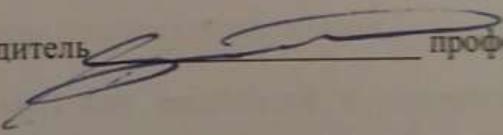


Министерство образования и науки Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Моделирование структурных и эксплуатационных свойств
тактильных электронных сенсоров

НАУЧНЫЙ ДОКЛАД ОБ ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТАХ
ПОДГОТОВЛЕННОЙ НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ
(ДИССЕРТАЦИИ)
аспиранта 4 курса
направления 11.06.01 «Электроника, радиотехника и системы связи»

Кондратьевой Ольги Юрьевны

Научный руководитель  профессор д.ф.-м.н С.Б. Вениг

Саратов 2018

Актуальность темы

Современные тенденции автоматизации и роботизации промышленных и технологических процессов обуславливают широкое использование тактильных сенсоров. Так на их основе строятся системы осязания промышленных и бытовых роботов, системы контроля размеров деталей в точном машиностроении, контроля формы предметов в стоматологии, ортопедии, хирургии и других областях. Одним из перспективных физических принципов, на которых основывается разработка новых изделий микро- и наноэлектроники в этой области, является изменение при деформации проводимости композитных материалов на основе диэлектрической матрицы с проводящими включениями. Этот принцип закладывается в основу работы резистивных и тензорезистивных сенсорных структур. Использование полимерных матриц и гибких подложек позволяет реализовать в этих структурах высокую чувствительность, низкие уровни шумов, простоту управляющей электроники, приемлемую стоимость.

Поверхность устройств, контактирующая с окружающей средой, покрывается слоем материала, который изменяет свои свойства при изменении состава и давления окружающей среды. Большое значение в этом случае имеет отношение поверхности слоя к его объему. Поэтому актуальным объектом исследования являются тонкие пленки и покрытия с развитой поверхностью, в частности, полупроводниковые оксиды металлов, а также композитные и гибридные материалы, включающие неорганические, полимерные и биологические составляющие.

Вместе с тем, при разработке и создании тактильных сенсоров остаются нерешенными целый ряд проблем таких, как достаточно большая потребляемая мощность, невысокая линейность, гистерезис, задача выявления одной точки касания, нелинейность, долговременная стабильность.

Огромное количество возможных материалов и их сочетаний, доступных для применения в тензорезистивных сенсорных структурах с одной стороны, позволяют надеяться на быстрый прогресс в исследованиях, а с другой - делают объем возможных исследований практически необозримым. Большие надежды, в связи с этим, возлагаются на перспективы применения при планировании исследований и проведении разработок потенциала математического моделирования и компьютерного дизайна тензочувствительных материалов и структур на их основе.

При моделировании свойств композитных материалов приходится сталкиваться с тем, что макроскопические свойства такого материала определяются процессами, которые происходят на принципиально различных масштабах. Каждому из масштабов должна соответствовать своя адекватная физико-математическая модель. На масштабе атомов и молекул моделирование должно учитывать квантово-механическую природу объектов. На мезоскопическом масштабе возможно проявление размерных эффектов. Макроскопические размеры допускают применение моделей сплошной среды. Причем, наличие векторных воздействий, например, одноосное сжатие, способно вызвать существенную анизотропию среды, что приводит к тензорному виду физических величин.

Как правило, расчеты свойств, конфигураций, характеристик, выполненных на одном уровне, служат входными и граничными условиями для моделирования на следующем уровне масштаба. Модели, при этом, оказываются взаимосвязанными и самосогласованными. Поэтому общий алгоритм разномасштабного моделирования, шаг итерации и другие особенности описания системы в целом требуют в каждом конкретном случае критического рассмотрения, детального обсуждения и последующей экспериментальной проверки на точность описания.

В связи с этим, целью данной работы является математическое моделирование композитных структур на основе полимерной матрицы с

дисперсным металлическим наполнителем, сравнение различных методов описания атомарных и кластерных структур, оценка надежности сохранения свойств композитных структур при изменении размеров и структуры кластеров, экспериментальная проверка результатов моделирования.

Целью работы является математическое моделирование композитных структур на основе полимерной матрицы с дисперсным металлическим наполнителем, сравнение различных методов описания атомарных и кластерных структур, оценка надежности сохранения свойств композитных структур при изменении размеров и структуры кластеров, экспериментальная проверка результатов моделирования.

В рамках работы решались следующие **задачи**:

- Анализ литературных данных по текущему состоянию исследований и обоснование выбора основных направлений работы.
- Моделирование атомарной структуры вольфрам-полистирол.
- Моделирование проводимости в композитной среде металл-полимер.
- Оценка вероятности сохранения свойств атомарных конгломератов.
- Создание металл-полимерных покрытий, анализ их свойств и морфологии, сравнение с результатами математического моделирования.

Научная новизна работы:

1. Показана возможность вычисления вольтамперной характеристики атомарных конгломератов и кластеров на основе квантово-химических моделей.

2. Проанализированы энергетические характеристики и исследована их динамика в зависимости от числа атомов вольфрама в кластере вольфрам-полистирол.

3. Проведено моделирование электропроводности композита вольфрам-полистирол с использованием теории перколяции и модели эффективной среды при возникновении межфазных слоев в области жестких включений без введения дополнительных слоев в геометрию структуры. Рассчитана зависимость комплексной диэлектрической проницаемости композита от доли проводящей фазы в системе диэлектрик-металл ($\lambda \sim 550$ нм).

4. Предложена технология создания композита вольфрам-полистирол в которой для исключения образования конгломератов частиц вольфрама они во время первого спешивания порошков капсулируются полистиролом при СВЧ нагреве смеси. Поэтому при повторном смешивании порошка полистирола и капсулированных частиц вольфрама, нагреве и прессовании частицы вольфрама равномерно распределяются в объеме композита.

5. Предложена методология, которая позволяет оценить вероятность нахождения наноструктуры в надежном состоянии, т.е. состоянии, когда все взаимосвязи между атомами стабильны, или, по сути, оценить динамическую устойчивость атомарных конгломератов (наносистем) при сохранении в указанные промежутки времени прогнозируемых свойств присущих наносистемам в той или иной тополого-геометрической конфигурации.

Практическая значимость исследования:

- Показана сопоставимость, подобность, взаимозаменяемость результатов анализа изображения одинаковых участков материала, полученного с помощью АСМ и РЭМ, при использовании прикладных пакетов Gwiddion.
- Возможность вычисления вольтамперной характеристики атомарных конгломератов и кластеров на основе квантово-химических

моделей позволяет проводить экспериментальную проверку наномасштабного моделирования.

- Разработан метод формирования металл–полимерного покрытия, основная идея которого состоит в капсулировании тяжелого металла в полимере путем диспергирования частиц металла в порошке полимера с последующим оплавлением полимера микроволновым излучением, что позволило добиться равномерного распределения тяжелых частиц по объему композитного покрытия.

Основные положения выносимые на защиту:

1. Атомно-масштабное моделирование наносистем в пакете АТК QuantumWise версии 13.8 позволяет для кластеров композита металл-полимер рассчитать вольтамперные характеристики кластера.

2. Капсулирование наночастиц вольфрама полистиролом с помощью СВЧ нагрева и последующее перемешивание их с порошком полистирола обеспечивает равномерное распределение металла в полимере без образования агломератов.

3. При увеличении количества атомов в наносистеме вероятность «отказа» наносистемы с ростом вероятности «отказа» отдельного атома в модели с последовательным расположением атомов увеличивается, при параллельном расположении атомов уменьшается, а при смешанном расположении - монотонно увеличивается до значения 0,8.

Апробация работы

Результаты работы докладывались и обсуждались на Всероссийских и международных научно-технических конференциях, симпозиумах, семинарах, научных семинарах кафедры:

Всероссийская научная школа-семинар «Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с

полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами», г. Саратов, 14-15.05.2015 г.,

6-я научно-практическая конференция Presenting Academic Achievementstothe-WorldPresentingAcademicAchievementstotheWorld, 30-31.03.2015 г.,

6-th Int. Conf. «The nanoparticles and nanostructured coatings microcontainers: technology, properties and applications», г. Саратов, 21-24.05.2015г.,

Всероссийская школа-семинар «Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине: материалы» ,г. Саратов, 10-12.11.2015г.,

Международная научно-практическая конференция «Информационные технологии в образовании XXI века» (МИФИ), г. Москва, 7-8.12.2015 г.,

7-я научно-практическая конференция Presenting Academic Achievementstothe World, г. Саратов, 28-29.03.2016г.,

Всероссийская научная школа-семинар «Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами», г. Саратов, 19-20.05.2016 г.,

III международная научно-техническая конференция «Инновационные наукоемкие технологии», г. Тула, 5-7.10.2016 г.,

VII Международная конференция "Композит-2016" «Перспективные полимерные композиционные материалы. Альтернативные технологии. Переработка. Применение. Экология», г. Саратов, 28-30.06.2016 г.,

International conference «Ion transport in organic and inorganic membranes –Sochi 2016», г.Сочи, 23-28.05.2016г.,

XI Всероссийская конференция молодых ученых «Нанoeлектроника, нанoфотоника и нелинейная физика» ,г. Саратов, 6-8.09.2016 г.,

Всероссийская школа-семинар «Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине: материалы», г. Саратов, 8-10.11.2016 г.,

XII Всероссийская конференция молодых ученых «Нанoeлектроника, нанофотоника и нелинейная физика», г. Саратов, 5-7.09.2017 г.,

III Международной научной конференции молодых ученых «Актуальные проблемы теории и практики электрохимических процессов», г. Саратов, 25-28.04.2017 г.,

8-я научно-практическая конференция «Presenting Academic Achievementstothe World», г. Саратов, 17-18.04.2017г.,

Всероссийская школа-семинар-2017 «Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине: материалы», г. Саратов, 15-16.11.2017 г.,

Всероссийская конференция молодых ученых с международным участием «Практическая биомеханика 2017», г. Саратов, 14-15.12.2017 г.,

Всероссийская научная школа-семинар «Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами», г. Саратов, 16-17.05.2018 г.

Результаты исследований использовались при выполнении исследований по проекту РФФИ «Комплексное исследование кинетики формирования нано-, мезопористого кремния при гамма-облучении в сочетании с компьютерным моделированием для радиационно-стойких элементов микроэлектроники» №18-07-00752 А.

Публикации

По теме диссертационного исследования опубликовано 38 печатных работы, в том числе 3 статьи в журналах, включенных в «Перечень рецензируемых научных изданий», в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени

кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук» Высшей аттестационной комиссией при Министерстве образования и науки Российской Федерации, и 7 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Личный вклад автора

Все результаты, представленные в работе, получены лично автором или при его непосредственном участии. На вклад соавторов отдельных исследований и использование результатов других авторов последовательно даются ссылки по мере их использования.

Структура и объем работы

Научно-квалификационная работа (Диссертация) состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Общий объем научно-квалификационной работы (Диссертации) составляет 149 страницы текста.

Во введении обоснована актуальность выбранной темы, ее новизна и практическая значимость, определена цель работы, представлены основные результаты, полученные в ходе работы и основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе описано современное состояние исследований возможностей создания тактильных сенсоров. На основе анализа литературных данных выявлено, что для многоуровневого моделирования можно использовать большое количество программных продуктов с примерно одинаковым успехом (Materials Studio, Virtual Nano Lab, Atomistix Toolkit, Hyper Chem и др.). Более предпочтительным является использование платформы Virtual Nano Lab, позволяющей обрабатывать различные модели на одной платформе, сочетая с программированием с использованием языка Python и объектно-ориентированного языка программирования R.

Во второй главе представлено моделирование структуры и свойств металл-полимерных композитных систем. Показана сопоставимость, подобность, взаимозаменяемость результатов анализа изображения одинаковых участков

материала, полученного с помощью АСМ и РЭМ, при использовании прикладных пакетов Gwiddion.

Используя программу атомно-масштабного моделирования и моделирования наносистем ATK Quantum Wise версии 13.8 смоделирован фрагмент металл-полимерной системы вытянутого спиралевидного полистирола в присутствии хаотично расположенных атомов вольфрама. Определена зависимость электропроводности композита вольфрам-полистирол от концентрации наполнителя. Показана возможность вычисления вольтамперной характеристики атомарных конгломератов и кластеров на основе квантово-химических моделей.

С использованием программного пакета AMBER проведено моделирование строения кластера вольфрам-полистирол, оценены энергетические характеристики и возможность существования проводящего состояния. Показано, что при добавлении атомов вольфрама в полистироле меняется проводимость моделируемого фрагмента композита. При увеличении атомов вольфрама запрещенная зона сужается. Выбор именно четырех атомов вольфрама обусловлен тем, что при добавлении пятого на исходный глобулярный сегмент полистирола наблюдается энергетическая дестабилизация модельного фрагмента не позволяющая обнаружить устойчивую конформацию.

В третьей главе представлено экспериментальное исследование датчика давления на основе слоя полимера с проводящими включениями. Построена модель композита вольфрам-полистирол с учетом возникновения агрегатов фрактальной природы.

Моделирование композитной структуры вольфрам-полистирол с учетом деформации сжатием позволило получить следующие выводы:

- протяженность межфазных слоев непосредственно связана с характером распределения проводимости в области контактной границы фаз металл-полимерного композита;

- нагрузка глобулы полистирола более 4 атомами вольфрама ведет к динамической неустойчивости модели, а также разрушению молекулярных связей и системы в целом;
- при уменьшении протяженности межфазных слоев (от 1 мкм до 1 нм) максимальный уровень проводимости в матрице увеличивается в 4 раза.

Проведено моделирование электропроводности композита полистирол-вольфрам с использованием теории перколяции и модели эффективной среды при возникновении межфазных слоев в области жестких включений без введения дополнительных слоев в геометрию структуры. Получена зависимость комплексной диэлектрической проницаемости композита от доли проводящей фазы в системе диэлектрик-металл ($\lambda \sim 550$ нм).

Предложена технология создания композита вольфрам-полистирол в которой для исключения образования конгломератов частиц вольфрама они во время первого спешивания порошков капсулируются полистиролом при СВЧ нагреве смеси. Поэтому при повторном смешивании порошка полистирола и капсулированных частиц вольфрама, нагреве и прессовании частицы вольфрама равномерно распределяются в объеме композита.

Проведен анализ поверхности полученных образцов композита с оценкой размеров зерен и расстояний между частицами. Оценена фрактальная размерность поверхности и ее изменение и корреляция с величиной проводимости при воздействии на поверхность образца давления.

В четвертой главе представлена оценка вероятности «долговременного» стабильного существования атомарного конгломерата (наносистемы) на основе гауссовых копул. Предложена методология на основе использования копул, которая позволяет оценить вероятность нахождения наноструктуры в надежном состоянии, т.е. состоянии, когда все взаимосвязи между атомами стабильны, или, по сути, оценить динамическую устойчивость атомарных конгломератов (наносистем) при сохранении в указанные промежутки времени прогнозируемых свойств, присущих наносистемам в той или иной тополого-геометрической конфигурации.

Проведена оценка вероятности перехода в отказ наноструктуры от вероятности отказа каждого атома, т.е. «удаления атома из структуры», при различных параметрах модели: размерах сетки (2x2 нм), (4x4 нм), количества атомов в наноструктуре и факторами θ_0 , θ_1 , θ_2 .

Для сетки 4x4 нм, при увеличении вероятности отказа для каждого атома, вероятность отказа в параллельной структуре постепенно возрастает от 0 до 1, при этом, чем меньше атомов в рассматриваемом нано компоненте, тем быстрее вся структура выходит из строя.

Результаты расчета свидетельствуют о том, что чем меньше сетка и атомов в наноконпоненте, тем выше вероятность выхода из строя параллельной наноструктуры, иначе для последовательной наноструктуры, чем больше атомов в нано компоненте, тем больше вероятность выхода из строя этой структуры при большей вероятности отказа для каждого атома. Для смешанной структуры, с увеличением числа атомов в нано компоненте наблюдается монотонное увеличение вероятности выхода из строя всей наноструктуры (данный результат получен без учета влияния связей между атомами).

В заключении сформулированы основные результаты и выводы.

Список работ, опубликованных автором по теме Научно-квалификационной работы (Диссертации):

Статьи в журналах, включенных в «Перечень рецензируемых научных изданий», в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук» Высшей аттестационной комиссией при Министерстве образования и науки Российской Федерации

1. Смирнов А.В., Аткин В.С., Гребенников А.И., Ревзина Е.М., Кондратьева О.Ю., Синёв И.В. Получение сферических микрочастиц вольфрама в поле ультразвуковой волны в присутствии активатора//Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2015. Т. 15. № 4. С. 13-17.

2. Биленко Д.И., Терин Д.В., Кондратьева О.Ю., Ревзина Е.М., Вениг С.Б. Методологические аспекты моделирования и прогнозирование поведения нанокпозиционных материалов в QUANTUMWISE //Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2014. Т. 14. № 2. С. 46-49.

3. Galushka V.V., Bilenko D.I., Terin D.V., Revzina E.M., Kondratieva O.Y., Kozhevnikov I.O. Controlled investigation of mass transfer in nanostructures AGI-AG // Bionanoscience. 2015. Т. 5. № 4. С. 227-232

Статьи в сборниках, занесенных в РИНЦ

4. Revzina E.M., Terin D.V., Kondrateva O.Yu., Kozhevnikov I.O., Kardash M. Porous silicon-smart material for biochemical synthesis of membrane structure// Ion transport in organic and inorganic membranes Conference Proceedings. Russian academy of sciences//section "membranes and membrane technologies" of d.i. mendeleev russian chemical society//etc. 2016. С. 238-240.

5. Колесникова А.С., Кондратьева О.Ю., Клинаев Ю.В., Романчук С.П., Терин Д.В. Моделирование поведенческого отклика тактильных интерфейсов от внешних воздействий различной природы и интенсивности//

Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами Материалы пятой Всероссийской научной школы-семинара, Под редакцией профессора Д.А. Усанова. 2018. С. 56-59.

6. Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Корчагин С.А., Кондратьева Е.В. Обработка СЭМ изображений для определения порога проводимости// Нано- и биомедицинские технологии. Управление качеством. Проблемы и перспективы// Сборник научных статей. Саратов, 2018. С. 109-114.

7. Кожевников И.О., Ревзина Е.М., Кондратьева О.Ю., Терин Д.В. Моделирование динамики процессов в многослойных полупроводниковых структурах при внешних воздействиях// Нано- и биомедицинские технологии. Управление качеством. Проблемы и перспективы Сборник научных статей. Саратов, 2018. С. 31-34.

8. Колесникова А.С., Кондратьева О.Ю., Терин Д.В. Моделирование композиционных покрытий для датчиков давления // Нано- и биомедицинские технологии. Управление качеством. Проблемы и перспективы Сборник научных статей. Саратов, 2018. С. 34-36.

9. Кочнев Д.О., Галушка В.В., Терин Д.В., Галушка И.В., Кондратьева О.Ю. Моделирование процессов получения фрактальных биосовместимых кремниевых нано- и мезопористых структур// Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине - 2017 Материалы Всероссийской школы-семинара. Под редакцией Д.А. Усанова. 2017. С. 128-131.

10. Колесникова А.С., Глуховской Е.Г., Кондратьева О.Ю. Востребованность программная платформа quantumwise в области исследование свойств нанообъектов// Практическая биомеханика материалы докладов Всероссийской конференции молодых ученых с международным участием, посвященной 100-летию физико-математического образования в Саратовском государственном университете. 2017. С. 73-74.

11. Галушка И.В., Терин Д.В., Жаркова Э.А., Karpenko-Jereb L.V., Кондратьева О.Ю. Оценка отклика полученных электрохимически структур пористого кремния на внешнее электромагнитное воздействие//Актуальные проблемы теории и практики электрохимических процессов сборник материалов III Международной научной конференции молодых ученых. 2017. С. 79-83.

12. Терин Д.В., Кондратьева О.Ю., Кондратьева Е.В., Ревзина Е.М. Программный комплекс АТК как инструмент расчета зонной структуры карбида кремния //Нано- и биомедицинские технологии. Управление качеством. Проблемы и перспективы сборник научных статей. Саратов, 2016. С. 116-121.

13. Кондратьева Е.В., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Кондратьева О.Ю., Тугушева Г.Р., Ломовцева К.С. Копула в оценке надежности наноконпонентов//Наноэлектроника, нанофотоника и нелинейная физика доклады XI Всероссийской конференции молодых ученых. 2016. С. 118-119.

14. Ревзина Е.М., Кожевников И.О., Кондратьева О.Ю., Терин Д.В. Методические аспекты моделирования инженерных ассоциативных 3d-моделей типовых конструкций // Информационные технологии и математическое моделирование в образовании и научных исследованиях Министерство образования и науки РФ; Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского. Саратов, 2016. С. 122-127.

15. Биленко Д.И., Терин Д.В., Галушка И.В., Жаркова Э.А., Кондратьева О.Ю., Кочнев Д.О. Исследование морфологических признаков биосовместимых структур пористого кремния//Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине - 2016 Материалы Всероссийской школы-семинара. 2016. С. 168-170.

16. Терин Д.В., Кондратьева О.Ю., Ревзина Е.М., Кожевников И.О. Materials by design- новое направление при создании перспективных полимерных композиционных материалов// Перспективные полимерные

композиционные материалы. Альтернативные технологии. Переработка. Применение. Экология ("Композит-2016") доклады Международной конференции «Композит-2016» (60-летию Энгельсского технологического института (филиала) СГТУ имени Гагарина Ю.А. посвящается). Редактор Панова Л.Г.. 2016. С. 299-303.

17. Кожевников И.О., Ревзина Е.М., Кондратьева О.Ю., Терин Д.В. Особенности моделирования динамики процессов в многослойных полупроводниковых структурах при внешних воздействиях// Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами Материалы Всероссийской научной школы-семинара. Под редакцией Д.А. Усанова. 2016. С. 38-41.

18. Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Кондратьева Е.В., Ревзина Е.М. QUANTUM WISE - моделирование и расчет наноструктур /Нано- и биомедицинские технологии. Управление качеством. Проблемы и перспективы сборник научных статей. Саратов, 2016. С. 47-55.

19. Корчагин С.А., Терин Д.В., Кондратьева О.Ю., Романчук С.П. Многомасштабное моделирование диэлектрических свойств композитов слоистой структуры//Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами Материалы Всероссийской научной школы-семинара. Под редакцией Д.А. Усанова. 2016. С. 56-59.

20. Ломовцева К.С., Тугушева Г.Р., Кондратьева О.Ю., Терин Д.В. Определение оптимального срока службы медицинского оборудования с помощью асимметричной копулы//Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине - 2016 Материалы Всероссийской школы-семинара. 2016. С. 62-65.

21. Ломовцева К.С., Кондратьева Е.В., Кондратьева О.Ю. Применение ассиметричной копулы для определения оптимальной длительности гарантийного срока службы легковых автомобилей//Нано- и

биомедицинские технологии. Управление качеством. Проблемы и перспективы сборник научных статей. Саратов, 2016. С. 63-69.

22. Кожевников И.О., Ревзина Е.М., Кондратьева О.Ю., Терин Д.В. Научно-методические применения локально-полевой модели при математическом моделировании многослойных структур // Информационные технологии и математическое моделирование в образовании и научных исследованиях Министерство образования и науки РФ; Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского. Саратов, 2016. С. 72-77.

23. Кондратьева Е.В., Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Ревзина Е.М. QUANTUMWISE - программный пакет моделирования и прогнозирования свойств нанокomпозиционных материалов//Нанoeлектроника, нанoфотоника и нелинейная физика доклады XI Всероссийской конференции молодых ученых. 2016. С. 92-93.

24. Игнатов А.С., Кондратьева О.Ю., Кондратьева Е.В., Ревзина Е.М. Вероятностный подход для моделирования динамики изменения диагностических признаков//Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине - 2015 материалы Всероссийской молодежной конференции. Под редакцией Д.А. Усанова. 2015. С. 135-138.

25. Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Вениг С.Б. Оценка надежности нанобиосистем на основе теории копул //Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине - 2015 материалы Всероссийской молодежной конференции. Под редакцией Д.А. Усанова. 2015. С. 182-184.

26. Revzina E.M., Terin D.V., Kardash M.M., Venig S.B., Kondratyeva O.Y. Investigation of chemically reactive groups in nanocomposite material POLIKON K//Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения Scientific program 6th International Conference. 2015. С. 20-21.

27. Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Кондратьева Е.В., Вениг С.Б. Методология использования и особенности применения atomistix

toolkit QW в преподавании основ молекулярной динамики и квантовохимических расчетов//Информационные технологии в образовании XXI века Сборник научных трудов Международной научно-практической конференции. 2015. С. 204-208.

28. Kondrateva O.Y., Bilenko D.I., Terin D.V., Revzina E.M., Safonov R., Lomovtseva K.S., Tugusheva G.R., Venig S.B. Reliability evaluation of nanostructures using the theory of copulas//Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения Scientific program 6th International Conference. 2015. С. 26-27.

29. Kondrateva O.Y., Krylov S.N., Revzina E.M., Kondrateva E.V. GPU parallel computing in molecular dynamics calculations//Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения Scientific program 6th International Conference. 2015. С. 38.

30. Моделирование эволюции композиционного материала, имеющего вид динамической системы с нелинейностью Корчагин С.А., Терин Д.В., Кондратьева О.Ю.// Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами Материалы Всероссийской научной школы-семинара . Ответственный редактор Д.А. Усанов. 2015. С. 62-64.

31. Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Сафонов Р.А., Ревзина Е.М., Кондратьева Е.В. К вопросу оценки надежности наноконструкций с использованием понятия копулы // Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами Материалы Всероссийской научной школы-семинара . Ответственный редактор Д.А. Усанов. 2015. С. 72-74.

32. Кожевников И.О., Михайлов А.И., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Кондратьева О.Ю. Высокоэффективный микроразмерный датчик ик излучения //Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине -

2015 материалы Всероссийской молодежной конференции. Под редакцией Д.А. Усанова. 2015. С. 86-88.

33. Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Сафонов Р.А. Прогнозирование отказов наносистем// математическое моделирование и информационные технологии в научных исследованиях и образовании // Сборник научных статей. Саратов, 2015. С. 98-101.

Патенты:

1. Терин Д.В., Кочнев Д.О., Галушка И.В., Кондратьева О.Ю., Галушка В.В. Программа для моделирования процессов окисления поверхности при получении пористого кремния//свидетельство о регистрации программы для эвм rus 2018611220 25.01.2018

2. Терин Д.В., Кочнев Д.О., Галушка И.В., кондратьева О.Ю., Галушка В.В. программа для 2d - моделирования процессов порообразования при получении пористого кремния//свидетельство о регистрации программы для эвм rus 2018610930 19.01.2018

3. Терин Д.В., кочнев Д.О., галушка И.В., кондратьева О.Ю., галушка в.в., вениг с.б. программа для моделирования процессов блуждания молекул травителя при получении пористого кремния//свидетельство о регистрации программы для эвм rus 2018611219 25.01.2018

4. Жаркова Э.А., кондратьева О.Ю., терин Д.В., кондратьева Е.В., сафонов Р.А., шевцова Ю.В., недорезов П.Ф. программный комплекс "моделирование НДС пластинок и оболочек при статических и динамических воздействиях с использованием параллельных вычислений//свидетельство о регистрации программы для эвм rus 2017611073 19.01.2017

5. Жаркова Э.А., терин Д.В., галушка И.В., кондратьева О.Ю. моделирование фазовой и структурной модификации микро- и наноструктур электромагнитным излучением широкого диапазона энергий. Отклик 1"//свидетельство о регистрации программы для эвм rus 2016660463 15.09.2016

6. Жаркова Э.А., кондратьева О.Ю., терин Д.В., кондратьева Е.В., сафонов р.а., галушка и.в. программный комплекс "моделирование надежности наносистем "nanosopula-1"//свидетельство о регистрации программы для эвм rus 2016663614 13.12.2016

7. Кондратьева О.Ю., ревзина Е.М., терин Д.В., кондратьева Е.В., вениг с.б.программный комплекс "система сегментирования, анализа и маркетингования наукоемкой информации "кврт-1г" //свидетельство о регистрации программы для эвм rus 2016612523 01.03.2016