

У Т В Е Р Ж Д А Ю
Директор
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
«Удмуртский федеральный
исследовательский центр Уральского
отделения Российской академии наук»

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук» (УдмФИЦ УрО РАН)

Диссертация «Многоуровневое математическое моделирование процессов формирования наноструктур в газовой среде» выполнена в отделе моделирования и синтеза технологических структур Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук».

В период подготовки диссертации соискатель Федотов Алексей Юрьевич работал в должности старшего научного сотрудника отдела моделирования и синтеза технологических структур Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук».

В 2005 г. окончил с отличием Ижевский государственный технический университет с присвоением квалификации инженер-математик по специальности «Прикладная математика». В 2008 г. Федотов А.Ю. защитил кандидатскую диссертацию «Математическое моделирование процессов формирования композиционных наночастиц в газовой среде» по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Ученая степень кандидата физико-математических наук присуждена 10 июня 2008 г, диплом ДКН № 067866.

Научный консультант – доктор физико-математических наук, профессор, Вахрушев Александр Васильевич, главный научный сотрудник отдела моделирования и синтеза технологических структур Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук».

По итогам обсуждения диссертации принято следующее **заключение:**

Личное участие соискателя ученой степени в получении результатов, изложенных в диссертации. Автором диссертационной работы проведен научно-информационный поиск и анализ состояния проблемы; разработаны теоретические положения для создания многоуровневой математической модели, описывающей процессы формирования, взаимодействия, конденсации и роста наноструктур в газовой среде на протяжении всего их жизненного цикла. Для описания механизмов коагуляции предложен метод мезодинамики частиц с возможностью увеличения пространственного и временного масштабов. Реализовано согласование уравнений различных уровней математической модели. Применительно к модели адаптированы численные алгоритмы различного порядка точности, реализованные в виде отдельного программного комплекса для исследования свойств наноструктур. Проведены комплексные численные исследования ряда технологических процессов изготовления и эксплуатации образцов из наноматериалов в газовых средах, в том числе выполнен анализ данных моделирования, и разработаны рекомендации по практическому использованию полученных результатов.

Степень достоверности результатов проведенных исследований подтверждается удовлетворительным соответствием результатов численного моделирования и экспериментальных данных для задач питания растений из газовой среды, исследования работы газогенератора пожаротушащего наноаэрозоля, осаждения нанопленок на пористые подложки оксида алюминия. Проведены исследования на сходимость и устойчивость.

Научная новизна результатов проведенных исследований заключается в следующем:

Разработана многоуровневая математическая модель, использующая метод мезодинамики частиц, описывающая процессы конденсации и агломерации наноструктур с учетом их вращательного движения и включающая соотношения для описания воздействий потенциальных полей, внешней среды в виде стохастической сбалансированной составляющей и силы трения для корректировки термодинамических параметров.

С помощью разработанной модели решена задача образования и роста наноструктур, используемых для питания растений из газовой среды, выявившая, что в состав нанокластеров входят молекулы воды, оксида магния и карбоната калия. Молекулы азота, кислорода и углекислого газа остаются в газообразном состоянии. Исследовано влияние добавок атомов серебра в наносистему, приводящих к образованию новых центров конденсации и способствующее укрупнению уже существующих частиц.

Показано, что для технологии термического испарения и последующей конденсации металлических наночастиц на структуру, внутреннюю однородность и гомогенность 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. Основные структурные и количественные параметры нанообъектов распределены по нормальному закону.

При исследовании пожаротушающего аэрозоля установлено, что в механизмах агломерации активно участвуют элементы твердой фазы и вода, остальные компоненты наносистемы в процессах конденсации были задействованы незначительно. Рассматриваемый состав газогенератора аэрозоля является эффективным для подавления процессов горения за счет активной конденсации воды, связывания свободного кислорода и высвобождения избыточного количества углекислого газа.

Решение задачи образования и роста наноструктур при молекулярно-лучевой эпитаксии позволило выявить различные варианты формирования наноструктур и нанопленок на темплатах кремния. Были зафиксированы режимы возникновения квантовых точек, слоистых нанопленок, нанопокровов смешанного типа и изолированных нанокластеров. Показано, что температура подложки оказывает существенное влияние на механизмы формирования наноструктур. Спроектирован новый перспективный нанокompозит специального назначения с внедрением квантовых точек, для которого характерно повышение чувствительности фотодиода за счёт увеличения фотоотклика.

Численное поэтапное моделирование процессов образования нанопленок на матрицах пористого оксида алюминия в условиях высокого вакуума выявило различные варианты формирования наноструктур и нанослойных покрытий в зависимости от исходных элементов осаждения. Введение легирующих добавок в напыляемый состав на механизмы образования нанопленок и количественные их характеристики существенного влияния не оказало. Исследование возможности управления процессами роста нанопленок и формирования массивов однотипных и упорядоченных наноструктур показало, что изменение углов осаждения и температур спекания не приводят к существенному изменению свойств и размеров нанокластеров, происходит только незначительное перестроение их структуры.

Практическая значимость результатов проведенных исследований. Результаты диссертационной работы в виде математических моделей, численных алгоритмов и прикладных программ расчета процессов конденсации, движения, формирования, взаимодействия наноструктур и внедрения их в поверхностные слои твердых материалов используются в учебном процессе ФГБОУ ВО «Ижевский государственный технический университет имени М.Т. Калашникова» при подготовке бакалавров и магистров по направлению «Нанотехнологии и микросистемная техника».

Разработанная математическая модель может быть использована для совершенствования проектирования процессов изготовления и исследования функционирования наноматериалов, где механизмы их 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 акта внедрения результатов диссертационной работы в производственные процессы ООО «Научно-производственная фирма «НОРД». Практическая значимость работы заключается в создании программно-вычислительного комплекса для ЭВМ, предназначенного для

оптимизации и проектирования новых перспективных наноматериалов с управляемыми механическими, термоэлектрическими, оптическими и фотолюминесцентными свойствами.

Ценность научных работ соискателя. Результаты, представленные в докторской диссертации Федотова Алексея Юрьевича, обладают ценностью по заявленной автором проблематике – математическое моделирование свойств и поведения наноструктурных материалов.

Построены математические модели, описывающие перемещение и взаимодействие наночастиц с учетом их вращательного движения и включающие в себя воздействие потенциальных полей, внешней среды в виде стохастической сбалансированной составляющей и силы трения для корректировки термодинамических параметров. Разработанные теоретические положения позволили проанализировать и выявить закономерности многомасштабных процессов формирования и агломерации наноструктур, внедрения их в поверхностные слои твердых материалов.

Проведены комплексные исследования состава, свойств, интенсивности роста и концентрации наноструктур, используемых для питания растений из газовой среды, позволившие подтвердить эффективность и безопасность данного способа внесения удобрений и продемонстрировавшие возможность управления механизмами агломерации и роста нанокластеров через дополнительное введение в состав атомов серебра.

Выполнен анализ закономерностей формирования металлических наночастиц для технологии термического испарения и последующей конденсации при различных режимах, составах и соотношениях исходных металлов, показавший возможность создания наноструктур разного строения в зависимости от типов исходных материалов.

С использованием разработанных математических моделей изучены процессы формирования наноструктур аэрозоля специального назначения, используемого в пожаротушащих системах, установившие активные компоненты состава и принципы их работы.

Численно исследованы механизмы образования, структурирования, роста нанозлементов и внедрения их в поверхностные слои сплошных и пористых материалов для технологий молекулярно-лучевой эпитаксии и дискретного термического испарения порошка в условиях вакуума, позволившие идентифицировать различные варианты формирования наноструктур и нанопленок с целью проектирования новых материалов с управляемыми оптическими, термоэлектрическими, полупроводниковыми и фотолюминесцентными свойствами.

Методами математического моделирования 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 нанокompозитов со встроенными наноструктурами галлий-сурьма

высокой плотности позволяет создавать новые материалы с управляемыми оптическими, термоэлектрическими и фотолюминесцентными свойствами.

Полнота изложения материалов диссертации в опубликованных работах. Материалы диссертации Федотова А.Ю. достаточно полно представлены в опубликованных 94 печатных работах. В соответствии с требованиями «Положения о присуждении ученых степеней» соискателем опубликовано 12 статей в журналах из списка ВАК РФ, 26 публикаций, включенных в зарубежные базы цитирования Web of Science, Scopus, Russian Science Citation Index, 7 глав в книгах и монографиях, 49 статей в сборниках научных трудов и материалов конференций, 2 патента, свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Список основных публикаций по теме диссертации:

1. 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. (284 стр. / 71 стр.)

В книге приведены результаты моделирования и экспериментальных исследований свойств наноструктур и нанопленок, формируемых на подложках пористого оксида алюминия. Соискателем (совместно с одним из соавторов) предложена математическая модель для описания процессов роста наноструктурных пленок. Применительно к модели адаптированы и представлены численные алгоритмы различного порядка точности. Основная часть результатов имитационного моделирования получена лично соискателем. Проиллюстрированы варианты эпитаксиального зародивания пористых подложек оксида алюминия различными составами, в том числе атомарными, молекулярными и с дополнительными примесями. Построены оценочные зависимости проникновения атомов внутрь поры и степени ее заполнения. Полученные результаты численных экспериментов удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

2. Вахрушев А.В., Голубчиков В.Б., **Федотов А.Ю.**, Животков А.В. Многоуровневое моделирование процессов конденсации молекулярной смеси в аэрозольных огнетушителях // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т. 13, № 3. – С. 340-350. (**ВАК**) (11 стр. / 4 стр.)

В публикации рассматриваются процессы конденсации воздушно-капельной смеси, возникающие при использовании аэрозольных огнетушителей. Соискателем совместно с соавторами сформулирована многоуровневая математическая модель процессов конденсации молекулярной смеси. Лично соискателем предложена процедура согласования уравнений и передачи данных между уровнями модели, основанными на методах квантовой механики, молекулярной динамики, мезодинамики частиц. Результаты моделирования количественных, структурных и размерных свойств наночастиц из аэрозольной смеси специального назначения также получены лично соискателем.

3. 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**) (28 стр. / 7 стр.)

Статья является одной из цикла работ, посвященных исследованию технических систем с газогенератором наноаэрозоля. Соискателем совместно с соавторами описана постановка задачи и приведены теоретические основы моделирования подобных наносистем. Предложена многоуровневая математическая модель процессов конденсации

молекулярных смесей. Модель основывается на методах квантовой механики, молекулярной динамики и мезодинамики частиц. Лично соискателем предложен метод мезодинамики частиц, являющийся одним из уровней математической модели и описывающий движение, взаимодействие и рост сформировавшихся нанокластеров. Также соискателем сформулированы принципы увеличения пространственных и временных масштабов в модели, позволившие получить конечные характеристики наночастиц аэрозолей специального назначения.

4. 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**) (12 стр. / 4 стр.)

Статья посвящена исследованию технических систем с газогенератором оптически прозрачного наноаэрозоля, используемого для пожаротушения. Исследования проводились при помощи математического моделирования. Лично соискателем проведены численные эксперименты. Соискателем совместно с соавторами проанализированы основные механизмы образования, движения, перемешивания и конденсации наночастиц. Получены количественные, размерные и структурные свойства наночастиц и наноаэрозольных систем. Показана динамика развития процессов образования и взаимодействия нанокластеров в аэрозольной смеси.

5. Вахрушев А.В., **Федотов А.Ю.** Многоуровневое математическое моделирование процессов конденсации в аэрозольных наносистемах // *Альтернативная энергетика и экология*. – 2014. – № 8. – С. 8-21. (**ВАК**) (14 стр. / 7 стр.)

В работе рассмотрены результаты исследований вакуумной, воздушной и аэрозольной наносистем. Соискателем совместно с соавтором представлена методика моделирования и описаны результаты исследований процессов конденсации нанообъектов. Лично соискателем подготовлены и реализованы алгоритмы анализа результатов, построены зависимости скорости конденсации наночастиц, изменения их размеров и состава. Также лично соискателем методами математического моделирования показана возможность создания разной структуры металлических наночастиц, полученных испарением, термическим насыщением и последующей конденсацией пара вблизи холодной поверхности. Численно вычислены свойства и состав наночастиц минеральных солей, используемых для питания растений через поры, и наноструктур, применяемых в аэрозольных огнетушащих газогенераторах.

6. 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**) (10 стр. / 4 стр.)

Статья посвящена исследованию процессов конденсации наночастиц из газовой фазы для наноаэрозольных и нанокомпозитных систем. Соискателем совместно с соавторами предложен метод определения механических и структурных свойств наночастиц. Проведен теоретический анализ упругих характеристик композитов и их составляющих, в том числе наночастиц. Лично соискателем получены результаты расчетов образования наночастиц металлов при вакуумном испарении и конденсации. Также соискателем вычислены размерные и морфологические свойства образующихся нанообъектов. Совместно с соавторами сформулированы особенности структурного поведения нанообъектов и композитов на их основе.

7. 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. (**ВАК, RSCI**) (14 стр. / 5 стр.)

В работе приведена методика описания процессов осаждения нанопленок на подложку из пористого алюминия. Применительно к решаемой задаче соискателем адаптированы и представлены уравнения, составляющие основу потенциала модифицированного метода погруженного атома. В качестве осаждаемых материалов рассматривались золото, серебро, железо, галлий, германий и палладий. Вычислительные эксперименты, проведенные соискателем совместно с соавторами, показали, что существуют разные механизмы зарастания пористой подложки из оксида алюминия данными материалами. Установлено, что пора, заполненная атомами, может рассматриваться как квантовая точка и использоваться для получения оптических и электрических эффектов. Сформулированы практические рекомендации для производства нанопленочных материалов различной структуры.

8. **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**) (20 стр. / 20 стр.)

В публикации представлены обзор и классификация наносистем, связанных с газовыми средами и включающих в себя наночастицы, нанопленки, наноструктуры и нанокомпозиты. Приведены результаты численного исследования подобных наносистем. При моделировании методом молекулярной динамики были задействованы как парные, так и многочастичные потенциалы взаимодействия. Для парных потенциалов в энергию взаимодействия при необходимости включались энергии связей, углов и двугранных углов. Рассмотрены процессы формирования наноструктур в вакуумной, воздушной и аэрозольной наносистемах. Моделирование процессов конденсации внутри вакуумных наносистем проводилось для метода производства металлических наночастиц, который реализуется испарением, термическим насыщением и последующей конденсацией. Формирование наночастиц в воздушных средах исследовалось для задачи внесения удобрений через поры растений в виде наночастиц минеральных солей. Наноаэрозольные системы рассматривались на примере работы пожаротушащего газогенератора. Получены структурные и количественные свойства нанопленок, сформированных на пористых и сплошных подложках. Пористые подложки состояли из аморфного оксида алюминия. В качестве материала сплошных подложек рассматривался кремний.

9. 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**) (26 стр. / 8 стр.)

Статья посвящена исследованию эпитаксиальных процессов формирования нанопленок на подложках из аморфного оксида алюминия методом математического моделирования. Численные эксперименты по осаждению нанопленок проведены лично соискателем. Показано, что процессы формирования нанопленок протекают неравномерно. Соискателем построен график температуры осаждаемых атомов, иллюстрирующий момент перехода осажденных атомов из свободного состояния в жидкое и твердое. Также подготовлены и приведены зависимости центра масс осаждаемых атомов в поре разного радиуса и их доли по отношению к общему количеству. Структура нанопленки и подложки контролировалась с помощью параметра симметричности кристаллической решетки. Результаты моделирования и алгоритмы анализа данных обсуждались совместно с соавторами.

10. 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**) (14 стр. / 5 стр.)

В работе приведены результаты моделирования осаждения нанопленок гомогенного состава на матрицы пористого оксида алюминия. Соискателем с соавторами развита математическая модель осаждения нанопленок, основанная на потенциале модифицированного метода погруженного атома. Основное внимание уделено исследованиям процессов формирования наноструктур внутри пор разного размера и их свойств. Полученные соискателем результаты вычислительных расчетов, приведенные в статье, показывают, что активный рост количества атомов в поре происходит в начальные периоды времени. Дальнейшее зарастивание поры сопровождается перестройкой атомарной структуры.

11. 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**) (13 стр. / 7 стр.)

В публикации рассматриваются процессы деформации и разрушения нанокompозитов. Лично соискателем выполнен обзор методик для исследования механических свойств нанокompозитов. Соискателем совместно с соавтором предложена математическая модель атомистического описания поведения наноматериалов и механизмов их разрушения. Результаты численных экспериментов разрушения нанокompозитов в процессе деформации растяжения и сдвига получены лично соискателем. В качестве образцов использовался чистый алюминий, композит с алюминиевой матрицей и включениями в виде сферических наночастиц железа, а также композит с алюминиевой матрицей и наполнителем в виде цилиндрического железного нановолокна. Моделирование позволило установить основные закономерности изменения атомной структуры матрицы и нановключений при деформации и разрушении образцов.

12. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Леконцев А.Т. Моделирование механических свойств и процесса разрушения нанокompозитов Al/Cu // *Интеллектуальные системы в производстве*. – 2019. – Т. 17, № 3. – С. 48-54. (**ВАК**) (7 стр. / 2 стр.)

В работе основное внимание уделено молекулярно-динамическому моделированию одноосного растяжения металлического нанокompозита. Формулировка модели и постановка задачи выполнены соискателем совместно с соавторами. Также совместно с соавторами проведен анализ полученных результатов. Продемонстрирован характер распределения продольных напряжений по всему объему кристалла в процессе растяжения. При достижении образцом предела упругости наблюдалось зарождение дефектов кристаллической решетки и распространение их по кристаллу. Максимальное разрушение материала происходило по границе раздела. Были исследованы параметры нанокompозита алюминия и меди (деформация, температура, механическое напряжение). В условиях нагружения в материале реализуется множество процессов, включающих в себя зарождение дефектов, упругую и пластическую деформацию, генерацию повреждений с атомными перестройками.

13. 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**) (12 стр. / 4 стр.)

Статья посвящена моделированию процессов формирования многослойного нанокompозита на основе ниобия и кобальта, потенциально обладающего эффектом спинового вентиля. Формулировка методики осаждения, постановки задачи и анализ результатов осуществлялся совместно с соавторами. Соискателем проведена серия вычислительных экспериментов по осаждению нанопленок кобальта и ниобия на подложки с различной температурой. Показано, что повышенная температура приводит к формированию более разреженной структуры нанослоев и увеличению переходных областей (интерфейсов) нанопленок за счет диффузии атомов напыляемых материалов. Также соискателем реализованы алгоритмы анализа атомарной структуры нанопленок и интерфейсов, образующихся между ними.

14. 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**) (10 стр. / 6 стр.)

В работе представлены результаты исследований технических наносистем, реализация или функционирование которых связаны с газовыми средами. Соискателем совместно с соавтором описана многоуровневая математическая модель, состоящая из трех уровней. Описание на первом уровне модели основано на методах квантовой механики и является вспомогательным для получения параметров взаимодействия атомов. Второй уровень представляет собой подмодель молекулярной динамики и используется для исследования процессов конденсации атомов и молекул в наноструктуры. Третий уровень служит для описания перемещения, взаимодействия и роста уже сформированных нанокластеров. Метод мезодинамики частиц, включающий в себя уравнения их движения, условия агрегации и критерии увеличения пространственного и временного масштабов, предложен лично соискателем. Приведены результаты использования сформулированной математической модели на примере задачи питания растений из газовой среды через поры в стеблях и листьях и задачи конденсации нанокластеров при работе генератора огнетушащего аэрозоля.

15. 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**) (13 стр. / 3 стр.)

Основное внимание в публикации уделено исследованию влияния технологических параметров изготовления многослойных наносистем, в том числе температуры подложки и концентрации осаждаемых атомов, на атомную структуру и морфологию формируемого образца. Модельная система представляет собой сверхпроводящий спиновой клапан многослойного строения, состоящий из ферромагнитных нанопленок кобальта, разделенных слоями ниобиевого сверхпроводника. Особенности технологии изготовления нанокompозита разработаны соискателем совместно с соавторами. Также совместно с соавторами описаны основные результаты численных экспериментов. Лично соискателем разработаны алгоритмы анализа структуры и состава нанопленок, скрипты оценки морфологии и рельефа поверхности нанопленок, блоки программного регулирования параметров технологического процесса формирования образца.

16. 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**) (15 стр. / 8 стр.)

Работа посвящена теоретическим исследованиям процессов формирования и взаимодействия наночастиц в газовой среде. Соискателем совместно с соавтором

предложена многоуровневая математическая модель для исследования процессов формирования, движения, роста и взаимодействия наночастиц. Модель включает в себя уровень молекулярной динамики, описывающий начальные стадии конденсации, и уровень мезодинамики частиц, рассматривающий эволюционное поведение уже сформированных кластеров и предложенный лично соискателем. Также соискателем предложены основные формулы для вычисления координат, скоростей, сил, масс наноструктур при переходе от аппарата молекулярной динамики к мезодинамике частиц, уравнения движения наночастиц, законы поглощения кластеров. Соискателем совместно с соавтором проанализированы механизмы взаимодействия наночастиц на примере потенциалов Леннарда – Джонса и Штокмайера. Вычисление параметров силовых полей осуществляется через усреднение соответствующих характеристик атомов, образующих нанокластер. Использование угловых и несимметричных потенциалов позволяет учесть в математической модели наличие точек роста и активации на поверхности наночастиц. Условие объединения наноструктур сформулировано лично соискателем с точки зрения энергетически выгодного и стабильного состояния.

17. Vakhrushev A.V., **Fedotov A.Yu.**, Sidorenko A.S. Simulation of Multilayer Nanosystems Interface Formation Process for Spintronics // Key Engineering Materials. – 2021. – Vol. 888. – Pp. 57-65. (**Scopus**) (9 стр. / 3 стр.)

В публикации основное внимание уделено описанию и физическому обоснованию результатов численного моделирования процессов осаждения многослойных нанокластеров, используемых в спинтронике. Лично соискателем получены результаты численных экспериментов и построены зависимости структуры и состава в области интерфейсов формируемых нанопленок. Также лично соискателем исследованы зависимости контактных областей нанослоев от технологических параметров осаждения. Соискателем совместно с соавторами проведен анализ полученных результатов и предложена их интерпретация.

18. 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; опубли. 27.06.07, Бюл. № 18. (8 стр. / 2 стр.)

Изобретение относится к области получения нанопорошковых материалов и может быть использовано в технологии формирования и изготовления нанокластеров. Соискателем совместно с соавторами предложен способ перемешивания наночастиц, включающий в себя их ионизацию противоположными зарядами, основную стадию перемешивания, дополнительное перемешивание за счет движения микротел в нейтральной среде, заключительное прессование. Лично соискателем предложен принцип ионизации наночастиц и многокамерное устройство перемешивания наноструктур.

19. 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; опубли. 19.07.2011.

Свидетельство подтверждает регистрацию программного комплекса для многоуровневого моделирования процессов формирования наноструктур в газовых средах и исследования их свойств. Соискателем совместно с соавтором выполнена формулировка уравнений модели, разработка программных алгоритмов, тестирование и отладка кода. В программном комплексе реализована трехуровневая модель движения, взаимодействия и конденсации наночастиц в газовых средах и средах, близких к вакууму. Лично соискателем при помощи высокоуровневых языков объектно-ориентированного программирования написан программный код блоков мезодинамических расчетов и их визуализации,

подготовки начальных данных, согласования данных. Также соискателем реализованы алгоритмы анализа результатов, в том числе: выявление атомов, сгруппированных в наноструктуры; определение равномерности нанопленок и нанокompозитов; 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.

20. 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; заяв. и патентообл. ФГБУН Институт механики УрО РАН; опубл. 28.02.2017. (8 стр. / 2 стр.)

Изобретение относится к способам определения механических свойств наноматериалов путем вдавливания индентора в поверхность образца с заданной нагрузкой. Соискателем совместно с соавторами предложен новый способ определения статического модуля упругости наноматериалов, использующий методику комбинированного сочетания натурального эксперимента и компьютерного моделирования методом конечных элементов. Технический результат изобретения заключается в возможности определения модуля упругости материала микро- и наночастиц произвольной формы. Описанная методика апробирована для исследования механических свойств наноструктур, формируемых при функционировании генератора огнетушащего аэрозоля.

Список прочих работ 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**) (40 стр. / 10 стр.)

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**) (19 стр. / 6 стр.)

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**) (25 стр. / 8 стр.)

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. (31 стр. / 8 стр.)

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. (37 стр.)

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. (8 стр. / 3 стр.)

7. 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. (15 стр. / 7,5 стр.)
8. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Моделирование формирования композиционных наночастиц из газовой фазы // Альтернативная энергетика и экология. – 2007. – № 10. – С. 22-26. (ВАК) (5 стр. / 2,5 стр.)
9. 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. (12 стр. / 6 стр.)
10. 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) (9 стр. / 3 стр.)
11. 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. (18 стр. / 9 стр.)
12. Вахрушев А.В., Аликин В.Н., Голубчиков В.Б., Федотов А.Ю. Нанобиотехнология выращивания растений // Нанотехнологии. Экология. Производство. – 2009. – № 1. – С. 108-112. (5 стр. / 1 стр.)
13. 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) (10 стр. / 2 стр.)
14. 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) (6 стр. / 2 стр.)
15. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Шушков А.А., Шушков А.В. Моделирование формирования наночастиц металлов, исследование структурных, физико-механических свойств наночастиц и нанокомпозитов // Известия тульского государственного университета. Естественные науки, серия "Физика". – 2011. – № 2. – С. 241-253. (ВАК) (13 стр. / 3 стр.)
16. 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) (11 стр. / 4 стр.)
17. 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) (30 стр. / 10 стр.)
18. 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) (16 стр. / 5 стр.)

19. 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**) (14 стр. / 3 стр.)

20. 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**) (17 стр. / 4 стр.)

21. 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**) (12 стр. / 3 стр.)

22. 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**) (12 стр. / 3 стр.)

23. 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**) (12 стр. / 3 стр.)

24. 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**) (13 стр. / 4 стр.)

25. 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**) (8 стр. / 3 стр.)

26. 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**) (11 стр. / 3 стр.)

27. 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**) (5 стр. / 1 стр.)

28. **Fedotov A.Yu.**, Vakhrushev A.V., Severyukhina 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**) (20 стр. / 3 стр.)

Научная специальность, которой соответствует диссертация. Диссертация «Многоуровневое математическое моделирование процессов формирования наноструктур в газовой среде» Федотова Алексея Юрьевича соответствует специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, следующим областям исследования, указанным в паспорте специальности: п. 4 «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента»; п. 5 «Комплексные исследования

научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента»; п. 8 «Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования».

Оценка выполненной соискателем работы. Представленная Федотовым А.Ю. диссертация является законченной научной квалификационной работой, в которой изложены результаты теоретических и экспериментальных исследований для обоснования закономерностей режимов конденсации, движения, формирования, взаимодействия наноструктур и внедрения их в поверхностные слои твердых материалов на основе многоуровневой математической модели. Диссертация соответствует критериям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени доктора наук, соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» Постановления Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, с изменениями, принятыми Постановлением Правительства Российской Федерации № 335 от 21 апреля 2016 г., и содержит разработанные и научно-обоснованные теоретические положения, физико-математические модели, алгоритмические, методические и программно-аппаратные средства для обоснования закономерностей процессов коагуляции, структурирования и механической интеграции нанокластеров на основе математической модели.

Диссертация «Многоуровневое математическое моделирование процессов формирования наноструктур в газовой среде» Федотова Алексея Юрьевича **рекомендуется к защите** на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Заключение принято на расширенном заседании Научного совета по техническим наукам УдмФИЦ УрО РАН. Присутствовало на заседании 13 чел, в том числе 9 докторов наук. Результаты голосования: «за» – 13 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел., протокол № 3 от «22» марта 2022 г.

Председатель Научного совета по техническим наукам, руководитель Института механики УдмФИЦ УрО РАН,
доктор технических наук, профессор

В.Б. Дементьев

секретарь Научного совета по техническим наукам, заместитель директора по естественно-научному направлению УдмФИЦ УрО РАН,
доктор технических наук, профессор

А.И. Коршунов

Подписи Дементьева В.Б., Коршунова А.И. заверяю

Начальник отдела кадров

О.С. Воронцова