

На правах рукописи

Федотов Алексей Юрьевич

**МНОГОУРОВНЕВОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ
НАНОСТРУКТУР В ГАЗОВОЙ СРЕДЕ**

Специальность:

*1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ*

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
доктора технических наук

Пермь – 2022

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук», г. Ижевск (УдмФИЦ УрО РАН)

Научный консультант: **Вахрушев Александр Васильевич**,
д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник отдела моделирования и синтеза технологических структур УдмФИЦ УрО РАН, г. Ижевск

Официальные оппоненты: **Григорьев Федор Васильевич**,
д-р физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник лаборатории вычислительных систем и прикладных технологий программирования Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, г. Москва

Свистков Александр Львович,
д-р физ.-мат. наук, заведующий лабораторией микро-механики структурно-неоднородных сред Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук», г. Пермь

Скрипняк Владимир Альбертович,
д-р физ.-мат. наук, заведующий кафедрой механики деформируемого твердого тела Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», г. Томск

Ведущая организация: **Институт прикладной механики Российской академии наук**, г. Москва

Защита состоится 20 сентября 2022 года на заседании диссертационного совета Пермского национального исследовательского политехнического университета Д ПНИПУ.01.09, по адресу: 614990, г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29, ауд. 423 б.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте ФГБОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (<http://pstu.ru>).

Автореферат разослан «_____» _____ 2022 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д ПНИПУ.01.09,
кандидат физико-математических наук

Е.Л. Кротова

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Расширение области применения нанотехнологий на новые сферы и создание наукоемкой продукции возможно только совместно с развитием фундаментальной науки в данной отрасли. Целевыми объектами исследований в работе являются наноструктурные и наноразмерные материалы, имеющие хотя бы один пространственный или объемный параметр в наномасштабе (размер наночастиц, толщина нанопленок, величина поры в подложке), благодаря чему их эксплуатационные характеристики в выгодную сторону отличают наноматериалы от обычных материалов. Нанопленки, наночастицы и другие нанообъекты активно используются в качестве составных элементов структуры композитов и конструкций и играют определяющую роль в их функциональном поведении. Значительный прогресс в процессах изготовления и функционирования наноструктурированных материалов связан с газообразными средами. Зачастую именно в газообразных средах или средах, близких к вакууму, происходит их формирование, закладываются основные структурные особенности и эксплуатационные свойства. Источником атомов и молекул газообразной фазы в подобных наносистемах является газогенератор, функционирующий в результате отдельного или комбинированного использования высокотемпературных технологий (сварка, резка, диффузионная пайка, химическая обработка, индукционный, плазменный и электронно-лучевой нагрев). Базовые механизмы формирования наноструктур могут реализовываться непосредственно в газовых средах, на поверхностях и в объемных материалах внутри нанокompозитов.

Многообразие задач исследования наноструктурных объектов, связанных с газовыми средами, требует развития базы знаний и накопления информации в данной области. Математическое моделирование является универсальным подходом, предоставляющим обширный инструментарий для многогранного исследования новых перспективных материалов. Моделирование не требует значительных затрат на изготовление образцов и дорогостоящего оборудования, позволяет избежать проведения неудачных натуральных экспериментов и предсказать потенциально востребованные свойства новых материалов. Кроме того, математическое моделирование позволяет обобщить результаты исследований и сформулировать фундаментальные законы и механизмы формирования, взаимодействия и функционирования нанообъектов. Построение теоретически обоснованных многомасштабных моделей с возможностью подстройки к конкретным технологическим процессам и детализации результатов на каждом уровне необходимо во многих сферах нанотехнологии и nanoиндустрии, в том числе и для газосодержащих наносистем.

Степень разработанности темы исследования. Современный уровень теоретических исследований в области нанотехнологий определяется развитием научных школ, сообществ и коллективов. Математические методы молекулярно-динамического моделирования активно развиваются в МГУ имени М.В. Ломоносова. М.П. Кирпичников, В.О. Попов, К.В. Шайтан, О.И. Баулина, О.А. Горелова, Д.А. Долгих, Е.С. Лобакова, О.С. Соколова, А.В. Феофанов, Р.Г. Ефремов, А.Е. Соловченко многие годы применяют алгоритмы молекулярной динамики для разработки и усовершенствования лекарств, создания биомолекулярных конструкций и многофункциональных наноструктур.

Моделированием упругих и пластических свойств, а также исследованием процессов разрушения и сборки наноматериалов занимаются в ИПМаш РАН. Коллектив лаборатории дискретных моделей механики (А.М. Кривцов, И.Е. Беринский, Е.А. Иванова, П.А. Дятлова, В.А. Кузькин, А.А. Ле-Захаров, О.С. Лобода, Е.А. Подольская, Н.Е. Фирсова, В.А. Цаплин) совместно с кафедрой теоретической механики СПбПУ Петра Великого (В.В. Гузев, Ю.Е. Карякин, Е.Н. Вильчевская, А.А. Иванов, А.В. Костарев, Д.Ф. Лебедев, С.П. Максимов, В.Н. Носов, Н.Н. Поляхов, А.Д. Саблин, В.В. Тихомиров, О.А. Троицкая) успешно адаптирует основы метода частиц применительно к задачам механики деформируемого твердого тела.

Отдельного внимания заслуживает школа В.Е. Панина (С.Г. Псахье, А.Ю. Смолин, И.Ю. Смолин, П.В. Макаров, В.А. Романова, Р.Р. Балохонов, А.И. Лотков). В ИФПМ СО РАН создано и развивается такое научное направление, как мезомеханика материалов. Мезомеханика объединяет механику сплошной среды, физическое материаловедение и физику пластической деформации. Нагруженное твердое тело рассматривается в качестве многоуровневой самоорганизующейся системы, где пластическая деформация последовательно развивается на разных физических уровнях, в микро-, мезо- и макромасштабах.

Разработкой и применением многоуровневых математических моделей в области исследования поведения металлов и сплавов при их интенсивном деформировании занимается коллектив кафедры математического моделирования систем и процессов ПНИПУ. Заведующим кафедрой П.В. Трусовым совместно с коллегами (А.И. Швейкин, Н.С. Кондратьев, А.Ю. Янц, Э.Р. Шарифуллина, П.С. Волегов, К.В. Остапович, И.Ю. Зубко, В.Н. Ашихмин, Е.С. Макаревич, Т.В. Останина) ведутся работы по построению моделей для изучения деформирования моно- и поликристаллических материалов с возможностью исследования и детального анализа эволюции мезо- и микроструктуры изделий. В последние годы в данном коллективе интенсивно работают над созданием многоуровневых моделей с включением в рассмотрение микроуровня, для описания на котором используется аппарат атомарной динамики.

Структурно-феноменологические нелинейные модели механики деформируемого твердого тела успешно совершенствуются в ПГНИУ. На кафедре вычислительной и экспериментальной механики (Е.П. Клигман, Л.А. Голотина, А.В. Фонарев, В.Н. Терпугов, М.А. Юрлов) совместно с ИМСС УрО РАН (В.П. Матвеевко, И.Н. Шардаков, А.А. Роговой) развивается научное направление по моделированию термомеханического поведения материалов и конструкций с учетом протекающих физических и химических процессов. Не теряет своей актуальности и специфика термодинамического деформирования полимерных нанокомпозитов, вопросами которой занимаются А.Л. Свистков, Е.Я. Денисюк, А.П. Скачков.

Активная работа по развитию многоуровневых математических моделей в области нанотехнологий ведется зарубежными учеными. В Китайской академии наук авторами M. Kwauk, W. Wang, J. Li, N. Yang, W. Ge, L. Wang разработана многомасштабная сеточная модель движения частиц на основе вычислительной гидродинамики, которая позволяет оценить структурно-ориентированное взаимодействие между потоком и теплообменом. Усовершенствованием конечно-

элементных подходов для описания упругопластической деформации кристаллов занимаются в Германии F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D.D. Tjahjanto, D. Raabe. Данные модели применяются для прогнозирования микроструктуры наноматериалов и исследования анизотропных сред. Известны методы описания поведения атомарных кластеров, основанные на теории графов. Авторами С.М. Fortuin, P.W. Kasteleyn, C.R. Scullard, J.L. Jacobsen, R.M. Ziff при помощи подобных подходов анализируются фазовые переходы и структурные изменения вещества. Математические методы исследования процессов формирования изолированных металлических кластеров в газовой среде активно развивают S.M. Lang, T.M. Bernhardt, D.M. Cox, R. Brickman, K. Creegan, A. Kaldor, что может быть использовано для понимания энергетики и кинетики каталитических реакций. Важное значение для моделей описания наноструктурных материалов имеют разработки ученых из США. Учеными M.I. Baskes, R.A. Johnson, S.G. Srinivasan, S.M. Valone, R.G. Hoagland, B.-J. Lee, H. Kim, Y.K. Cho предложены алгоритмы интеграции молекулярной динамики и квантовой механики через силовые потенциалы с точки зрения теории функционала электронной плотности.

Значительный научный потенциал накоплен в ТГУ. Коллективом кафедры механики деформируемого твердого тела (В.А. Скрипняк, С.А. Баранникова, С.А. Зелепугин, Б.А. Люкшин, В.Л. Попов, С.В. Разоренов) аккумулирован большой объем экспериментальных и теоретических исследований высокопрочных наноматериалов. Физико-химия агрегатных переходов, динамические системы и процессы массопереноса вблизи фазовых поверхностей находятся под пристальным вниманием ученых из УдГУ. С.М. Решетников, Е.В. Харанжевский, М.Д. Кривилев, А.А. Килин, П.К. Галенко внесли значительный вклад в создание моделей модификации поверхностей, динамики развития межфазных границ и структурообразования в многофазных средах.

Интересный подход для моделирования свойств наноматериалов, находящихся во внешнем магнитном поле, используется коллективом ИМСС УрО РАН. Научная группа (Ю.Л. Райхер, П.В. Меленёв, В.И. Степанов, В.В. Русаков, О.В. Столбов, И.С. Поперечный, А.В. Рыжков) занимается нелинейной магнитомеханикой частиц с применением метода крупнозернистой молекулярной динамики. Исследования ведутся с целью изучения малых полимерных элементов, содержащих нанокластеры магнитоактивного наполнителя – микроферрогеля.

Еще одна научная школа по моделированию в области нанотехнологий базируется в лаборатории термомеханики новых материалов и технологий ИТПМ имени С.А. Христиановича СО РАН. Коллектив школы (А.Н. Черепанов, В.В. Бублик, А.О. Колесников, В.В. Марусин, В.Н. Попов, Ю.С. Цивинская, В.П. Шапеев, В.Г. Щукин) прежде всего ориентирован на исследование процессов фазо- и структурообразования в металлических системах и их сплавах, изучение свойств наноразмерных тугоплавких соединений.

Проведенные автором исследования являются развитием научного направления механики наноструктур и нанокомпозитов, значительный вклад в которое внесли А.М. Липанов и А.В. Вахрушев. В работе существующие математические модели для теоретического анализа наносистем доработаны и усовершенствованы с целью их адаптации для воздушных, газовых и аэрозольных сред.

Объект исследования: наноструктуры, сформированные в газовой среде.

Предмет исследования: процессы образования, роста и взаимодействия наноструктур в газовой среде с учетом влияния внешних условий и технологических параметров.

Цель работы заключается в разработке многоуровневой математической модели для описания процессов конденсации, формирования, роста и внедрения наноструктур в технических системах с газогенератором наночастиц для повышения качественных и функциональных характеристик наноматериалов. Для реализации цели необходимо решить следующие **задачи исследования:**

1. Разработать методологию построения системы математических моделей, описывающую процессы формирования, взаимодействия, конденсации и роста наноструктур в газовой среде в течение их эволюционных трансформаций.
2. Адаптировать численные схемы для реализации многоуровневой математической модели и создать проблемно-ориентированный программный комплекс для исследования ключевых механизмов взаимодействия, конденсации и роста наноструктур.
3. Провести численное моделирование механизмов образования и роста наноструктур, используемых для питания растений из газовой среды.
4. Выполнить комплексные исследования процессов формирования металлических наноструктур для систем изготовления наночастиц методом термического испарения и последующей конденсации при различных режимах, составах и соотношениях исходных материалов.
5. С использованием разработанных математических моделей изучить процессы формирования наноструктур аэрозоля специального назначения, используемого в пожаротушащих технических системах.
6. Численно исследовать режимы конденсации и роста наноструктур в технических системах изготовления полупроводниковых материалов методом молекулярно-лучевой эпитаксии с целью корректировки производственных и функциональных параметров.
7. Провести моделирование процессов образования нанопленок и наноструктур в оптико-электронных технических системах, основанных на методе дискретного термического испарения порошка в условиях вакуума.

Научная новизна диссертационной работы заключается в следующем:

1. Разработана комплексная математическая модель, дополненная впервые предложенным методом мезодинамики частиц с возможностью увеличения пространственного и временного масштабов и, в отличие от существующих моделей, не требующая поиска дополнительных параметров силового взаимодействия.
2. Создан программный комплекс, включающий в себя впервые написанную программу для мезодинамических расчетов частиц и визуализации результатов, блоки согласования данных, многофункциональные алгоритмы анализа структурных и размерных свойств наночастиц, нанопленок, подложек.
3. Для технических систем, предназначенных для питания растений из газовой среды, установлены состав, концентрация, интенсивность рос-

- та, размер наноструктур, способность проникновения внутрь растений и возможность управления механизмами агломерации.
4. При помощи математического моделирования в промышленно-технологических системах термического синтеза показана возможность создания наночастиц управляемой структуры (оболочечной, смешанной, слоистой) и, с целью последующего интервального оценивания, идентифицированы законы распределения свойств наноэлементов.
 5. Впервые на основе анализа кумулятивных процессов, протекающих в наноаэрозольных системах, выявлены ингибирующие механизмы работы пожаротушающего газогенератора и подтверждена эффективность его эксплуатации в помещениях с вычислительной техникой.
 6. При помощи математического моделирования и итерационным уточнением режимов для технологии молекулярно-лучевой эпитаксии установлены различные варианты формирования наноструктур и нанопленок на темплатах кремния. Впервые предложен вид и структура нового нанокompозита с внедрением квантовых точек.
 7. Разработана система спецификации результатов формирования наноструктур на пористых подложках, впервые продемонстрировавшая возможность создания наноэлементов с априори предписанной структурой, в том числе рельефных, равномерных с небольшим проседанием в области поры, островных, с отверстием над порой нанопленок.

Теоретическая и практическая значимость работы. Разработанная математическая модель может быть использована для совершенствования процессов изготовления и исследования функционирования наноматериалов и нанообъектов, где механизмы конструирования или эксплуатации связаны с газовыми средами. В работе предложена многоуровневая модель, которая применена при решении пяти актуальных комплексных задач с использованием соответствующих вычислительных экспериментов. Задачи имеют важное прикладное значение, что подтверждается наличием актов внедрения результатов диссертационной работы в производственные процессы научно-производственной фирмы «НОРД» и учебные процессы ФГБОУ ВО «Ижевский государственный технический университет имени М.Т. Калашникова». Практическая значимость работы заключается также в создании программно-вычислительного комплекса для ЭВМ, предназначенного для оптимизации и проектирования новых перспективных наноматериалов с управляемыми механическими, термоэлектрическими, оптическими и фотолюминесцентными свойствами. Программный комплекс может быть использован в научно-технических центрах, опытно-конструкторских предприятиях и промышленных лабораториях для исследования процессов изготовления и функционирования наноструктурированных материалов, связанных с газообразными средами.

Методология и методы исследования. В работе использован аппарат математического моделирования, включающий в себя модели квантовой механики, молекулярной динамики и мезодинамики частиц. Применялись методы вычислительной математики, на основе которых был разработан программный комплекс. Программный код создан при помощи высокоуровневых языков объектно-ориентированного программирования, в том числе C++, Fortran, Pascal, TCL, с привлечением интерактивно-адаптированных визуальных инструментальных оболочек.

Положения, выносимые на защиту:

1. Многоуровневая математическая модель, предназначенная для многомасштабного исследования процессов конденсации и агломерации наноструктур и дополненная методом мезодинамики частиц.
2. Проблемно-ориентированный программный комплекс с графическим интерактивным интерфейсом пользователя, включающий в себя многофункциональные алгоритмы анализа результатов и позволяющий повысить эффективность технических систем с газогенератором наноструктур.
3. Результаты исследований состава, свойств, интенсивности роста, концентрации, степени влияния коагулирующих добавок на скорость конденсации и размер наноструктур, используемых для питания растений из газовой среды.
4. Закономерности процессов и результаты статистического анализа технологии термического синтеза, выявившие стадии образования и укрупнения нанокластеров, зависимость структуры от исходных материалов, вероятностные законы распределения свойств.
5. Результаты исследований свойств, состава и скорости агломерации наноструктур, формируемых в результате работы пожаротушающего газогенератора, а также проверка эффективности его эксплуатации в помещениях с электрооборудованием.
6. Методики и алгоритмы создания наноэлементов регулируемой структуры на темплатах кремния, результаты исследования влияния режимов молекулярно-лучевой эпитаксии и термодинамических параметров на механизмы образования и роста нанопленок.
7. Предложенные на основе математического моделирования способы рационального построения и описания однотипных и систематически расположенных наноструктур на подложках пористого оксида алюминия, учитывающие степени заполнения пор, влияния легирующих добавок, вариации углов напыления и температур на строение и механизмы роста наноэлементов.

Достоверность и обоснованность. Достоверность и обоснованность результатов диссертационного исследования подтверждается удовлетворительным качественным и количественным соответствием приведенным в литературе экспериментальным данным для тестовых расчетов, исследованиями по сходности численных алгоритмов и устойчивости полученных решений, согласованностью результатов моделирования с собственно полученными экспериментальными данными и экспериментальными данными других авторов.

Апробация результатов. Основные результаты и положения диссертационной работы обсуждались и докладывались на 15 международных, 20 всероссийских и региональных научных конференциях и школах-семинарах, в том числе: Всероссийская школа-конференция КоМУ (Ижевск, 2005, 2006, 2010, 2013); Международная конференция "Новые перспективные материалы и технологии их получения" (Волгоград, 2007); Международная молодежная конференция "XXXIII Гагаринские чтения" (Москва, 2007); Международная конференция "От наност-

руктур, наноматериалов и нанотехнологий к наноиндустрии" (Ижевск, 2007, 2009, 2013, 2015, 2017); Всероссийская конференция молодых ученых "Применение теории динамических систем в приоритетных направлениях науки и техники" (Чайковский, 2007); Всероссийская конференция "Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях" (Москва, 2009); Всероссийская школа-конференция молодых ученых и студентов "Математическое моделирование в естественных науках" (Пермь, 2009, 2010, 2012, 2014, 2016); Межрегиональная конференция молодых учёных по физике полупроводниковых, диэлектрических и магнитных материалов (Владивосток, 2009); Asian School-Conference on Physics of Nanostructures and Nanomaterials (Vladivostok, 2010); Всероссийская конференция "Внутрикамерные процессы и горение в установках на твердом топливе и в ствольных системах" (Ижевск, 2011, 2014); Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (Vladivostok, 2011); Всероссийская научно-техническая Интернет-конференция студентов и молодых ученых "Прикладная математика, механика и процессы управления": (Пермь, 2013); Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (Vladivostok, 2015); научно-методическая конференция "Информационное и техническое обеспечение инновационных технологий" (Сарапул, 2015); 6th International Conference on Nanotechnology (Rome, 2015); Международная конференция "Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии" (Ижевск, 2016, 2019); 3rd International Workshop on "Advanced Dynamics and Model Based Control of Structures and Machines" (Perm, 2017); 52-ая Школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния ФКС-2018 (Санкт-Петербург, 2018); International Conference on Advanced Functional Materials and Composites (Barcelona, 2018); International Conference on Applied Mathematics and Computer Science (Venice, 2019), XXIV Международный симпозиум "Нанозифика и наноэлектроника" (Нижний Новгород, 2020).

Полностью диссертационная работа докладывалась и обсуждалась на научно-технических семинарах на кафедре математического моделирования систем и процессов ПНИПУ, г. Пермь (руководитель – д.ф.-м.н., проф. П.В. Трусков), в Институте механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь (руководитель – академик РАН, д.т.н., проф. В.П. Матвеев), на кафедре механики композиционных материалов и конструкций ПНИПУ, г. Пермь (руководитель – д.т.н., проф. А.Н. Аношкин), в лаборатории топологических и квантовых явлений в сверхпроводящих системах МФТИ, г. Долгопрудный (руководитель – к.ф.-м.н., доцент В.С. Столяров).

Личный вклад автора. Формулировка задач, целей, положений, выносимых на защиту, выводов и заключения осуществлена автором самостоятельно. Лично соискателем разработана процедура согласования уравнений различных уровней математической модели исследования наносистем (квантовой механики, молекулярной динамики, мезодинамики частиц). Уравнения мезодинамического движения наноструктур с учетом возможных численных схем различного порядка точности сформулированы и реализованы автором диссертационного исследования. С использованием свободно распространяемого программного обеспечения (блок квантово-механических расчетов и блок молекулярно-динамического моделирования) соискателем был разработан программный комплекс, включающий в себя визуализацию и алгоритмы анализа структуры наноэлементов, их свойств и параметров на-

носистемы. В рамках проводимых исследований автор являлся руководителем и ответственным исполнителем в грантах Президиума УрО РАН, РФФИ и РНФ, исполнителем проектов прикладных исследований для НПП «Квант», «Государственный ракетный центр имени академика В.П. Макеева», ФКП «Научно-исследовательский институт «Геодезия» и «Научно-производственная фирма «Норд». Частично в грантах и проектах исследования проводились совместно с научным консультантом.

Публикации. Результаты диссертационной работы и проведенных исследований опубликованы в 94 научных работах, среди них 7 глав в книгах и монографиях, 2 патента, 1 свидетельство о регистрации программного комплекса, 26 публикаций, включенных в зарубежные базы цитирования Web of Science, Scopus, Russian Science Citation Index, 12 статей в изданиях из Перечня рецензируемых научных журналов ВАК, 49 статей в сборниках научных трудов и материалов конференций.

Структура и объём диссертации. Диссертационная работа включает в себя введение, семь глав, заключение, перечень основных сокращений и обозначений, список литературы и три приложения. Объём основного текста диссертации составляет 359 страниц, в том числе 210 рисунков и 7 таблиц, которые пронумерованы по главам. Список литературы содержит 299 источников. Приложения занимают объём 12 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность диссертационного исследования, описана степень разработанности рассматриваемой темы. Приведен личный вклад автора в исследование. Представлены структура и краткое содержание элементов диссертационной работы.

В первой главе рассматриваются теоретические основы и комплексная математическая модель функционирования технических систем, содержащих газогенератор наноструктур. Модель объединяет в себе подмодели разных уровней, созданные на основе квантовой механики, молекулярной динамики, мезодинамики частиц [21, 41]. Общая структурная схема модели и системных связей между уровнями представлена на рис. 1. Математическая модель ориентирована на определение рациональных параметров технологического процесса изготовления наноматериалов, позволяет исследовать их свойства, анализировать режимы функционирования технической системы с генератором наноструктур, а также оценивать активность и уровень взаимодействия элементов, внутреннее строение, рельеф поверхности, интенсивность роста, размеры и концентрацию нанокластеров. Математическая модель имеет подчиненную структуру, в которой подмодели уровней описывают поведение наносистемы на разных временных интервалах. В соответствии с этим связь между подмоделями на рис. 1 имеет односторонний характер. Далее каждый уровень математической модели будет рассмотрен подробнее.

При помощи аппарата квантовой механики вычислялись некоторые энергетические характеристики и заряды атомов в молекулах. Если рассматриваемая наносистема являлась молекулярной, также определялись равновесные конфигурации молекул: длины связей, углы и т.д.



Рисунок 1 – Структура комплексной модели для исследования функционирования технических систем и технологических процессов с газогенератором наноструктур

Для вычисления равновесных конфигураций решалось стационарное уравнение Шредингера [21]:

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (1)$$

где E – полная энергия рассматриваемой системы; \hat{H} – гамильтониан, состоящий из суммы операторов потенциальной и кинетической энергий; $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ – полноэлектронная волновая функция системы, зависящая от координат всех ядер \mathbf{R} и положений электронов \mathbf{r} .

В работе было использовано приближение Борна – Оппенгеймера, позволяющее разделить переменные и представить полную волновую функцию через произведение ядерной и электронной функций:

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Psi_{nuc}(\mathbf{R})\Psi_{el}(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (2)$$

где $\Psi_{nuc}(\mathbf{R})$, $\Psi_{el}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ – многоядерная и многоэлектронная волновые функции.

Учитывая разделение энергий и переменных, относящихся к ядрам и электронам, уравнение Шредингера для системы частиц (1) определяется выражением [21]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{k=1}^{N_{nuc}} \frac{1}{M_k} \nabla_k^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^{N_{el}} \nabla_i^2 + U_{nuc,nuc}(\mathbf{R}) + U_{el,nuc}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + U_{el,el}(\mathbf{r}) \right] \times \\ \times \Psi_{nuc}(\mathbf{R})\Psi_{el}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E\Psi_{nuc}(\mathbf{R})\Psi_{el}(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (3)$$

где $U_{nuc,nuc}(\mathbf{R})$ – энергия отталкивания ядер; $U_{el,el}(\mathbf{r})$ – энергия отталкивания электронов; $U_{el,nuc}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ – энергия притяжения ядер и электронов; M_k – масса k -го ядра; m_e – масса электрона; операторы ∇_k^2 и ∇_i^2 действуют на искомые волновые функции ядер и электронов. Два первых слагаемых в уравнении (3) являются операторами кинетической энергии электронов и ядер.

При помощи подмодели квантовой механики вычислялись равновесные конфигурации молекул, распределение зарядов за счет смещения электронных орбиталей и параметры потенциалов взаимодействия атомов, которые далее были использованы в подмодели молекулярной динамики. Подмодель квантовой механики являлась вспомогательным уровнем математической модели и использовалась не всегда. Например, задачи осаждения нанопленок решались сразу методом молекулярной динамики. Незаменимую роль подмодель квантовой механики играет в случае редких молекулярных составов наносистемы, когда параметры потенциалов, необходимые для следующих уровней математической модели, оказываются неизвестны.

При помощи молекулярно-динамических исследований рассматривались процессы конденсации атомов и молекул в наноструктуры, их самосборка и самоорганизация, образование и рост нанопленок на подложках различного типа, взаимодействие наноэлементов. При этом использовался широкий спектр потенциалов взаимодействия как парных, так и многочастичных. Описание обмена энергией с внешней средой происходило посредством применения приближений термостатов и баростатов.

В основу метода молекулярной динамики положено дифференциальное уравнение для детализации движения совокупности атомов, которое решается совместно с начальными условиями [39]:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = \mathbf{f}_i(t, \mathbf{r}), t_0 = 0, \mathbf{r}_i(t_0) = \mathbf{r}_{i0}, \frac{d\mathbf{r}_i(t_0)}{dt} = \mathbf{v}_i(t_0) = \mathbf{v}_{i0}, i = 1, 2, \dots, N_a, \quad (4)$$

где N_a – количество атомов, образующих наносистему; t_0 – начальный момент времени; m_i – масса атома под номером i ; $\mathbf{r}_{i0}, \mathbf{r}_i(t)$ – радиус–векторы i -го атома в начальный и текущий момент времени соответственно, координаты частиц определяются в пределах расчетной области; $\mathbf{r} = \{\mathbf{r}_1(t), \mathbf{r}_2(t), \dots, \mathbf{r}_{N_a}(t)\}$ – совокупность положений всех частиц; $\mathbf{f}_i(t, \mathbf{r})$ – результирующая сила, действующая со стороны множества частиц на i -ый атом; $\mathbf{v}_{i0}, \mathbf{v}_i(t)$ – скорости i -го атома в начальный и текущий моменты времени.

Величины сил $\mathbf{f}_i(t, \mathbf{r})$ в (4) определяются потенциалом наносистемы $U(\mathbf{r})$. Для неизолированных наносистем описание обмена энергией с внешней средой осуществлялось при помощи дополнительной внешней силы $\mathbf{f}_i^{ex}(t, \mathbf{r})$:

$$\mathbf{f}_i(t, \mathbf{r}) = -\nabla U(\mathbf{r}) + \mathbf{f}_i^{ex}(t, \mathbf{r}) = -\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}_i(t)} + \mathbf{f}_i^{ex}(t, \mathbf{r}), i = 1, 2, \dots, N_a. \quad (5)$$

Молекулярная динамика использовалась при исследовании процессов формирования и роста наноструктур на начальной стадии конденсации. Дальнейший процесс агрегации нанообъектов рассматривался при помощи аппарата мезодинамики частиц. Критерием перехода к уравнениям мезодинамики служило прекращение объединения свободных атомов и молекул в наночастицы. В данный промежуток производилось сопоставление результатов, полученных при помощи различных подмоделей, и корректировались параметры наносистемы.

В подмодели мезодинамики частиц описывается эволюция наноструктур, сформированных к данному моменту времени (схема приведена на рис. 2). Совокупности атомов, сгруппированных в наночастицы, на данном этапе заменяются неделимыми объектами. Условие объединения группы атомов в определенную наночастицу является их связанное и энергетически стабильное взаимное поведение. Данное условие выполняется при достижении минимального значения потенциальной энергии для группы атомов. Нанокластеры между столкновениями считаются абсолютно твердыми телами сферической формы. В методе рассматривается их движение, укрупнение, взаимодействие. Начальные положения и массы рассчитываются по формулам центра масс атомов [39]:

$$M_j = \sum_{i=1}^{N_j} m_i, \quad \mathbf{R}_j = \frac{\sum_{i=1}^{N_j} m_i \mathbf{r}_i}{M_j}, \quad i = 1, 2, \dots, N_a, \quad j = 1, 2, \dots, N_p, \quad \sum_{j=1}^{N_p} N_j = N_a, \quad (6)$$

где m_i и M_j , \mathbf{r}_i и \mathbf{R}_j – массы и радиус-векторы для i -го атома и j -ой наночастицы соответственно; N_p – общее число наночастиц в системе; N_j – количество атомов, входящих в j -ую наночастицу.

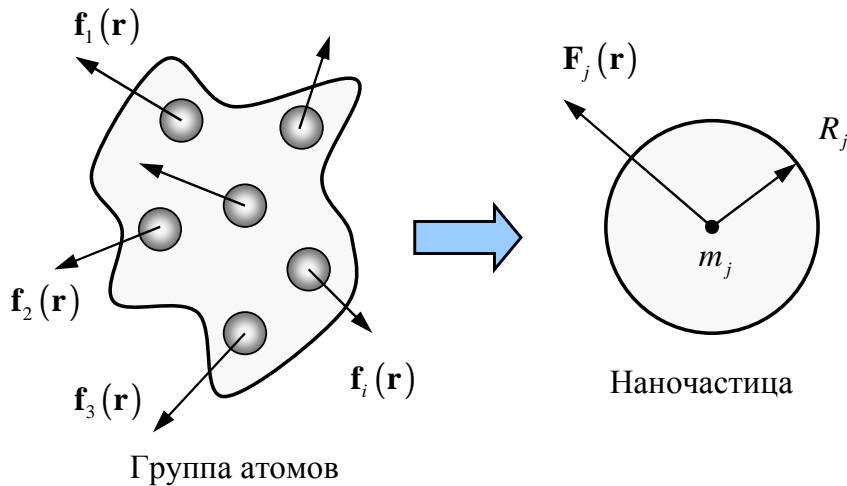


Рисунок 2 – Объединение атомов в наноструктуры

Начальные скорости наночастиц вычисляются, исходя из закона сохранения импульса. Определяется результирующая сила, действующая на каждую наноструктуру [39]:

$$\mathbf{V}_j = \frac{\sum_{i=1}^{N_j} m_i \mathbf{v}_i}{M_j}, \quad \mathbf{F}_j = \sum_{i=1}^{N_j} \mathbf{f}_i, \quad \mathbf{M}_j = \sum_{i=1}^{N_j} \mathbf{r}_i \times \mathbf{f}_i, \quad j = 1, 2, \dots, N_p, \quad (7)$$

где \mathbf{v}_i и \mathbf{V}_j – скорости атома и наночастицы соответственно; \mathbf{f}_i и \mathbf{F}_j – силы, действующие на атом и на наноструктуру; \mathbf{M}_j – главный момент силы наночастицы; индекс j указывает принадлежность к номеру наночастицы, индекс i – к номеру атома. Формулы (6) и (7) используются при переходе от подмодели молекулярной динамики к мезодинамике частиц. Здесь и далее за точку приложения сил, радиус-векторов, скоростей наноструктуры принимается ее центр масс.

Вследствие неравномерного приложения сил к атомам наночастиц и неоднородности потенциального поля, в котором они находятся, у наноструктур появляется вращательное движение. Вращательное движение описывается дополнительным векторным уравнением системы. Итоговая система уравнений движения наночастиц будет иметь вид [41]:

$$\begin{cases} M_j \frac{d^2 \mathbf{R}_j(t)}{dt^2} = \mathbf{F}_j(t, \mathbf{R}) \\ I_j \frac{d^2 \boldsymbol{\varphi}_j(t)}{dt^2} = \mathbf{M}_j(t, \boldsymbol{\varphi}) \end{cases}, \quad j = 1, 2, \dots, N_p, \quad (8)$$

где $\mathbf{F}_j(t, \mathbf{R})$ – сила, действующая на j -ую наночастицу; I_j – момент инерции наночастицы; $\boldsymbol{\varphi}_j(t)$ – вектор углов поворота, для трехмерного случая $\boldsymbol{\varphi} = (\alpha, \beta, \gamma)$ содержит набор трех углов: прецессии, нутации и угла собственного вращения; $\mathbf{M}_j(t, \boldsymbol{\varphi})$ – момент силы; $\mathbf{R} = \{\mathbf{R}_1(t), \mathbf{R}_2(t), \dots, \mathbf{R}_{N_p}(t)\}$, $\boldsymbol{\varphi} = \{\boldsymbol{\varphi}_1(t), \boldsymbol{\varphi}_2(t), \dots, \boldsymbol{\varphi}_{N_p}(t)\}$. Система (8) описывает движение каждой наночастицы, которые на данном этапе рассматриваются как неделимые целые.

Момент инерции и вращательный момент наноструктуры в системе (8) вычисляются при помощи следующих выражений:

$$I_j = \sum_{i=1}^{N_j} m_i r_i^2, \quad \mathbf{M}_j(t, \boldsymbol{\varphi}) = \mathbf{R}_j(t) \times \mathbf{F}_j(t, \mathbf{R}), \quad j = 1, 2, \dots, N_p. \quad (9)$$

По сравнению с аппаратом классической молекулярной динамики в методе мезодинамики частиц некоторое видоизменение получило определение силы в правой части (8):

$$\mathbf{F}_j(t, \mathbf{R}) = -\frac{\partial U(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}_j(t)} - M_j \mathbf{g} + \boldsymbol{\eta}_j(t) - \zeta \frac{M_j}{\tau_t} \frac{d\mathbf{R}_j(t)}{dt}, \quad j = 1, 2, \dots, N_p, \quad (10)$$

где \mathbf{g} – ускорение свободного падения; ζ – безразмерный коэффициент трения; τ_t – время релаксации; $\boldsymbol{\eta}_j(t)$ – случайная сила, приложенная к j -ой наноструктуре; \mathbf{R} – совокупность радиус-векторов всех наночастиц.

Первым слагаемым в (10) является градиент потенциала. Природа потенциальных сил, действующих в наносистеме, остается прежней, как и в методе молекулярной динамики. Для наночастицы градиент потенциала формируется посредством усреднения по всем атомам, входящим в наноструктуру. Силы тяжести введены в (10) в связи с ростом размеров и масс нанокластеров с течением времени. Величина $\boldsymbol{\eta}_j(t)$ имеет стохастическую природу и отражает взаимодействие наноструктур со свободными атомами наносистемы. Так как наночастица одновременно взаимодействует с большим числом атомов, то с высокой степенью точности можно считать силу $\boldsymbol{\eta}_j(t)$ распределенной по нормальному закону со следующими свойствами: $\boldsymbol{\eta}_j(t) \sim N(0, \sigma^2)$. Математическое ожидание случайной силы $\boldsymbol{\eta}_j(t)$ следует выбирать равным нулю, чтобы исключить направленное движение наноструктур под действием случайного фактора. Сила $\boldsymbol{\eta}_j(t)$

связывает подвижность наночастицы с коэффициентом трения и температурой, поэтому теоретически обоснованным является следующее определение ее среднеквадратического отклонения:

$$\sigma = \sqrt{2k_B T_i \frac{M_j}{\tau_i \Delta t}}, \quad j = 1, 2, \dots, N_p, \quad (11)$$

где k_B – постоянная Больцмана; T_i – целевая температура; Δt – шаг по времени.

Последним слагаемым в (10) служит сила трения, которая пропорциональна массе и скорости каждой наночастицы. Коэффициент ζ связан с мгновенной T и целевой (требуемой) T_i температурами наносистемы следующим уравнением:

$$\zeta = \vartheta \left(\frac{T}{T_i} - 1 \right), \quad (12)$$

где ϑ – эмпирический параметр, зависящий от формы наночастиц.

Агломерация наноэлементов в методе мезодинамики частиц обуславливается действующими силами взаимодействия и энергетически выгодными перестроениями. Как показали проведенные исследования [39], в задачах исследования конденсации основополагающую роль играют процессы объединения наноструктур (рис. 3), разделение происходит в редких случаях и может быть описано через параметры математической модели. Поэтому с достаточной степенью точности механизмами распада наночастиц в методе мезодинамики частиц можно пренебречь. На объединение наноструктур влияют следующие факторы: размеры и массы наночастиц; прикладываемые к ним силы; расстояние между взаимодействующими объектами; модуль и направление скоростей наноэлементов.

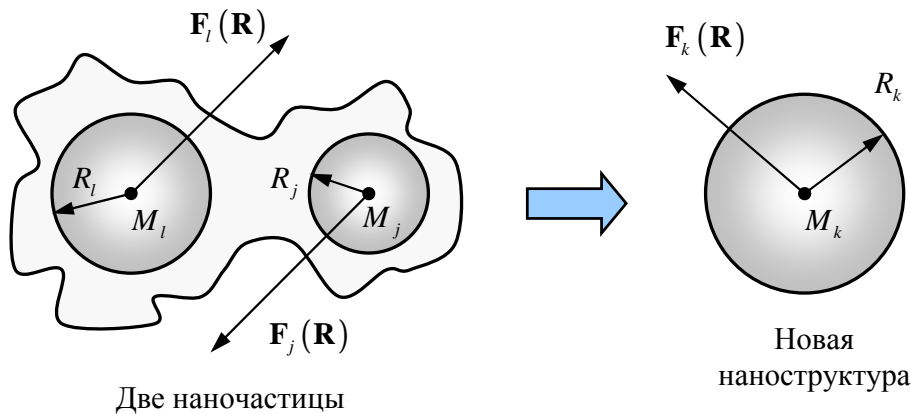


Рисунок 3 – Объединение нескольких наноструктур

Объединение двух наночастиц в одну происходит при достижении минимального значения потенциала, который реализуется на расстоянии R_{\min} :

$$U(R_{ij}) = U(R_{\min}) = U_{\min}, \quad l, j = 1, 2, \dots, N_p, \quad (13)$$

где R_{ij} – расстояние между наночастицами. Расстояние действия потенциала вычисляется с учетом размеров нанообъектов. В случае приближении наноэлементов на расстояние ближе, чем R_{\min} , происходит их объединение. Количество наночастиц при этом на единицу сокращается. Допущением модели является предположение о сферической форме наночастиц.

Координаты и скорости новых наноструктур при объединении определяются через уравнения центра масс [39]. Так как в модели мезодинамики наночастицы принимаются несжимаемыми, то размер новых нанообъектов вычисляется в соответствии с принципом сохранения объема:

$$M_k = M_l + M_j, \mathbf{R}_k = \frac{M_l \mathbf{R}_l + M_j \mathbf{R}_j}{M_k}, \boldsymbol{\varphi}_k = \frac{I_l \boldsymbol{\varphi}_l + I_j \boldsymbol{\varphi}_j}{I_k}, \mathbf{V}_k = \frac{M_l \mathbf{V}_l + M_j \mathbf{V}_j}{M_k}, \boldsymbol{\omega}_k = \frac{I_l \boldsymbol{\omega}_l + I_j \boldsymbol{\omega}_j}{I_k},$$

$$R_k = \sqrt[3]{R_l^3 + R_j^3}, \mathbf{F}_k = \mathbf{F}_l + \mathbf{F}_j, \mathbf{M}_k = \mathbf{R}_l \times \mathbf{F}_l + \mathbf{R}_j \times \mathbf{F}_j, l, j = 1, 2, \dots, N_p, \quad (14)$$

где индексы l и j принадлежат к сталкивающимся наночастицам, индекс k указывает на новую наночастицу, N_p после преобразований уменьшается на единицу.

Уравнения (14) используются только при объединении наночастиц.

В подмодели мезодинамики пространственные и временные масштабы увеличивались с учетом контроля энергии и параметров наносистемы. Увеличение пространственного размера осуществлялось через объединение симметрично отображенных образов расчетной области моделирования. Перемасштабирование системы производилось периодически, критерием увеличения ее размеров служило снижение концентрации наночастиц в объеме в кратное число раз.

Шаг интегрирования определялся как доля периода перемещений самых быстрых нанообъектов:

$$\Delta t = n_v \min_j \left(\frac{1}{v_j} \right) = n_v \min_j \left(\frac{h}{E_j} \right) = n_v \min_j \left(\frac{2h}{M_j \mathbf{V}_j^2 + I_j \boldsymbol{\omega}_j^2} \right),$$

$$\lambda_j = \frac{h}{M_j \mathbf{V}_j}, v_j = \frac{E_j}{h}, 0 < n_v \leq 1, j = 1, 2, \dots, N_p, \quad (15)$$

где h – постоянная Планка; E_j – энергия j -ой наночастицы; λ_j и v_j – параметры, аналогичные длине и частоте волны де Бройля атомов; $n_v \in (0, 1]$ – весовой параметр. Выбор Δt производится в первую очередь с учетом движения самых быстрых наноструктур. Для оптимизации и сокращения дополнительных вычислений пересчет шага интегрирования по времени производился через некоторое число итераций.

В работе были использованы адаптированные численные схемы интегрирования различного порядка точности для описания движения наноструктур в газовой среде, в том числе для уравнений вращательного движения. Численные методы до четвертого порядка точности используются в теории мезодинамики частиц, где увеличенное значение шага интегрирования требует применения устойчивых вычислительных схем. В отличие от ранее известных моделей исследования конденсации разработанная математическая модель дополнена впервые предложенным методом мезодинамики частиц с возможностью увеличения пространственного и временного масштабов и не требует поиска дополнительных параметров силового взаимодействия.

Во второй главе описан разработанный программно-инструментальный комплекс для теоретических исследований основополагающих процессов формирования, движения и взаимодействия наноструктур в газовой среде, общая структурная схема которого показана на рис. 4. Программный комплекс включает в себя блок подготовки исходных данных, вычислительный модуль, модуль визуализации и ана-

лиза и адаптированный межпрограммный блок согласования. Решение рассматриваемых задач осуществляется последовательно, направление переходов между блоками и модулями показано стрелками. На разработанный проблемно-ориентированный комплекс было получено авторское свидетельство о регистрации программного ресурса [46]. Предложенная организация комплекса использует различные языки программирования и имеет графический интерактивный интерфейс пользователя.

К основным алгоритмам анализа и визуализации результатов, реализованным в программном комплексе, относятся: выявление атомов, сгруппированных в наноструктуры; определение равномерности нанопленок и наноконструктов; установление химического состава и пропорций исходных элементов наноструктур; определение доли сконденсированных атомов и молекул; поиск структурных и размерных свойств нанообъектов; выяснение внутренней структуры наночастиц, нанопленок, подложек и анализ типовой наночастицы для данного материала. Проведенные исследования на сходимость, устойчивость, анализ эталонной структуры, демонстрация работы термостатов и баростатов и сопоставление результатов решения тестовых задач с ранее известными теоретическими и экспериментальными данными на разных масштабных уровнях подтверждают адекватность и корректность математической модели и свидетельствуют о достоверности полученных результатов моделирования. При этом средний уровень относительной погрешности составил порядка 2-4 %.

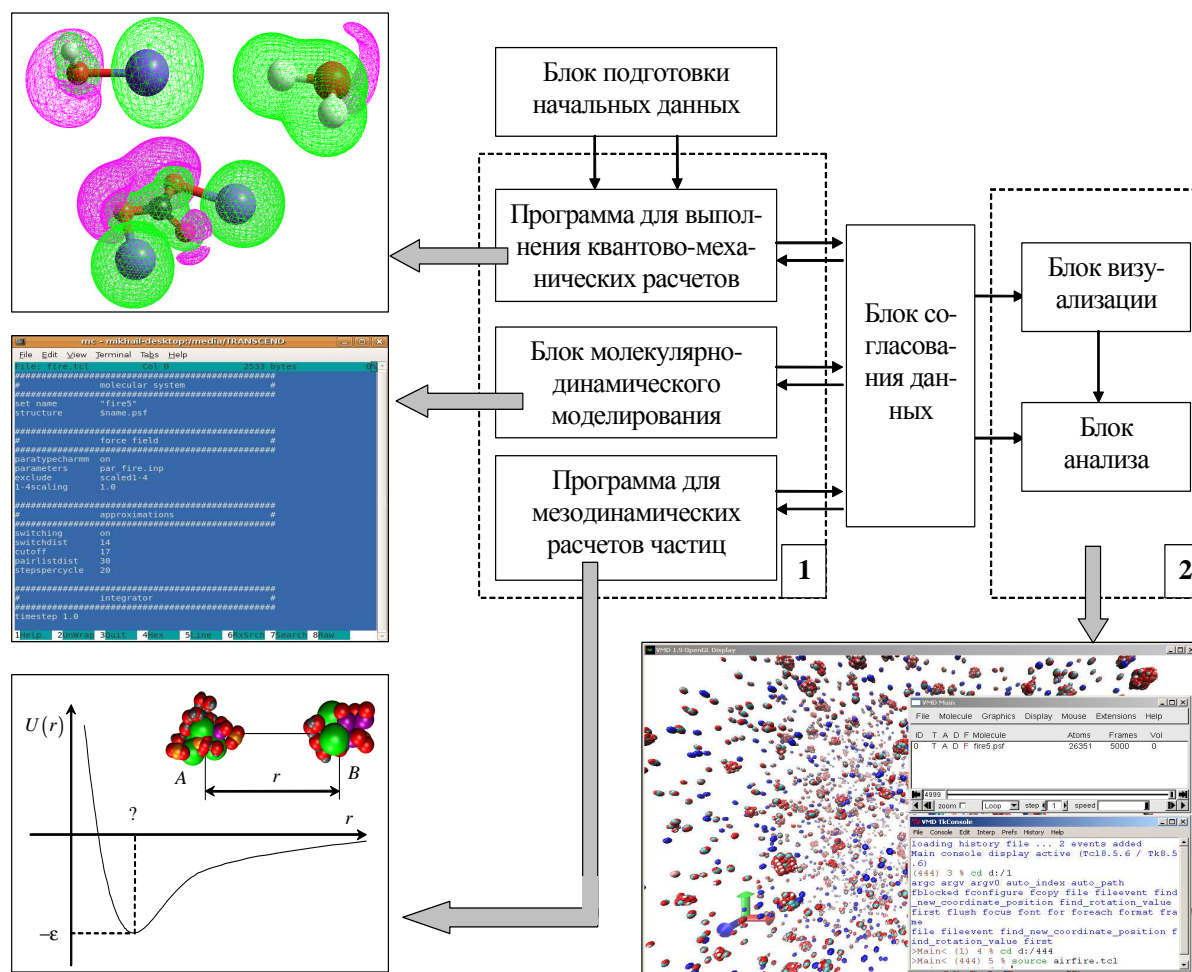


Рисунок 4 – Общая структура программно-инструментального комплекса:
1 – вычислительный модуль, 2 – модуль анализа и визуализации

Ценность созданного программного продукта заключается в широком потенциале его применения для изучения свойств и параметров новых однородных и нанокпозиционных материалов, а также возможности прогноза их свойств и разработки конкретного технологического процесса. Комплекс адаптирован для наносистем, содержащих газофазные среды, и поддерживает различные существующие форматы хранения данных для подобных задач.

В третьей главе приведены результаты решения задачи исследования образования, конденсации и роста наноструктур, используемых для питания растений из газовой среды [1, 8, 23, 32]. Моделирование показало, что в состав формируемых нанокластеров входят молекулы воды, оксида магния и карбоната калия. Молекулы азота, кислорода и углекислого газа остаются в течение всего времени в газообразном состоянии и присутствуют в наносистеме в качестве компонентов воздушной смеси, а также продуктов сгорания.

Процессы агломерации и роста нанообразований для разных исходных компонентов протекали с различной интенсивностью. На стадии охлаждения более активно в конденсации участвуют молекулы K_2CO_3 , с меньшей интенсивностью агломерируются молекулы оксида магния и воды. Прослеживается флуктуационный характер изменения массовой доли, который связан с незначительными силами притяжения между определенными атомами и молекулами. При моделировании методом молекулярной динамики из-за небольших сил нестабильные нанообъекты могут терять молекулы и распадаться на несколько меньших по размеру нанокластеров.

Неоднородности и нарушения гомогенности состава в наносистеме, присутствовавшие в распределении массы в первоначальные моменты, с течением времени нивелируются. В дальнейшем неравномерности состава уменьшаются и не превышают значения 5 % от итоговой массы газо-композиционной смеси.

Метод мезодинамики частиц позволил провести анализ процессов конденсации и роста наноструктур в пространственных и временных масштабах, приближенных к реальным, а также идентифицировать вид и характер изменения среднего размера и числа нанообъектов в единице объема. Зависимости среднего диаметра нанокластеров и числа наноэлементов в единице объема от времени представлены совместно на рис. 5. Вставкой на графике приведен снимок наноструктур, используемых для подкормки растений из газовой среды, полученный с помощью атомно-силового микроскопа. При рассмотрении малых масштабов наблюдалось почти линейное поведение данных параметров в зависимости от времени с отклонением в небольшом интервале значений. Расширенная шкала времени установила снижение интенсивности изменения функций и приближение их вида к асимптотическому. За счет роста массы нанообъектов их подвижность и степень взаимодействия уменьшились.

Вычисленные конечные величины среднего размера наночастиц и их числа в единице объема свидетельствуют о концентрации наноэлементов в воздушной среде, образованной после сжигания таблетки с минеральными удобрениями, равной $1,6-2,2 \text{ мг/м}^3$, что находится близко к предельно допустимому значению концентрации пылевых частиц.

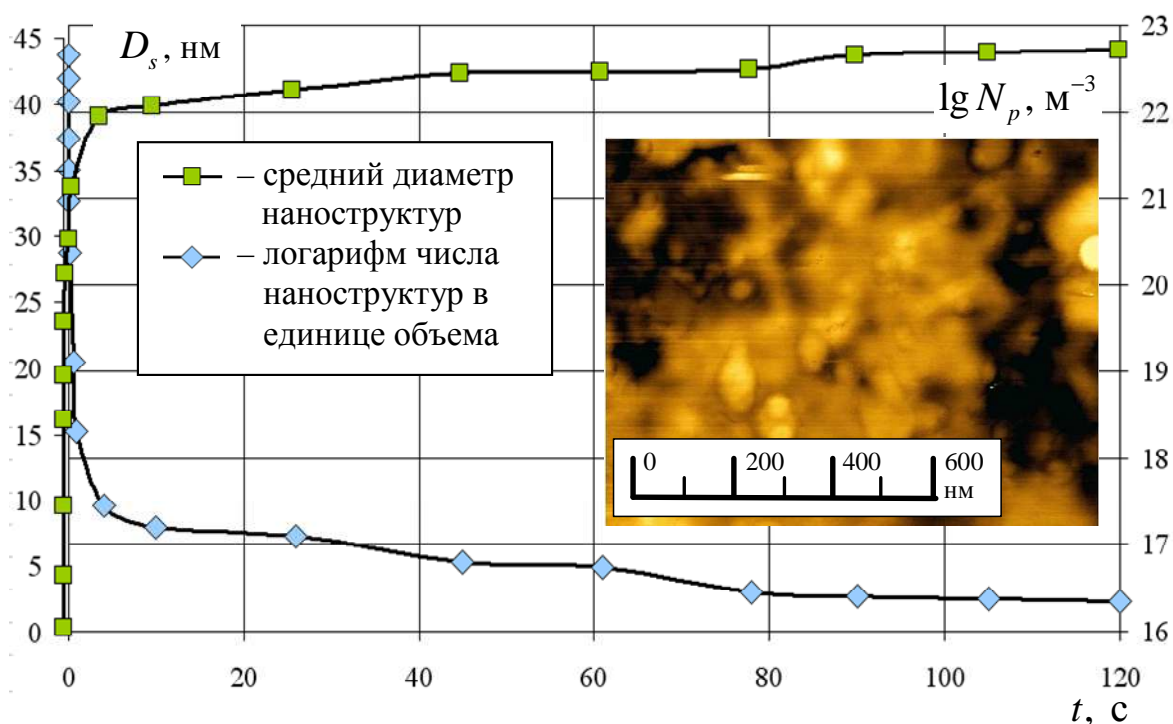


Рисунок 5 – Изменение среднего размера, числа наноструктур в единице объема и снимок наночастиц, используемых для подкормки растений из газовой среды, полученный с помощью атомно-силового микроскопа

Проведенные экспериментальные исследования показали наличие двухмодального распределения частиц по размерам с пиковыми значениями частот в области микро- и наномасштаба. Микронное распределение размеров частиц преимущественно соответствует продуктам горения, образуемым после сжигания минеральной твердотопливной таблетки. Распределение в нанометровом интервале, показанное на снимке рис. 5, определяет разброс диаметра наноструктур целевой подкормки растений.

Сопоставление экспериментальных данных и результатов моделирования в виде размерных распределений наночастиц свидетельствует об их удовлетворительном соответствии. Заметен однотипный характер поведения построенных зависимостей с ярко выраженным пиком и затуханием при удалении от среднего диаметра наноэлементов. Среднее значение размера нанообъектов, полученное моделированием, соответствует величине 44,1 нм. Аналогичный экспериментальный параметр равен 37,15 нм. Различие между полученными характеристиками составляет порядка 15 %.

Введение атомов серебра в качестве коагулирующего агента в наносистему является эффективным способом управления механизмами агломерации и роста наноструктур, используемых для питания растений из газовой среды. Добавление атомов серебра приводит к стимуляции образования новых центров конденсации, увеличению числа наноэлементов и способствует укрупнению уже существующих частиц. Интенсивность конденсации молекул карбоната калия, воды и оксида магния после введения атомов серебра в наносистему возросла в 2 раза и более.

В четвертой главе представлены результаты исследования процессов агломерации, роста и конденсации металлических наноструктур, полученных методом термического испарения и последующей конденсации [10, 12, 14, 19, 20]. Процесс формирования и роста металлических наноструктур был разделен на две основные стадии. На первой стадии происходит зарождение центров конденсации в виде наноэлементов, образованных свободными атомами металлов. Для второго этапа более характерно объединение уже сформировавшихся нанообъектов. Длительность и интенсивность стадий определяется типом и свойствами исходных металлов. Количество нанокластеров значительно растет на первой стадии и постепенно уменьшается на второй, являясь следствием укрупнения нанообразований.

Результаты численных экспериментов свидетельствуют, что при равных условиях охлаждения наносистемы до нормальной температуры скорость и интенсивность агломерации нанообъектов серебро-медь приблизительно в 10 раз выше, чем аналогично формируемых нанокластеров серебро-цинк. Показателем роста служит динамика среднего размера наноструктур. В первом случае средний диаметр вырос с 0,4 нм до 0,66 нм за 10 нс, во втором – с 0,4 нм до 0,86 нм за 170 нс. Поведение суммарного объема и поверхностной площади наноэлементов для данных составов было однотипным: первоначальное быстрое увеличение и последующее слабое изменение.

Исследования внутренней организации и покомпонентного содержания наноэлементов показали, что состав образованных наночастиц зависит от физико-химических свойств металлов и их количественной доли в наносистеме. Для наноструктур серебро-медь подавляющее большинство имело состав, соответствующий пропорции исходных материалов в начальном состоянии. Нанокластеры серебро-цинк формировались по другому принципу, и вариации в их составе не имели явной зависимости от начальной пропорции металлов. Скорость охлаждения наносистемы не оказывает существенного влияния на общее содержание двухкомпонентных наноструктур серебро-медь.

В проведенных вычислительных экспериментах нарушений гомогенности и равномерности состава металлических наносистем не наблюдалось. Неоднородности общего наноконпозиционного состава были незначительны и в сумме не превышали величины 10 % массы. Полученные флуктуации химического состава среды возникали на заключительных стадиях конденсации и вызваны смещением особенно крупных нанообразований в расчетной области.

На структуру, внутреннюю однородность и гомогенность формируемых металлических нанообъектов существенно влияет тип исходных материалов. Нанокластеры серебро-медь имеют смешанную структуру, наноэлементы серебро-цинк обладают оболочечным строением, трехкомпонентные наночастицы серебро-золото-цинк формируются многослойно, что подтверждает распределение их относительной плотности, показанное на рис. 6. Во всех случаях полостей внутри нанообразований не наблюдается.

Статистический анализ процессов образования и роста нанокластеров серебро-медь показал, что основные структурные и количественные параметры нанообъектов, продемонстрированные на рис. 7, такие, как средняя плотность, средняя массовая доля серебра, средний размер и количество наноэлементов в расчетной области согласно критерию Пирсона на уровне значимости 0,2 (доверительной вероятности 0,8) распределены по нормальному закону. Математические ожидания и среднеквадратические отклонения для данных свойств наночастиц соответственно составили: $\mu = 9,06$ и $\sigma = 0,30$; $\mu = 49,96$ и $\sigma = 0,88$; $\mu = 6,14$ и $\sigma = 0,12$; $\mu = 182,14$ и $\sigma = 6,84$.

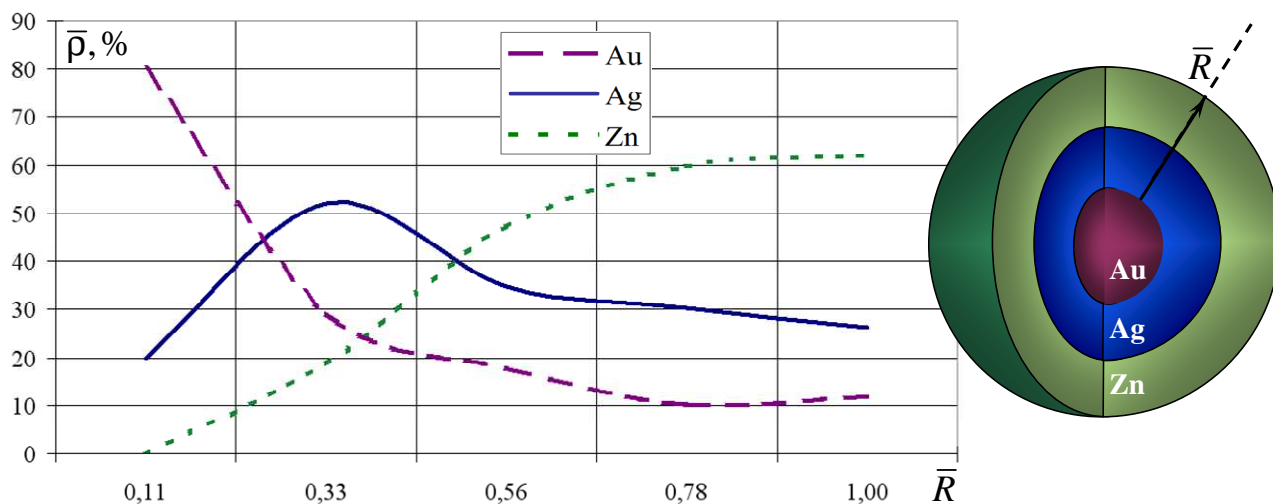


Рисунок 6 – Динамика относительной плотности $\bar{\rho}$ наноструктур серебро-золото-цинк в зависимости от безразмерного радиуса \bar{R}

Проверка гипотезы при помощи критерия Пирсона потребовала значительного объема выборки [10, 12]. При недостаточных объемах данных наблюдался рост величины критерия, в случае репрезентативного размера выборки значение критерия Пирсона уменьшалось. Статистические функции вариационного ряда рассматриваемых параметров имели линейный вид, хорошо аппроксимировались прямой линией и, следовательно, подтвердили гипотезу Пирсона о нормальном законе распределения. Сравнение вероятностных функций нормального закона и выборочных эмпирических функций на гистограмме распределения показало удовлетворительное соответствие выборочных и теоретических данных.

В пятой главе рассмотрены результаты моделирования формирования наноструктур, которые применяются в наноаэрозольных пожаротушащих системах [16, 22, 25]. Исследования процессов формирования наноструктур аэрозоля специального назначения показали, что активно конденсируются в агломераты молекулы карбоната калия, воды, оксидов магния и кальция. Наибольшую интенсивность объединения в нанокластеры имеет карбонат калия. Молекулы кислорода, углекислого газа и азота в процессах конденсации были задействованы незначительно. Указанные элементы на протяжении всей стадии охлаждения оставались преимущественно в газообразной среде и присутствовали в расчетном объеме в качестве компонентов атмосферно-воздушной смеси. Повышенное содержание углекислого газа объясняется протекающими процессами горения при срабатывании газогенератора.

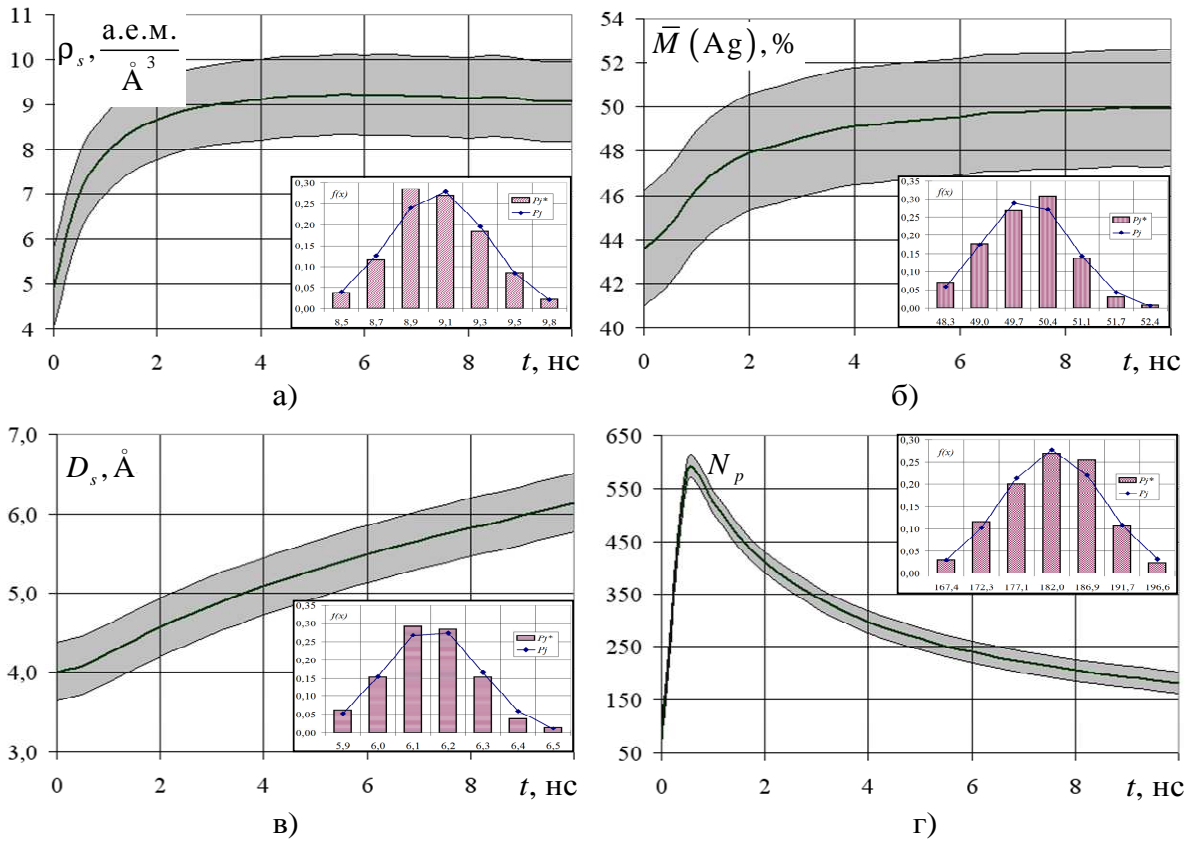


Рисунок 7 – Изменение статистически усредненных параметров наноструктур Ag-Cu с указанием предельной погрешности: а) плотности ρ_s , б) массовой доли серебра $\bar{M}(\text{Ag})$, в) диаметра D_s , г) числа нанобъектов в расчетной ячейке N_p

Активная конденсация молекул воды в наносистеме позволяет говорить о возможности эффективной эксплуатации газогенератора аэрозоля для пожаротушения в помещениях с вычислительной техникой и электрическим оборудованием, где попадание влаги внутрь электронных устройств является нежелательным. Также в процессе функционирования газогенератора дополнительно связывается порядка 5 % молекул свободного кислорода и образуется избыточное количество углекислого газа, что является одним из проверенных и надежных подходов подавления процессов горения и пожаротушения.

Методами многоуровневого математического моделирования получены основные характеристики аэрозольных систем специального назначения в момент времени 120 с, такие как средний размер наноструктур – 4,33 мкм и концентрации частиц – 10^{15} м^{-3} . Данные параметры представлены на рис. 8. Серия вычислительных экспериментов продемонстрировала, что с течением времени интенсивность изменения размерных и количественных функций для нанокластеров снижается, зависимости выходят на режим, близкий к стационарному, и варьируются незначительно.

По сравнению с моделированием наноструктур, используемых для питания урожайных культур из газовой среды, интенсивность агломерации в аэрозольных системах является на порядок более высокой. Итоговая концентрация нанокластеров, в свою очередь, имеет меньшее значение, чем в средах для питания растений. Нанозлементы в системе пожаротушающего газогенератора формируются крупнее, но в меньшем количестве.

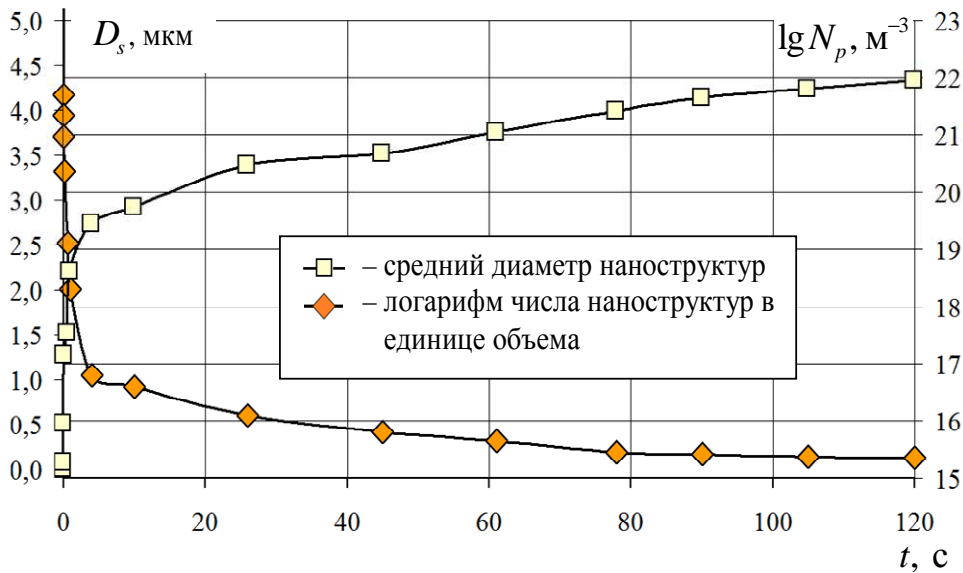


Рисунок 8 – Изменение среднего размера и числа наноструктур в единице объема для газогенератора пожаротушащего аэрозоля

Проведение экспериментальных исследований (рис. 9) при помощи аппаратного комплекса позволило установить, что итоговый диаметр нанообразований изменялся в диапазоне 0,3-12,1 мкм и соответствовал средней величине 3,87 мкм. Расхождение с аналогичным параметром, полученным при помощи математического моделирования, составляет 10,4 %. Сопоставление экспериментальных и теоретических данных в виде размерных распределений наночастиц свидетельствует об удовлетворительном соответствии полученных значений. Построенные гистограммы имеют однотипный характер с близкорасположенными пиковыми значениями вероятностных частот. В обоих случаях с увеличением размеров кластеров их количество значительно снижалось.

В шестой главе представлены результаты моделирования процессов осаждения фотоэлектрических нанопленок и эпитаксии на сплошных темплатах в условиях, близких к вакууму [24, 33]. Установлены различные варианты формирования наноструктур и нанопленок на темплатах кремния.

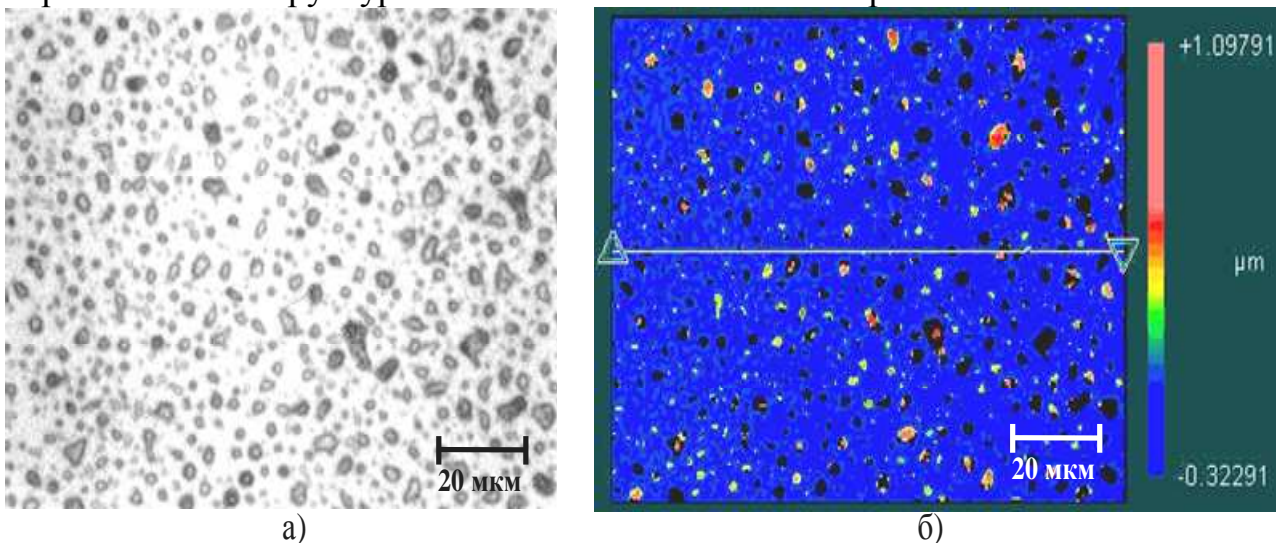


Рисунок 9 – Изображение а) и диаграмма высот б) стеклянной пластины размером 180×130 мкм с осадженными частицами состава пожаротушащего газогенератора

Золото собиралось в сферические нанокластеры непосредственно на поверхности подложки с последующим заполнением свободных областей кремнием на следующей стадии эпитаксии. Галлий в комбинации с золотом формировал нанопленку участками и регионами. Для индия была характерна агломерация в наночастицы над темплатом с дальнейшим осаждением на него. В этом случае галлий образовывал относительно ровный поверхностный слой. Двухкомпонентные наноконпозиты сурьма-кремний имели слоистую структуру с небольшим перемешиванием атомов в промежуточных областях. При осаждении галлия и сурьмы происходило формирование полноценных наноструктур, которые после напыления кремния превращались в квантовые точки (рис. 10). Для всех типов осаждаемых нанопленок структура подложки оставалась кристаллической на протяжении всего процесса наблюдения. Диффузия осаждаемых частиц внутрь темплата не происходила. Внутреннее строение напыляемых нанопленок и наноструктур преимущественно было аморфным. Исключение составляют нанокластеры золота и индия, их структура была близка к кристаллической.

Режимы молекулярно-лучевой эпитаксии, в том числе и температура подложки, оказывают существенное влияние на механизмы формирования наноструктур. Для наночастиц золота понижение температуры подложки от 800 К до 300 К привело к перестроению структуры от аморфной к кристаллической, что подтверждается соответствующими сравнениями параметров идеальности кристаллической решетки и координационных чисел. Повышение температуры подложки от 300 К до 800 К при формировании наноконпозита сурьма-галлий-кремний способствовало уменьшению числа наночастиц и росту их размеров (рис. 10). Также изменилась форма нанокластеров на обтекаемую и сферическую, а структура стала более плотной.

Технология изготовления фотоэлектрических нанопленок и наноструктур сурьмы, галлия и кремния на силицидных подложках методом молекулярно-лучевой эпитаксии была апробирована экспериментально и позволила подтвердить формирование островной структуры нанобъектов, которая ранее была получена при помощи математического моделирования.

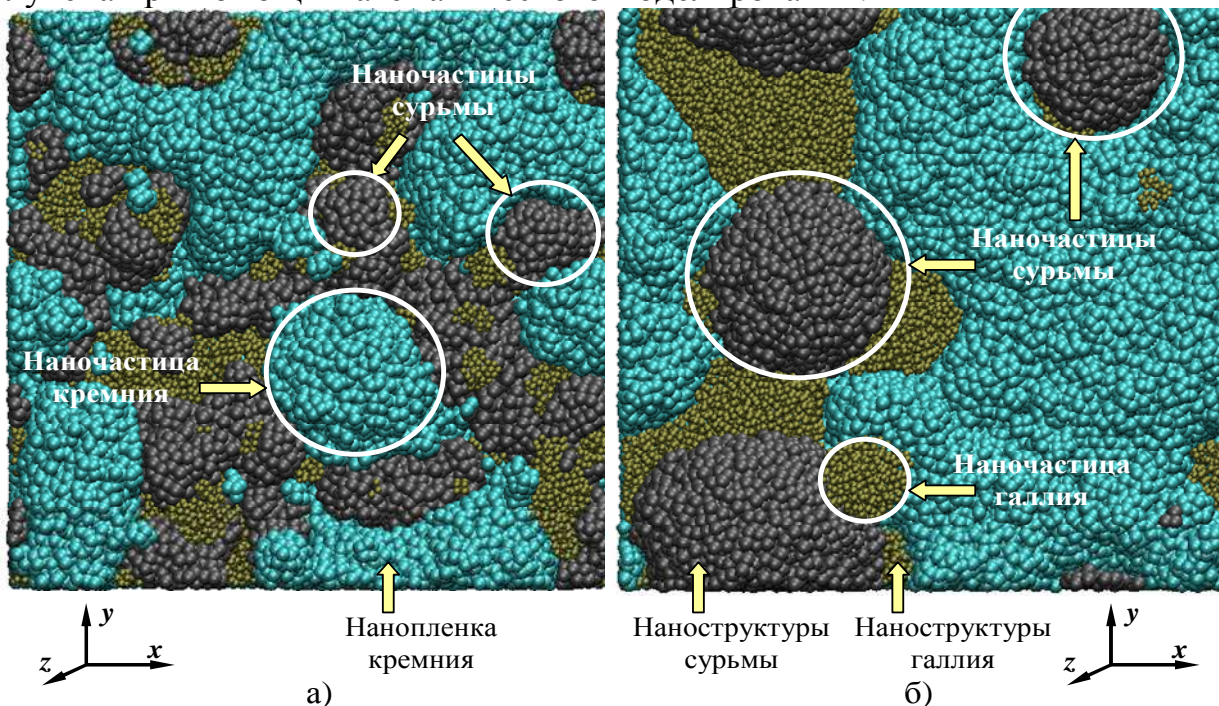


Рисунок 10 – Формирование наноструктур кремний-сурьма-галлий на подложке Si(100), подогретой до температуры а) 300 К и б) 800 К, время осаждения 0,4 нс

Методами математического моделирования был спрогнозированы вид, свойства и структура нового перспективного наноматериала специального назначения с внедрением квантовых точек на основе галлия и сурьмы в область кремниевой нанопленки. Интеграция квантовых точек приводит к росту чувствительности фотодиода до 4-5 %, что происходит за счёт значительного увеличения фотоотклика в диапазоне длин волн 1200-1600 нм.

Формирование кремниевых наноконпозитов со встроенными наноструктурами галлий-сурьма с высокой плотностью позволяет создавать новые материалы с управляемыми оптическими, термоэлектрическими и фотолюминесцентными свойствами. Такие системы используются в микроэлектронике как активные элементы светодиодов, фотоприемников и термоэлектрических преобразователей.

В седьмой главе приведены результаты поэтапного моделирования процессов образования нанопленок на матрицах пористого оксида алюминия методом дискретного термического испарения порошка в условиях высокого вакуума, которые позволили идентифицировать различные варианты формирования наноструктур и нанослойных покрытий [7, 26, 28, 31, 33]. Осаждение железа продемонстрировало, что агрегация атомов начиналась еще в вакууме, затем сгруппированные структуры собирались на поверхности подложки. Рельеф нанопленки образовывался неровный, с перепадами в несколько нм. При эпитаксии атомов серебра и золота нанопленка формировалась равномерная с небольшим проседанием в области поры, крупных структур в вакууме не возникало. Осаждение атомов германия и галлия приводило к островному формированию нанопленки, участками. Отдельно на подложке были видны сгруппированные наночастицы галлия. В процессе напыления палладия и платины отверстие не зарастало на протяжении всего времени осаждения, нанопленка формировалась равномерная. Для всех типов атомов единичные частицы достигали дна полости.

Наиболее полное и стабильное зарастивание поры, зафиксированное при напылении атомов галлия, показало, что активный рост количества частиц в поре происходит в начальный период времени и сопровождается интенсивной перестройкой атомарной структуры. Для разных размеров пор в темплате характерно вариативное положение центра масс наноструктуры галлия, образованной внутри нее (рис. 11). Для пор радиусом 2 и 3 нм центр масс формируется выше середины глубины ($H = 4$ нм). Увеличение радиуса отверстия до 5 нм и более привело к смещению центра масс на середину глубины поры, что указывает на достаточно плотное ее заполнение осаждаемыми атомами.

Как показано на рис. 12, процессы роста нанопленок и нанокластеров сульфида цинка свидетельствуют о неполном зарастивании полостей внутри подложки на уровне 3,5 % от общего числа осаждаемых атомов. Частичное заполнение пор хорошо согласуется с качественными и количественными экспериментальными результатами и требует поиска возможностей управления для формирования упорядоченных однотипных наноструктурированных матриц на основе оптических элементов и полупроводников.

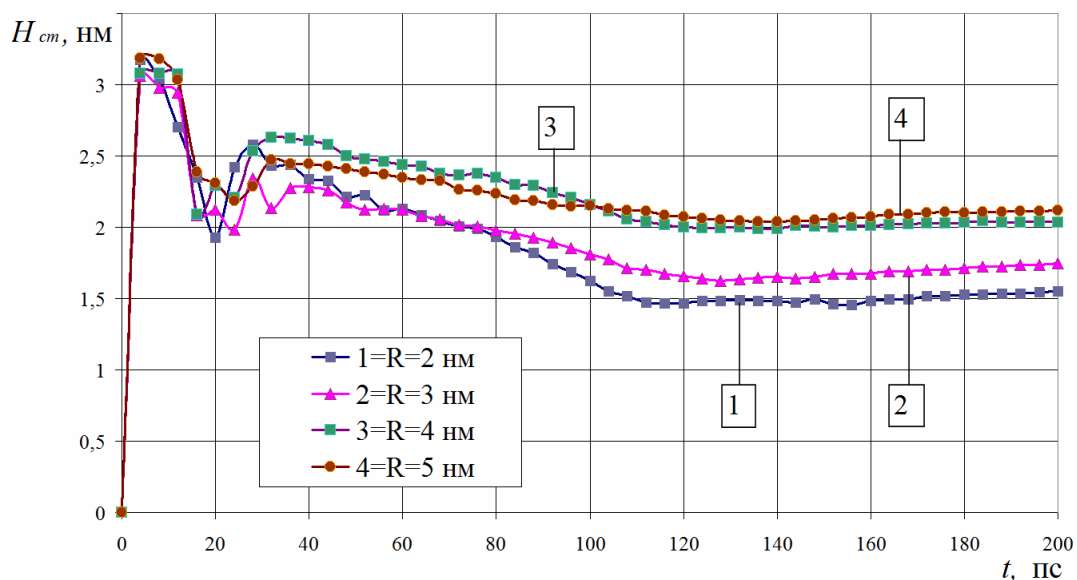


Рисунок 11 – Изменение глубины центра масс наноструктур внутри пор разного радиуса R при осаждении галлия на темплат пористого оксида алюминия

Введение легирующих добавок в виде меди и сульфида марганца с массовой долей 1-10 % на механизмы образования нанопленок из сульфида цинка и количественные их оценки существенного влияния не оказало. Данные присадки участвуют в процессах эпитаксии наравне с основным типом осаждаемых атомов и используются в технологических процессах для придания наночастицам и слоям желтого и зеленого цветов свечения. Анализ структуры материалов на основе сульфида цинка свидетельствует о преимущественно аморфном строении темплатов и сформированных нанопленок с незначительными участками кристаллизации, имеющими разную пространственную ориентацию. Момент окончания осаждения является ключевым для изменения структуры, после него наблюдалось перераспределение атомов и молекул в энергетически более выгодное состояние.

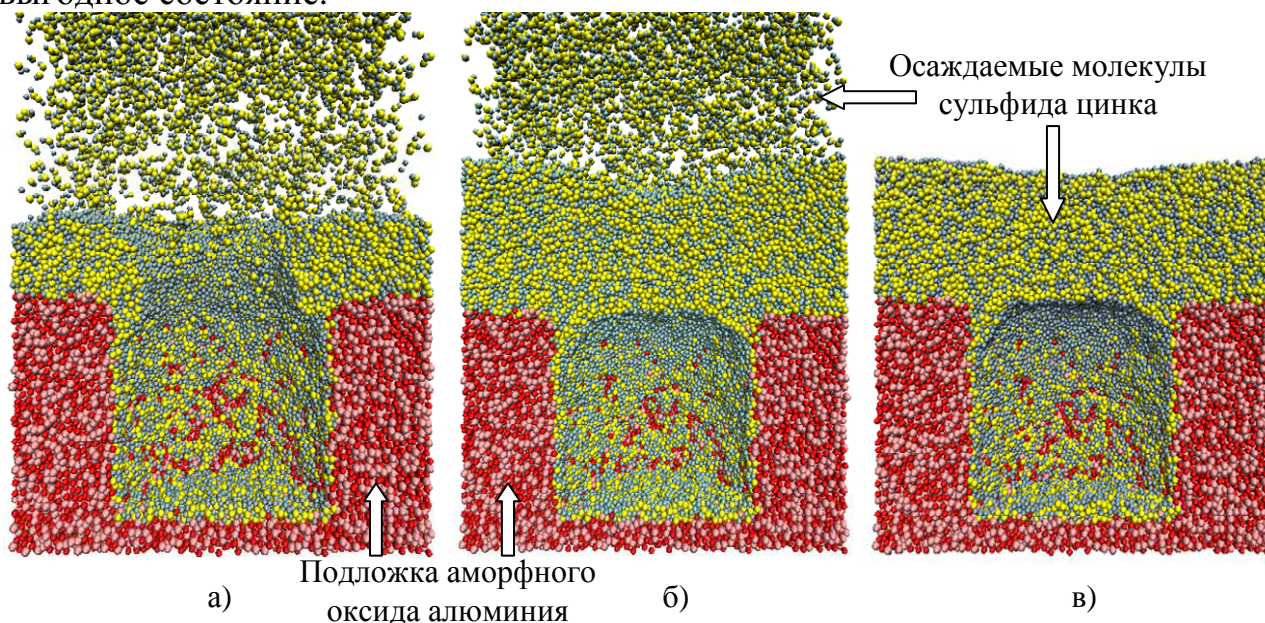


Рисунок 12 – Результат заращивания пористой подложки оксида алюминия сульфидом цинка для времени осаждения а) 0,2 нс, б) 0,4 нс и в) 0,6 нс

На примере осаждения атомов серебра показано, что фазовый переход из газового в жидкое и твердое состояние может быть идентифицирован по изменению энергии и температуры и происходит смешанно между точками плавления и кипения серебра при температуре $T = 1520 \text{ K}$.

При исследовании возможности управления процессами роста нанопленки и формирования массивов однотипных и упорядоченных наноструктур получено, что углы осаждения 0-60 градусов и спекание наносистемы до температур 293-593 K не приводят к существенному изменению свойств и размеров нанокластеров. Происходит незначительное перестроение структуры наноэлементов за счет температурных флуктуаций, но более плотного заполнения поры и изменения свойств нанопленок не наблюдается. Полученный результат может быть связан с повышенной температурой плавления оксидных элементов в наносистеме и высокими потенциальными барьерами, возникающими вблизи отверстия на подложке.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Предложенная многоуровневая математическая модель позволяет в динамике описать процессы формирования, взаимодействия и конденсации наноструктур в газовой среде, начиная от атомарно-электронного состояния и заканчивая верхним масштабным уровнем наноструктурных материалов, а также исследовать реальные технологические процессы и технические системы на наноуровне.
2. Разработанный программный комплекс позволяет сократить издержки на проведение дорогостоящих экспериментальных исследований в области нанотехнологий, визуализировать процессы конденсации и роста наноструктур, получить оптимальные технологические параметры изготовления наноматериалов.
3. Моделирование процессов образования и роста наноструктур, используемых для питания растений из газовой среды, показало, что в состав нанокластеров входят минеральные и активные элементы, в том числе молекулы воды, оксида магния и карбоната калия, приводящие к увеличению урожайности. Наноструктуры способны проникать в устьица растений вследствие их малого размера. Содержание наноэлементов в воздушной среде после сжигания таблетки с удобрениями составило $1,6-2,2 \text{ мг/м}^3$, что находится близко к предельно допустимой концентрации пылевых частиц. Введение коагулирующих добавок в наносистему является эффективным способом управления механизмами агломерации и роста наноструктур, так как приводит к образованию новых центров конденсации и способствует укрупнению уже существующих частиц.
4. Методами математического моделирования для технологии термического испарения и конденсации показана возможность создания нанокластеров разной структуры. Нанокластеры серебро-медь имеют смешанную структуру, наноэлементы серебро-цинк обладают оболочечным строением, наночастицы серебро-золото-цинк формируются многослойно. Процесс конденсации металлических наноструктур разделен на стадию объединения свободных атомов и стадию роста наночастиц. Основные свойства наноэлементов согласно критерию Пирсона распределены по нормальному закону и могут быть оценены интервально.

5. В рамках исследований пожаротушающих технических систем установлено, что после срабатывания газогенератора наноаэрозоля активно конденсируются в наноструктуры молекулы карбоната калия, оксидов магния и кальция, воды, при этом связывая порядка 5 % свободного кислорода и высвобождая избыточное количество углекислого газа, что является основным механизмом подавления реакции горения. При помощи моделирования подтверждена эффективность работы газогенератора в помещениях с электрооборудованием за счет активной агломерации воды в наноструктуры.
6. Средствами математического моделирования с учетом состава среды, термодинамических условий, внутренней структуры, рельефа поверхности, интенсивности роста и свойств наноэлементов подобраны параметры и режимы технологического процесса молекулярно-лучевой эпитаксии. В зависимости от осаждаемых составов формирование наноструктур и нанопленок на подложках кремния происходило в виде сферических нанокластеров (золото, индий), участков и регионов (галлий), равномерных нанопленок (кремний, сурьма) и внедренных квантовых точек (галлий, сурьма). Спрогнозированы вид, свойства и структура нового перспективного наноматериала фотоэлектрического назначения с внедрением квантовых точек на основе галлия и сурьмы в область кремниевой нанопленки.
7. Построенная математическая модель позволила идентифицировать различные варианты формирования наноструктур на пористых подложках, такие как рельефные (железо), равномерные с небольшим проседанием в области поры (золото, серебро, сульфид цинка), островные (германий, галлий), с отверстием над порой (палладий, платина) нанопленки. Пора полностью осаждаемыми атомами не заполнялась. Наиболее заполненное и стабильное формирование массивов однотипных и упорядоченных наноструктур было получено при осаждении галлия на подложку оксида алюминия с порами радиусом 5 нм и более, что может быть использовано в оптико-электронных системах. Показано, что введение легирующих добавок в виде меди и сульфида марганца с массовой долей 1-10 %, изменение углов осаждения 0-60 градусов и спекание до температур 293-593 К не позволяют эффективно управлять процессами роста наноструктур.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Vakhrushev A.A., Golubchikov V.B. Golubchikov E.V. The Plant Nutrition from the Gas Medium in Greenhouses: Multilevel Simulation and Experimental Investigation. – Chapter in the book "Plant Science". – Rijeka: InTech, 2012. – Pp. 65-104. (**WoS**)
2. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Shushkov A.A. Calculation of the Elastic Parameters of Composite Materials Based on Nanoparticles Using Multilevel Models. – Chapter in the book "Nanostructures, Nanomaterials, and Nanotechnologies to Nanoindustry". – New Jersey: Apple Academic Press, 2014. – Pp. 51-69. (**Scopus**)
3. Vakhrushev A.V., Severyukhin A.V., Fedotov A.Yu. Self-Organization of Nanoscale Structures by Epitaxial Deposition. – Chapter in the book "Applied Mathematical Models and Experimental Approaches in Chemical Science". – New York: Apple Academic Press, 2016. – Pp. 3-27. (**Scopus**)

4. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Severyukhin A.V., Valeev R.G. Computing Modeling of Filling Processes of Nanopores into Templates Aluminum Oxide by Atoms of Various Materials. – Chapter in the book "Physical Chemistry for Chemists and Chemical Engineer. Multidisciplinary Research Perspectives". – New Jersey: Apple Academic Press, 2018. – Pp. 127-157.
5. Fedotov A.Yu. Theoretical Bases of Simulation of Formation Processes of Nanostructures in a Gas Medium and Results of Numerical Studies of Nanosystems. – Chapter in the book "Advances in nanotechnology and the environmental sciences". – Palm Bay, Florida: Apple Academic Press, 2019. – Pp. 165-201.
6. Vakhrushev A.V., Valeev R.G., Fedotov A.Yu., Severyukhin A.V. Control of Nanosensors Forming on Base of Aluminum Template. – Chapter in the book "Dynamics and Control of Advanced Structures and Machines". – Cham: Springer, 2019. – Pp. 185-192.
7. Valeev R.G., Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Petukhov D.I. Nanostructured Semiconductors in Porous Alumina Matrices: Modeling, Synthesis, and Properties – Oakville, Canada: Apple Academic Press, 2019. – 284 p.
8. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Исследование процессов формирования композиционных наночастиц из газовой фазы методом математического моделирования // Химическая физика и мезоскопия. – 2007. – Т. 9, № 4. – С. 333-347.
9. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Моделирование формирования композиционных наночастиц из газовой фазы // Альтернативная энергетика и экология. – 2007. – № 10. – С. 22-26. (ВАК)
10. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Вероятностный анализ моделирования распределения структурных характеристик композиционных наночастиц, сформированных в газовой фазе // Вычислительная механика сплошных сред. – 2008. – Т. 1, № 3. – С. 34-45.
11. Вахрушев А.В., Земсков А.В., Федотов А.Ю. Программно-аппаратный комплекс для анализа равномерности перемешивания микро- и наноэлементов // Химическая физика и мезоскопия. – 2009. – Т. 11, № 4. – С. 421-429. (ВАК)
12. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Исследование вероятностных законов распределения структурных характеристик наночастиц, моделируемых методом молекулярной динамики // Вычислительная механика сплошных сред. – 2009. – Т. 2, № 2. – С. 14-21.
13. Вахрушев А.В., Аликин В.Н., Голубчиков В.Б., Федотов А.Ю. Нанобиотехнология выращивания растений // Нанотехнологии. Экология. Производство. – 2009. – №. 1. – С. 108-112.
14. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Вахрушев А.А., Шушков А.А., Шушков А.В. Исследование механизмов формирования наночастиц металлов, определение механических и структурных характеристик нанообъектов и композиционных материалов на их основе // Химическая физика и мезоскопия. – 2010. – Т. 12, № 4. – С. 486-495. (ВАК)
15. Земсков А.В., Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Алгоритм определения параметров равномерности перемешивания микро- и наноэлементов // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т. 13, № 1. – С. 37-42. (ВАК)
16. Вахрушев А.В., Голубчиков В.Б., Федотов А.Ю., Животков А.В. Многоуровневое моделирование процессов конденсации молекулярной смеси в аэ-

- розольных огнетушителях // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т. 13, № 3. – С. 340-350. **(ВАК)**
17. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Шушков А.А., Шушков А.В. Моделирование формирования наночастиц металлов, исследование структурных, физико-механических свойств наночастиц и нанокompозитов // Известия тульского государственного университета. Естественные науки, серия "Физика". – 2011. – № 2. – С. 241-253. **(ВАК)**
18. Вахрушев А.В., Шестаков И.А., Федотов А.Ю., Шушков А.А. Программный комплекс по расчету статики и динамики комбинированного нанодвигателя на основе кинезина // Известия тульского государственного университета. Естественные науки, серия "Физика". – 2011. – № 2. – С. 254-264. **(ВАК)**
19. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Vakhrushev A.A. Modeling of Processes of Composite Nanoparticle Formation by the Molecular Dynamics Technique. Part 1. Structure of Composite Nanoparticles // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2011. – Vol. 2, Issue 1. – Pp. 9-38. **(Scopus, WoS)**
20. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Vakhrushev A.A. Modeling of Processes of Composite Nanoparticle Formation by the Molecular Dynamics Technique. Part 2. Probabilistic Laws of Nanoparticle Characteristics // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2011. – Vol. 2, Issue 1. – Pp. 39-54. **(Scopus, WoS)**
21. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Vakhrushev A.A., Golubchikov V.B., Givotkov A.V. Multilevel Simulation of the Processes of Nanoaerosol Formation. Part 1. Theory Foundations // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2011. – Vol. 2, Issue 2. – Pp. 105-132. **(Scopus, WoS)**
22. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Vakhrushev A.A., Golubchikov V.B., Givotkov A.V. Multilevel Simulation of the Processes of Nanoaerosol Formation. Part 2. Numerical Investigation of the Processes of Nanoaerosol Formation for Suppression of Fires // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2011. – Vol. 2, Issue 3. – Pp. 205-216. **(Scopus, WoS)**
23. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Vakhrushev A.A., Golubchikov V.B., Givotkov A.V. Multilevel Simulation of the Processes of Nanoaerosol Formation. Part 3. Numerical Investigations of Nanoaerosols for Feeding Plants from the Gas Phase // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2011. – Vol. 2, Issue 4. – Pp. 309-322. **(Scopus, WoS)**
24. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Северюхин А.В., Суворов С.В. Моделирование процессов получения специальных наноструктурных слоев в эпитаксиальных структурах для утонченных фотоэлектрических преобразователей // Химическая физика и мезоскопия. – 2014. – Т. 16, № 3. – С. 364-380. **(ВАК)**
25. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Многоуровневое математическое моделирование процессов конденсации в аэрозольных наносистемах // Альтернативная энергетика и экология. – 2014. – № 8. – С. 8-21. **(ВАК)**
26. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Северюхин А.В., Валеев Р.Г. Моделирование процессов осаждения нанопленок на подложку пористого оксида алюминия // Химическая физика и мезоскопия. – 2015. – Т. 17, № 4. – С. 511-522. **(ВАК)**
27. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Северюхин А.В., Валеев Р.Г. О структуре осаждаемых нанопленок Zn-S на подложках оксида алюминия // Химическая физика и мезоскопия. – 2016. – Т. 18, № 3. – С. 349-360. **(RSCI)**

28. Вахрушев А.В., Северюхин А.В., Федотов А.Ю., Валеев Р.Г. Исследование процессов осаждения нанопленок на подложку из пористого оксида алюминия методами математического моделирования // Вычислительная механика сплошных сред. – 2016. – Т. 9, № 1. – С. 59-72. (**BAK, RSCI**)
29. Вахрушев А.В., Северюхин А.В., Федотов А.Ю., Северюхина О.Ю. Исследование теплофизических свойств наноматериалов на основе кремния методом Green-Kubo с использованием потенциала EDIP // Химическая физика и мезоскопия. – 2016. – Т. 18, № 2. – С. 187-198. (**RSCI**)
30. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Golubchikov V.B. Theoretical Bases of Modeling of Nanostructures Formed from the Gas Phase // International Journal of Mathematics and Computers in Simulation. – 2016. – Vol. 10. – Pp. 192-201. (**Scopus**)
31. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Северюхин А.В., Валеев Р.Г. Влияние размерных параметров пор на механизмы формирования нанопленочных покрытий на подложках пористого оксида алюминия // Вестник ЮУрГУ. Серия "Математическое моделирование и программирование". – 2017. – Т. 10, № 2. – С. 83-97. (**Scopus, WoS**)
32. Федотов А.Ю. Моделирование процессов образования и свойств наноструктур и нанопленок, сформированных в газовой среде // Химическая физика и мезоскопия. – 2017. – Т. 19, № 2. – С. 230-249. (**RSCI**)
33. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Severyukhin A.V., Valeev R.G. On the Structure and Properties of Nanofilms Deposited on Porous Aluminum Oxide Substrates // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2017. – Vol. 8, Issue 3. – Pp. 167-192. (**Scopus, WoS**)
34. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Леконцев А.Т. Моделирование механических свойств и процесса разрушения нанокомпозитов Al/Cu // Интеллектуальные системы в производстве. – 2019. – Т. 17, № 3. – С. 48-54. (**BAK**)
35. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Савва Ю.Б., Сидоренко А.С. Моделирование процессов формирования сверхпроводящего спинового вентиля на основе многослойной наноструктуры "сверхпроводник-ферромагнетик" // Химическая физика и мезоскопия. – 2019. – Т. 21, № 3. – С. 362-374. (**RSCI**)
36. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Valeev R.G. Simulation of Control Processes for Deposition of Nanofilms on Porous Alumina Substrates // WSEAS transactions on applied and theoretical mechanics. – 2019. – Vol. 14. – Pp. 145-152. (**Scopus**)
37. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu. Simulation of Deformation and Fracture processes in nanocomposites // Frattura ed Integrita Strutturale. – 2019. – Vol. 49. – Pp. 370-382. (**Scopus, WoS**)
38. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Теоретические основы моделирования процессов формирования и взаимодействия наночастиц в газовой среде // Химическая физика и мезоскопия. – 2020. – Т. 22, № 1. – С. 70-84. (**RSCI**)
39. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Савва Ю.Б., Сидоренко А.С. Моделирование процессов формирования атомарной структуры сверхпроводящего спинового вентиля // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2020. – № 2. – С. 16-27. (**Scopus, RSCI**)
40. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu. The study of nucleation and condensation of nanostructures in the gaseous medium // European Physical Journal: Special Topics. – 2020. – Vol. 229, Issue 2-3. – Pp. 305-314. (**Scopus, WoS**)

41. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Boian V., Morari R., Sidorenko A.S. Molecular dynamics modeling of the influence forming process parameters on the structure and morphology of a superconducting spin valve // *Beilstein Journal of Nanotechnology*. – 2020. – Vol. 11, Issue 1. – Pp. 1776-1788. (**Scopus, WoS**)
42. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Сидоренко А.С., Кленов Н.В., Соловьев И.И. Моделирование процесса формирования интерфейса многослойной наносистемы Nb/Co // *Химическая физика и мезоскопия*. – 2020. – Т. 22, № 4. – С. 372-382. (**RSCI**)
43. Sidorenko A.S., Morari R.A., Boian V., Prepelitsa A.A., Antropov E.I., Savva Y.B., Fedotov A.Yu., Sevryukhina O.Yu., Vakhrushev A.V. Hybrid nanostructures superconductor-ferromagnet for superconducting spintronics // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2021. – Vol. 1758, Issue 1. – Pp. 012037.1-5. (**Scopus**)
44. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Sidorenko A.S. Simulation of Multilayer Nanostructures Interface Formation Process for Spintronics // *Key Engineering Materials*. – 2021. – Vol. 888. – Pp. 57-65. (**Scopus**)
45. Fedotov A.Yu., Vakhrushev A.V., Sevryukhina O.Yu., Sidorenko A.S., Savva Y.B., Klenov N.V., Soloviev I.I. Theoretical Basis of Quantum-Mechanical Modeling of Functional Nanostructures // *Symmetry*. – 2021. – Vol. 13, Issue 5. – Pp. 883.1-20. (**Scopus, WoS**)
46. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Вахрушев А.А., Суетин М.В. Патент № 2301771 Рос. Федерации, МПК В82В 3/00. Способ и устройство перемешивания наночастиц; заявитель и патентообладатель Институт прикладной механики УрО РАН; опубл. 27.06.07, Бюл. № 18.
47. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Свидетельство о регистрации электронного ресурса №17335. Программный комплекс для многоуровневого моделирования процессов формирования гетерогенных наночастиц ComplexDyn v.5.0; опубл. 19.07.2011.
48. Вахрушев А.В., Шушков А.А., Зыков С.Н., Федотов А.Ю. Патент № 2611698 Рос. Федерации, МПК В82У 35/00 (2011.01), G01N 3/40 (2006.01). Способ определения модуля упругости Юнга материала микро- и наночастиц; заявитель и патентообладатель ФГБУН Институт механики УрО РАН; опубл. 28.02.2017.