.2008.

Соискатель Рыжков Александр Владимирович, 1991 года рождения, в 2014 году окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», в 2018 году окончил аспирантуру очной формы обучения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (период обучения 01.10.2014-31.08.2018), работает младшим научным сотрудником лаборатории механики функциональных материалов в «Институте механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук» – филиале Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации и ассистентом (по совместительству) на кафедре «Прикладная физика» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре «Прикладная физика» Пермского национального исследовательского политехнического университета.

**Научный руководитель** – доктор физико-математических наук, профессор **Райхер Юрий Львович**, заведующий лабораторией физики и механики мягкого вещества «Института механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук» – филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук (до 1 октября 2018 г. – профессор (по совместительству) на кафедре «Прикладная физика» Пермского национального исследовательского политехнического университета).

**Официальные оппоненты:**

**Зубарев Андрей Юрьевич** – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Лаборатории математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах Института естественных наук и математики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург,

**Сморodin Борис Леонидович** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики фазовых переходов Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Пермский государственный национальный исследовательский университет», г. Пермь, дали положительные отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация**, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «**Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова**», г. Москва, в своем положительном отзыве, подписанном заведующим кафедрой физики полимеров и кристаллов физического факультета, акад. РАН, д-ром физ.-мат. наук, проф., Алексеем Ремовичем Хохловым и профессором кафедры физики полимеров и кристаллов физического факультета, д-ром физ.-мат. наук, доц. Еленой Юльевной Крамаренко и утвержденном проректором, д-ром физ.-мат. наук, проф. Андреем Анатольевичем Федяниным, заключила, что диссертационная работа Рыжкова А.В. является научно-исследовательской работой, выполненной на высоком уровне, в которой содержатся важные для математического моделирования магнитополимерных систем результаты; текст диссертации ясно сформулирован и хорошо структурирован; диссертация Рыжкова Александра Владимировича является законченным научным исследованием и соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор, Рыжков Александр Владимирович, заслуживает присуждения ему искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 –

Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Соискатель имеет 21 опубликованную работу, все по теме диссертации, из них 5 работ опубликованы в ведущих рецензируемых научных изданиях, в том числе 4 работы в изданиях, входящих в базы цитирования Web of Science и Scopus. В тексте диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах. Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Structure organization and magnetic properties of microscale ferrogels: The effect of particle magnetic anisotropy / Aleksandr V. Ryzhkov, Petr V. Melenev, Maria Balasoïu, Yuriy L. Raikher // The Journal of Chemical Physics. — 2016. — Vol. 145, no. 7. — Pp. 074905. DOI: 10.1063/1.4961299 (**перечень ВАК, Scopus, Web of Science**). (8 стр. /5 стр.)

*Представлена формулировка модели феррогеля, содержащего магнитные наночастицы с различными типами магнитной анизотропии. Рассмотрен случай высоконаполненного образца. Введена модифицированная радиальная функция распределения частиц вдоль заданного направления. Описаны процессы кластерообразования при намагничивании микроферрогелей с магнитными анизотропными частицами.*

2. Ryzhkov A.V., Raikher Yu. L. Structural changes in microferrogels cross-linked by magnetically anisotropic particles // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2017. — Vol. 431. — Pp. 192–195. DOI: 10.1016/j.jmmm.2016.09.056 (**перечень ВАК, Scopus, Web of Science**) (4 стр. /3 стр.)

*В статье описывается применение крупнозернистой модели для исследования эволюции наноструктур из магнитных частиц в микроферрогеле в увеличивающемся внешнем магнитном поле. Приведено описание результатов расчетов, демонстрирующих преобразование изотропной структуры агрегатов в цепочечные конфигурации, выстроенные вдоль поля, результаты анализа изменения объема, занимаемого микрогелем в этом процессе.*

3. The effect of magnetic nanoparticle concentration on the structure organisation of a microferrogel / A. V. Ryzhkov, P. V. Melenev, M. Balasoïu, Yu. L. Raikher // Journal of Physics: Conference Series. — 2018. — Vol. 994. — Pp. 012004. DOI: 10.1088/1742-6596/994/1/012004 (**перечень ВАК, Scopus, Web of Science**) (7 стр. / 5 стр.)

*Приведены результаты исследования зависимости количества агрегированных частиц от доли заполненных узлов сетки феррогеля и величины магнитных моментов частиц. Характер агрегатов в отсутствие поля описан для двух предельных случаев магнитной анизотропии. Представлены графики относительного изменения объема микрогелей с разной долей наполнителя и магнитными свойствами.*

4. Рыжков А.В., Райхер Ю.Л. Моделирование отклика микроферрогеля на внешнее магнитное поле // Вычислительная механика сплошных сред – Computational continuum mechanics. — 2018. — Т. 11, № 1. — С. 111–119. DOI: 10.7242/1999-6691/2018.11.1.9 (**перечень ВАК**) (9 стр. / 6 стр.)

*Представлены результаты анализа особенностей механического и структурного отклика в случае умеренной концентрации частиц. Приводится выявленная для разных типов магнитной анизотропии зависимость изменения объема от приложенного поля при перестройке наночастиц.*

5. Ryzhkov Aleksandr, Raikher Yuriy. Coarse-Grained molecular dynamics modelling of a magnetic polymersome // *Nanomaterials*. — 2018. — Vol. 8, no. 10. — Pp. 763. DOI: 10.3390/nano8100763 (**перечень ВАК, Scopus, Web of Science**) (12 стр. / 8 стр.)

*Представлено описание математической модели феррополимеросомы. Приведены результаты расчета изменения формы объекта в приложенном поле при перестройке наночастиц, заключенных внутри амфифильной мембраны.*

Соискателю выдано свидетельство о регистрации программы для ЭВМ: свидетельство 2019614610 Российская Федерация. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «Пре- и постпроцессор для расчета крупнозернистой молекулярной динамики микроферрогеля» / А.В. Рыжков; правообладатель ФГБУН Пермский федеральный исследовательский центр УрО РАН – № 2019613517; заявл. 02.04.2019; опубл. 09.04.2019.

*Программный комплекс, разработанный соискателем, предназначен для реализации численного эксперимента по расчету равновесных свойств микроферрогеля и магнитной полимеросомы в приложенном магнитном поле по модели крупнозернистой молекулярной динамики в пакете ESPResSo.*

На диссертацию и автореферат поступило 8 отзывов, все отзывы положительные: М.В. Авдеева, д-ра физ.-мат. наук, проф., начальника сектора Лаборатории нейтронной физики, Объединенный институт ядерных исследований; Д.А. Балаева, д-ра физ.-мат. наук, директора Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН; В.Г. Баштового, д-ра физ.-мат. наук, проф., заведующего кафедрой ЮНЕСКО «Энергосбережение и возобновляемые источники энергии», главного научного сотрудника НИЛ термомеханики магнитных жидкостей и М.С. Кракова, д-ра физ.-мат. наук, проф., профессора кафедры ЮНЕСКО «Энергосбережение и возобновляемые источники энергии», Белорусский национальный технический университет; Ю.И. Диканского, д-ра физ.-мат. наук, проф., заведующего кафедрой общей и теоретической физики Института математики и естественных наук и Н.И. Червякова, д-ра техн. наук, проф., заведующего кафедрой прикладной математики и математического моделирования Института математики и естественных наук, Северо-Кавказский федеральный университет; С.В. Комогорцева, д-ра физ.-мат. наук, доц., старшего научного сотрудника лаборатории физики магнитных пленок Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН; Л.А. Макаровой, канд. физ.-мат. наук, ассистента

кафедры магнетизма физического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, В.А. Налетовой, д-ра физ.-мат. наук, проф., профессора кафедры гидромеханики механико-математического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова; С.В. Столяра, д-ра физ.-мат. наук, доц., старшего научного сотрудника Научно-исследовательской части Сибирского федерального университета.

В отзывах отмечено, что диссертационная работа посвящена разработке математической модели для изучения структурных и магнитомеханических процессов, происходящих в микроферрогелях и феррополимеросомах во внешнем магнитном поле. Подчеркивается актуальность исследования в связи с новизной тематики и необходимостью понимания влияния различных факторов на свойства данных объектов, обуславливающих потенциальные возможности управления ими в биомедицинских приложениях. Отмечены необходимость применения компьютерного моделирования, новизна и важность полученных результатов. В предложенной модели впервые рассмотрен случай произвольной внутренней магнитной анизотропии частиц. Получены эффекты изменения объема и формы исследуемых объектов. Указано, что результаты представлены на международных и всероссийских конференциях, опубликованы в рецензируемых журналах.

В отзывах содержатся следующие пожелания, вопросы и замечания: из автореферата неясно, учитывает ли разработанная модель возможность перехода магнитных наночастиц при уменьшении энергии магнитной анизотропии в суперпарамагнитное состояние, приводящее к неустойчивости их намагниченности; представляется, что особенности деформации феррополимеросомы в магнитном поле могут быть зависимы от соотношения ее размера и равновесной длины и числа цепей в максимально возможной степени выстроенных вдоль поля; из автореферата не совсем ясно, проводились ли расчеты деформации феррополимеросомы при варьировании ее размера при фиксированных значениях концентрации частиц и напряженности поля.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается следующим:

официальные оппоненты являются ведущими специалистами в области разработки и применения методов математического моделирования, эффективных численных методов, в том числе для решения задач, связанных с магнитомеханикой феррогелей, а также являются специалистами в области исследования многофазных систем. Оппоненты имеют публикации, соответствующие тематике диссертации, в ведущих рецензируемых научных изданиях, обладают достаточной квалификацией, позволяющей оценить новизну представленных на защиту результатов, их научную и практическую значимость, обоснованность и достоверность полученных выводов;

ведущая организация, Московский государственный университет имени

М.В. Ломоносова, один из ведущих вузов России, хорошо известна своими достижениями в области математического моделирования различных процессов, происходящих в сложных системах, в том числе – магнитополимерных. В ведущей организации на высоком уровне осуществляются научные исследования по направлению, разрабатываемому в диссертации.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

- построены математические модели для описания поведения микроферрогеля и феррополимеросомы с различным содержанием и магнитными свойствами нанодисперсного наполнителя. Эти модели позволили учесть особенности структурирования и магнитомеханики объектов в приложенном магнитном поле;
- предложен способ учета внутренней одноосной магнитной анизотропии частиц в рамках подхода крупнозернистой молекулярной динамики;
- разработан и зарегистрирован программный комплекс для проведения численных экспериментов и обработки их результатов;
- для описания структурирования магнитной подсистемы модельных феррогелей реализованы алгоритмы анализа пространственных корреляций в многочастичной системе;
- численно получены зависимости, определяющие изменение структуры микроферрогелей с различной долей магнитных наночастиц, интенсивностью их межчастичного взаимодействия и их магнитной анизотропии от величины приложенного поля, выявлена связь этого структурирования с изменением объема образца;
- охарактеризовано изменение формы модельной феррополимеросомы, вызванное перестройкой структуры ее оболочки в приложенном поле.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

- разработана математическая модель для описания отклика магнитополимерной системы в виде сетки геля, в которую встроены магнитные наночастицы с одноосной магнитной анизотропией;
- реализована в рамках подхода крупнозернистой молекулярной динамики модель полый магнитополимерной капсулы – феррополимеросомы;
- методология многочастичной динамики применена для описания новых эффектов, проявляющихся в системе с ограничениями на поступательные и вращательные степени свободы элементов;
- с помощью созданной модели исследована связь структурных перестроек с возможными сценариями отклика микроферрогеля на приложенное магнитное воздействие;

– определены особенности деформирования магнитополимерных микрообъектов при различном сочетании количества нанодисперсного наполнителя и его магнитных свойств.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

– предложены математические модели, которые могут применяться для описания магнитоуправляемых процессов, используемых в медицине для внутриклеточной доставки и высвобождения лекарств;

– разработан программный комплекс (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019614610 от 09 апреля 2019 г.), реализующий разработанную модель, который может быть использован для получения и анализа конфигураций феррогеля с учетом приложенных воздействий и свойств компонентов многофазной системы.

Результаты диссертационного исследования также могут быть использованы в исследовательских институтах, академических и учебных заведениях, занимающихся математическим моделированием процессов, происходящих в многокомпонентных системах со сложным взаимодействием элементов между собой, в частности – в мягких полимерных системах, содержащих магнитоактивные частицы. Именно такие процессы лежат в основе магнитного управления структурой, формой и объемом мягких полимерных микрообъектов, переносящих полезный груз либо во всем объеме (микроферрогели), либо во внутренней полости (феррополимеросомы).

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

– использованы корректные постановки задач и современные математически обоснованные и апробированные методы их решения;

– установлено качественное соответствие результатов, полученных с применением разработанной математической модели, и опубликованных другими исследователями, в том числе экспериментальных результатов.

– проверено количественное соответствие известным теоретическим зависимостям результатов моделирования для тестовых задач.

**Личный вклад соискателя состоит в следующем:** проведен аналитический обзор литературы по теоретическим и экспериментальным подходам к изучению объекта исследования; осуществлены концептуальная и математическая постановки задачи моделирования поведения магнитополимерной системы; разработаны алгоритмы и их программная реализация; проведены численные эксперименты и проанализированы результаты; подготовлены публикации и выступления на конференциях.

Диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует

критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013г. №842: в ней содержится решение задачи математического моделирования структурного и магнитомеханического отклика феррогелей, имеющее большое значение для развития методов моделирования в сложных системах с ограничениями на степени свободы взаимодействующих компонентов.

На заседании 25 июня 2019 года диссертационный совет принял решение присудить **Рыжкову Александру Владимировичу** ученую степень *кандидата физико-математических наук*.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них 8 докторов наук по специальности защищаемой диссертации, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за присуждение ученой степени - 14, против присуждения ученой степени - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Председатель диссертационного совета  
Д212.188.08, д-р физ.-мат. наук, профессор



Трусов П.В.

Ученый секретарь диссертационного совета  
Д212.188.08, канд. физ.-мат. наук, доцент

Швейкин А.И.



«27» июня 2019 г.