**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.326.08,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «МИРЭА – РОССИЙСКИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ», МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК**

аттестационное дело №\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 06.03.2025 № 17

О присуждении Желтову Сергею Александровичу, гражданину РФ ученой степени кандидата технических наук.

Диссертация «Моделирование столкновений атомов при нанесении покрытий на плоские поверхности методом молекулярно-лучевой эпитаксии» по научной специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ принята к защите 19 декабря 2024 года (протокол заседания № 10) диссертационным советом 24.2.326.08 Федерального государственного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет» (РТУ МИРЭА), Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, 119454, г. Москва, проспект Вернадского, 78, Приказ № 87/нк от 26.01.2023.

Соискатель: Желтов Сергей Александрович, «18» августа 1981 года рождения. В 2003 году окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Тверской государственный университет». С 2005 – 2008 гг. обучался в аспирантуре ГО ВПО «Тверской государственный университет» (в настоящее время ФГБОУ ВО ТвГУ) по научной специальности 05.13.18 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Работает в должности старшего преподавателя на кафедре компьютерной безопасности и математических методов управления федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет», Министерство науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре компьютерной безопасности и математических методов управления федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет», Министерство науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – Плетнев Леонид Владимирович, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры общенаучных дисциплин Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный технический университет» в период подготовки диссертации работал в должности доцента кафедры компьютерной безопасности и математических методов управления федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет».

Официальные оппоненты: Уварова Людмила Александровна, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технологический университет СТАНКИН», заведующая кафедрой прикладной математики и Попов Василий Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова», профессор кафедры высшей и прикладной математики дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» (г. Москва) в своем положительном отзыве, подписанным Гасановым Эльяром Эльдаровичем, доктором физико-математических наук, профессором, заведующим кафедрой математической теории интеллектуальных систем механико-математического факультета и утверждённым Федяниным Андреем Анатольевичем, доктором физико-математических наук, проректором МГУ имени М.В. Ломоносова, указала, что в диссертационном исследовании Желтова Сергея Александровича излагаются новые теоретические подходы к решению задач моделирования столкновений пар и троек атомов при одновременном вылете с поверхности и моделированию процесса напыления материала на плоские поверхности. Решены задачи создания имитационных моделей, разработки алгоритмов и параллельных программ для моделирования столкновений атомов и моделирования процесса напыления материала, что позволяет существенно оптимизировать параметры установок для напыления.

Соискатель имеет 24 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 11 работ, из которых 2 работы опубликованы в рецензируемых научных изданиях, входящих в перечень ВАК РФ по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки), 2 работы опубликованы в рецензируемых научных изданиях, входящих в перечень ВАК РФ по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, 1 работа опубликована в рецензируемых научных изданиях, входящих в перечень ВАК РФ по специальности 05.13.01 Системный анализ, управление и обработка информации (по отраслям), 2 публикации в трудах международных конференций, входящих в базу SCOPUS.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Плетнев, Л. В. Моделирование столкновения двух атомов над поверхностью конденсированной фазы / Л. В. Плетнев, С. А. Желтов // Программные продукты и системы. – 2020. – Т. 33, № 2. – С. 297–303.

2. Желтов, С. А. Моделирование столкновений трех атомов после одновременного вылета с поверхности конденсированной фазы / С. А. Желтов // Программные продукты и системы. – Т. 34, № 2, – 2021. – С. 324–330.

3. Желтов, С.А. Первые и вторые столкновения трех атомов после вылета с поверхности конденсированной фазы / С.А. Желтов, Л.В. Плетнев // Южно-Сибирский научный вестник. – 2024. – № 1. – с. 48-52.

4. Желтов, С. А. Влияние первых столкновений атомов на моделирование установок молекулярно-лучевой эпитаксии / Желтов С. А., Плетнев Л. В., Чупятов Н. Н. // Южно-Сибирский научный вестник. – 2024. – № 1. – с. 43-47.

5. Желтов, С. А. Расчет плотностей распределений атомов по напыляемым плоскостям / С. А. Желтов, Н. Н. Чупятов // Южно-Сибирский научный вестник. – 2021. – №5(39). – С. 107–110.

6. Zheltov, S. A., Pletnev, L. V., Chupiatov, N. N. Simulation of a Collision of Three Atoms over the Surface of a Condensed Phase [Электронный ресурс] – Режим доступа: https://aip.scitation.org/doi/10.1063/5.0125453.

7. Zheltov, S. A. Distributions of the Collision Times Between Two Atoms That Have Overcome the Potential Barrier on the Surface. Software Engineering Perspectives in Intelligent Systems // S. A. Zheltov, L. V. Pletnev // Proceedings of 4th Computational Methods in Systems and Software. – Moscow, 2020 – Vol. 2. – P. 358–367. – ISBN: 978–3–030–63318–9 (Online ISBN 978–3–030–63319–6) (WoS, Scopus).

В диссертации содержатся достоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

На диссертацию и автореферат поступило 7 положительных отзывов.

1. Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова, Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники, НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва. Отзыв подписал доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Конарев П.В. Замечания: 1) На стр. 13 допущена опечатка, в предложении “для задания начальных координат атомов … использовался генератор curandGenerateUniformDouble с параметрами нормального распределения”, следовало написать “равномерного” вместо “нормального”. 2) На рисунках 14, 21 и 23 не указаны единицы измерения величины *a*. 3) Точность вычислений реализованных автором программ зависит от эффективности алгоритмов, используемых процедурами для генерации последовательности псевдослучайных чисел, поэтому помимо указания имен используемых процедур из библиотеки CURAND имело смысл упомянуть и об используемых в них методах построения псевдослучайных последовательностей. В этой же связи важно было бы оценить, насколько результаты расчетов зависят от различных реализаций псевдослучайных последовательностей.

2. ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет». Отзыв подписал кандидат химических наук, ассистент кафедры Ядерно-физических Методов Исследований Безродный В.В. Замечания: 1) На некоторых рисунках предоставленного экземпляра автореферата плохо пропечатаны оси координат. 2) В формуле на странице 3 символ n должен быть индексом. 3) Как сказано в тексте, параллельные вычисления позволили добиться существенного снижения времени расчетов, но не указано во сколько раз сократилось время и какова эффективность параллельных вычислений.

3. ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский Национальный Исследовательский Университет Информационных Технологий, Механики и Оптики». Отзыв подписал доктор физико-математических наук, профессор Центра химической инженерии Неелов И.М. Замечания: 1) На рисунке принципиальной схемы установки МЛЭ среди возможных траекторий движения атомов не показаны траектории столкнувшихся атомов. 2) В описании принципиальной схемы установки МЛЭ предполагается, что длина испарительного элемента много больше ширины, но не указано минимальное отношение этих параметров.

4. МОУ ВО «Белорусско-Российский университет», г. Могилев, Республика Беларусь. Отзыв подписал кандидат физико-математических наук, доцент кафедры Высшая Математика Романенко А.А. Замечание: качество рисунков оставляет желать лучшего.

5. АО НО «Тверской институт вагоностроения». Отзыв подписал заместитель генерального директора – технический директор, кандидат технических наук Скачков А.Н. Замечания: 1) Из текста автореферата не совсем понятно по каким критериям выбирались диапазоны значений параметров, температуры, размеров поверхности испарения и др., при которых проводились численные эксперименты. 2) Нет точного определения отношения сторон поверхности испарения в описании схемы установки. 3) На рисунках 21 и 23 не указана единица измерения величины *a*.

6. ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого». Отзыв подписал доцент института физики и математики ФГАОУ ВО СПбПУ кандидат физико-математических наук Иванова Л.А. Замечания: 1) Из текста автореферата непонятно при каких условиях и значениях числа Кнудсена *Kn* происходит процесс переноса. 2) На рисунке 3 представлены возможные траектории движения атомов после вылета, но не показаны траектории столкнувшихся атомов. 3) На некоторых рисунках в предоставленном экземпляре автореферата не пропечатаны (либо не указаны) единицы измерения величины *a*.

7. ММ НИО «Объединенный институт ядерных исследований», г. Дубна. Отзыв подписал начальник сектора Лаборатории информационных технологий им. М.Г. Мещерякова кандидат физико-математических наук Шарипов З.А. Замечания: 1) Разработанные автором параллельные алгоритмы позволили снизить фактические затраты на расчеты при численном моделировании, но нет сведений об ускорении и эффективности параллельных вычислений. 2) В автореферате приводятся результаты анализа моделирования процесса напыления методом МЛЭ без указания численного метода, а также нет описания алгоритма расчета.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их компетентностью в рассматриваемой отрасли и наличием публикаций, соответствующих научной и практической направленности диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– **разработаны** математические модели столкновений двух и трех атомов в пространстве и времени после одновременного вылета с поверхности конденсированной фазы, позволяющие получать распределения и описать их зависимости от температуры поверхности, размера области испарения и величины потенциального барьера на поверхности конденсированной фазы;

– **разработаны** алгоритмы и программа численных методов расчета относительных частот столкновений двух и трех атомов в пространстве и времени после одновременного вылета с поверхности конденсированной фазы;

– **разработаны** алгоритмы и программа реализации численных методов расчета параметров установок нанесения покрытий методом МЛЭ.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

– **сформулирована** и описана схема и математическая модель установки напыления вещества, позволяющая сократить расход напыляемого материала и повысить равномерность слоя напыления на краях изделия;

– **предложены** обоснованные модели столкновения двух и трех атомов после одновременного вылета с поверхности конденсированной фазы;

– **получены** новые результаты о распределениях и средних значениях столкновений в пространстве и времени двух и трех атомов с учетом температуры поверхности конденсированной фазы, размера области испарения и величины потенциального барьера.

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

– **разработаны** алгоритмы и программа, в том числе с использованием параллельных вычислений, численных методов решения задачи расчета вылета атомов с поверхности конденсированной фазы и их столкновений;

– с помощью разработанных численных методов и их программной реализации удалось добиться повышения эффективности процесса напыления за счет определения значений параметров установок напыления методом МЛЭ, при которых уменьшается доля напыляемого материала, вылетающего за пределы поверхности напыления.

Оценка достоверности результатов выявила:

– теория **построена** на известных проверяемых данных, согласуется с опубликованными результатами в смежных областях;

– **использованы** современные методики сбора и обработки исходной информации.

**Личный вклад соискателя** в науку состоит в разработке математических моделей, численных методов моделирования процессов столкновения двух и трех атомов после вылета с поверхности в вакууме, а также их программной реализации и применении этих средств для решения прикладных задач технической, физической и химической тематик.

В ходе защиты диссертации были высказаны критические замечания по стилистике диссертации, например, повторение в одном предложении «зависимости от зависимости», также были замечания по оформлению текста диссертации и используемой терминологии. Соискатель с такими замечаниями согласился. На замечание от ведущей организации, связанное с «недостаточностью обоснования «физичности» модели» и обоснованием того, что принятые соискателем предположения адекватны реальному процессу соискатель Желтов С.А. дал развернутый ответ и привел свои аргументы для обоснования используемой модели и ее соответствия реальному процессу вылета атомов. Также на большую часть замечаний (22 замечания) второго оппонента соискатель дал исчерпывающие ответы и пояснения, с частью замечаний согласился. Соискатель дал профессиональные и обоснованные ответы на заданные членами диссертационного совета вопросы.

На заседании 06.03.2025 диссертационный совет, учитывая, что в диссертации изложены новые научно-обоснованные математические и программно-технологические решения по построению численных методов моделирования процесса нанесений покрытий в вакууме методом молекулярно-лучевой эпитаксии и моделирования столкновений атомов после вылета с поверхности конденсированной фазы, имеющие важное значение для изучения процесса испарения с микроскопической точки зрения и переноса вещества в процессах массопереноса, присудить Желтову Сергею Александровичу учёную степень кандидата технических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек (12 очно, 4 дистанционно), из них 4 доктора наук по научной специальности 1.2.2. (технические науки), участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, проголосовали: за – 16 человек, против – нет.

Председатель диссертационного совета,

д.т.н. Романов М.П.

Ученый секретарь

диссертационного совета,

к.т.н., доцент Андрианова Е.Г.

06 марта 2025