

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Пермский национальный исследовательский политехнический университет»

**Заключение диссертационного совета Д ПНИПУ.01.19
по диссертации Федотова Алексея Юрьевича
на соискание ученой степени доктора технических наук**

Диссертация «Многоуровневое математическое моделирование процессов формирования наноструктур в газовой среде» по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ принята к защите 17 июня 2022 года (протокол заседания № 2) диссертационным советом Д ПНИПУ.01.19, созданным по приказу ректора Пермского национального исследовательского политехнического университета № 35-О от 06.04.2022 г. в рамках реализации предоставленных ПНИПУ прав, предусмотренных абзацами вторым – четвертым пункта 3.1 статьи 4 Федерального закона от 23 августа 1996 г. № 127-ФЗ «О науке и государственной научно-технической политике» на основании распоряжения Правительства Российской Федерации от 23 августа 2017 г. № 1792-р.

Диссертация выполнена в отделе моделирования и синтеза технологических структур Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук».

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».

Официальные оппоненты:

1. Григорьев Федор Васильевич – доктор физико-математических наук (специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ), ведущий научный сотрудник лаборатории вычислительных систем и прикладных технологий программирования Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

2. Свистков Александр Львович – доктор физико-математических наук (специальность 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела), профессор, заведующий лабораторией микромеханики структурно-неоднородных сред Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук».

3. Скрипняк Владимир Альбертович – доктор физико-математических наук (специальность 05.13.16 – Применение вычислительной техники, математического моделирования и математических методов в научных исследованиях), профессор, заведующий кафедрой механики деформируемого твердого тела Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт прикладной механики Российской академии наук» (г. Москва); отзыв ведущей организации утвержден директором, доктором технических наук, профессором Власовым Александром Николаевичем, рассмотрен, обсужден и одобрен на заседании Ученого совета ИПРИМ РАН и подписан главным научным сотрудником, заведующим лабораторией «Неклассических моделей механики композиционных материалов и конструкций», доктором технических наук, профессором Лурье Сергеем Альбертовичем и директором ИПРИМ РАН доктором технических наук, профессором Власовым Александром Николаевичем.

По теме диссертации соискателем опубликовано 94 научных работы, в том числе 12 статей в журналах из перечня 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. В тексте диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах. Наиболее значимые публикации 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 зарождения 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.

1. 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.

2. 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 нанокпозиционных 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 зарацивания 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 пожаротушающего 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 осаждаемых 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 нанокомполитов. Лично соискателем выполнен обзор методик для исследования механических свойств нанокомполитов. Соискателем совместно с соавтором предложена математическая модель атомистического описания поведения наноматериалов и механизмов их разрушения. Результаты численных экспериментов разрушения нанокомполитов 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 нанокомполитов 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 нанокомполита. Формулировка модели и постановка задачи выполнены соискателем совместно с соавторами. Также совместно с соавторами проведен анализ полученных результатов. Проанализировано

распределение 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. Приведены результаты исследований параметров 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, постановка 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. Первый уровень модели описывается квантово-механическими уравнениями и является вспомогательным для получения параметров взаимодействия атомов. Второй уровень представляет собой подмодель молекулярной динамики и используется для описания процессов конденсации атомов и молекул в наноструктуры. На третьем уровне рассматриваются процессы перемещения, взаимодействия и роста

уже сформированных нанокластеров. Метод мезодинамики частиц, включающий в себя уравнения движения, условия агрегации и критерий 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 результатам исследования влияния технологических параметров изготовления многослойных наносистем, в том числе температуры подожки и концентрации осаждаемых атомов, на атомную структуру и морфологию формируемого образца. Моделируемая система представляет собой сверхпроводящий спиновой клапан многослойного строения, состоящий из ферромагнитных нанопленок кобальта, разделенных слоями ниобиевого сверхпроводника. Особенности технологии изготовления наноконкомпозита 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, блок регулирования параметров моделирования 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 результатам теоретических исследований 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. Уровень мезодинамики частиц рассматривает эволюционное поведение уже сформированных кластеров и предложен 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 нанокompозитов, 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 размеров 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; опубл. 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 нанокompозитов. 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 ComplexDyna.5.0; опубл. 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.)

В патенте описан способ 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.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- **предложена математическая модель**, описывающая перемещение и взаимодействие наночастиц с учетом их вращательного движения и включающая в себя воздействие потенциальных полей, внешней среды в виде стохастической составляющей и силы трения. 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 нанозаполнителей 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 нанокомпозитов со встроенными наноструктурами галлий-

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

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- **разработана** трехуровневая математическая модель для описания процессов конденсации, формирования, роста и внедрения наноструктур в технических системах с газогенератором наночастиц для повышения качественных и функциональных характеристик наноматериалов;
- **проведена** модификация существующих математических постановок задач формирования и конденсации наноструктур в газовых средах, что позволило комплексно учесть основные физические явления, возникающие при агломерации наноструктур и внедрении их в поверхностные слои твердых материалов;
- применительно к проблематике диссертации **адаптированы и апробированы** существующие базовые методы вычислительной математики и математической физики;
- адаптированные численные методы и алгоритмы результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) **использованы** для теоретического описания процессов образования, агломерации и структурного перестроения в конденсированных средах.

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

- **разработана** программа для ЭВМ, позволяющая на основе результатов численной реализации математической модели сократить издержки на проведение дорогостоящих экспериментальных исследований в области нанотехнологий, визуализировать процессы конденсации и роста наноструктур, получить оптимальные технологические параметры изготовления наноматериалов (получено свидетельство об интеллектуальной собственности на программу для ЭВМ);
- результаты численных исследований технологии создания регулируемых газовых сред на основе предложенной математической модели **позволили подтвердить эффективность** изготавливаемых и реализуемых товарных продуктов предприятия ООО «Научно-производственная фирма «НОРД» (г. Пермь) (получен акт внедрения);
- математические модели, численные алгоритмы и прикладные программы 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» (г. Ижевск) при подготовке бакалавров и магистров по направлению «Нанотехнологии и микросистемная техника» (получен акт внедрения);

– математическая модель, теоретические основы и программный комплекс **были использованы** для исследования процессов формирования нанопленок, идентификации их строения и состава, выявления дефективности структуры образцов, а также прогнозирования качества интерфейса контактных слоев, приготовленных на основе выбранных материалов для осаждения, в ФГБОУ ВО «Орловский государственный университет имени И.С. Тургенева» (г. Орел) в рамках выполнения проекта РНФ № 20-62-47009 «Физические и инженерные основы вычислителей не фон-неймановской архитектуры на базе сверхпроводниковой спинтроники» (получен акт внедрения).

Результаты диссертационного исследования также **могут быть использованы** в научно-технических центрах, опытно-конструкторских предприятиях, промышленных лабораториях, научно-исследовательских организациях РАН для исследования процессов изготовления и функционирования наноструктурированных материалов, связанных с газообразными средами.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

– **обоснованность** результатов диссертационной работы определяется корректностью постановки решаемых задач и современными математически обоснованными методами решения;

– проведенные исследования на сходимость и устойчивость свидетельствуют об **обоснованности** выбранных использованных численных методов;

– решение ряда тестовых задач, показавшее хорошее соответствие результатов моделирования ранее известным данным из литературы таким, как работе баростатов и термостатов, распределению радиальных функций, геометрической конфигурации стандартных молекул, автокорреляционной функции скоростей атомов, подтверждает **достоверность** результатов моделирования;

– **достоверность** 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.

Личный вклад соискателя состоит в следующем: проведении научно-информационного поиска и анализа состояния проблемы; разработке теоретических положений для создания многоуровневой математической модели, описывающей процессы формирования, взаимодействия, конденсации и роста наноструктур в газовой среде на

протяжении всего их жизненного цикла; разработке метода мезодинамики частиц с возможностью увеличения пространственного и временного масштабов; реализации согласования уравнений различных уровней математической модели; адаптации численных алгоритмов различного порядка точности, реализованных в виде программного комплекса для исследования свойств наноструктур; проведении комплексных численных исследований ряда технологических процессов изготовления и эксплуатации образцов из наноматериалов в газовых средах, в том числе выполнении анализа данных моделирования.

Диссертационный совет пришёл к выводу о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, и Порядком присуждения ученых степеней в ПНИПУ, утвержденным приказом ректора ПНИПУ от 09 декабря 2021 г. № 4334-в: в ней содержится решение важной научной проблемы, связанной с разработкой и научным обоснованием теоретических положений, физико-математических моделей, алгоритмических и программных средств для исследования закономерностей процессов коагуляции, структурирования и механической интеграции нанокластеров, которая имеет важное значение для повышения качественных и функциональных характеристик наноматериалов.

На заседании 20 сентября 2022 года диссертационный совет Д ПНИПУ.01.19 принял решение присудить Федотову Алексею Юрьевичу ученую степень доктора технических наук (протокол заседания № 5).

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них 5 докторов наук по специальности защищаемой диссертации, участвовавших в заседании, из 18 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за присуждение учёной степени – 14, против присуждения учёной степени – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель
диссертационного совета Д ПНИПУ.01.19
д-р физ.-мат. наук, проф

Председатель
диссертационного совета Д ПН
канд. физ.-мат. наук



 Трусов Петр Валентинович

 Кротова Елена Львовна