

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.097.01,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Института физики высоких давлений
им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 19 ноября 2018 года № 9

О присуждении КРУГЛОВУ ИВАНУ АЛЕКСАНДРОВИЧУ, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Поиск новых соединений, изучение их стабильности и свойств с использованием современных методов компьютерного дизайна материалов» по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния принята к защите 29 июня 2018 года (протокол № 4) Диссертационным советом Д 002.097.01, созданным на базе ФГБУН Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (Минобрнауки России), 108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14 (приказ Минобрнауки № 105/нк от 11.04.2012 г.).

Соискатель Круглов Иван Александрович, 1991 г. рождения, окончил в 2014 году магистратуру ФГАОУ ВО «Московского физико-технического института (государственного университета)» (МФТИ) по специальности «прикладные математика и физика». С 2014 по 2018 гг. обучался в аспирантуре МФТИ. С 2015 г. по настоящее время И.А. Круглов работает в должности старшего научного сотрудника в Федеральном государственном унитарном предприятии «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА») Государственной корпорации по атомной энергии «РОСАТОМ».

Диссертация выполнена в ФГУП «ВНИИА».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук Оганов Артем Ромаевич, Сколковский институт науки и технологий, Лаборатория компьютерного дизайна материалов, профессор.

Официальные оппоненты:

доктор физ.-мат. наук, профессор Чернозатонский Леонид Александрович, ФГБУН Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Лаборатория акустической спектроскопии, главный научный сотрудник; кандидат физ.-мат. наук Циок Елена Николаевна, ФГБУН Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук, Лаборатория фазовых переходов в сильнокоррелированных и неупорядоченных системах, старший научный сотрудник, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация, ФГБУН Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, в своем положительном отзыве, подписанном заместителем директора ОИВТ РАН к.ф.-м.н. Андреем Владимировичем Гавриковым, указала, что данная работа полностью удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, установленным в «Положении о порядке присуждения ученых степеней»..., а ее автор, Круглов Иван Александрович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 10 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 6 работ, из них в рецензируемых изданиях опубликовано 6 работ, общим объемом 4,3 печатных листа.

Совместные работы соискателя выполнены при его непосредственном участии в постановке задач, проведении теоретических расчетов, обработке и анализе полученных результатов, подготовке текста публикаций.

Наиболее значительные работы по теме диссертации:

1. Kruglov, I., Sergeev, O., Yanilkin, A., Oganov, A.R., Energy-free machine learning force field for aluminum // *Sci. Rep. Nature Publishing Group*, 2017. Vol. 7, № 1. P. 8512.
2. Kruglov, I., Akashi, R., Yoshikawa, S., Oganov, A.R., Esfahani, M.M.D., Refined phase diagram of the H-S system with high- T_c superconductivity // *Phys. Rev. B. American Physical Society*, 2017. Vol. 96, № 22. P. 220101.
3. Kvashnin, A.G., Kruglov, I.A., Semenov, D.V., Oganov, A.R., Iron Superhydrides FeH_5 and FeH_6 : Stability, Electronic Properties, and Superconductivity // *J. Phys. Chem. C. American Chemical Society*, 2018. Vol. 122, № 8. P. 4731–4736.

На автореферат поступили положительные отзывы от доктора химических наук директора Международного научно-исследовательского центра по материаловедению Самарского государственного технического университета В.А. Блатова; доктора химических наук, профессора, заведующего кафедрой кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета МГУ Н.Н. Еремина; доктора химических наук главного научного сотрудника ФГБНУ «Технологически институт сверхтвердых и новых углеродных материалов» Н.Р. Серебряной. Отзывы В.А. Блатова и Н.Р. Серебряной не содержат замечаний. Н.Н. Еремин высказал ряд замечаний, касающихся терминологии, используемой в диссертации, расшифровки сокращений и стилистике изложения, которые, по его мнению, «не снижают общее положительное впечатление от автореферата».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается строгим соответствием направлений научных исследований, выполняемых оппонентами и реализуемых в ведущей организации, тематике представленной диссертационной работы, наличием публикаций в соответствующей области исследований.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- с помощью эволюционного алгоритма USPEX были теоретически обнаружены новые фазы высокого давления в гидридах серы, железа и урана, которые являются потенциальными высокотемпературными

сверхпроводниками, построены фазовые диаграммы в координатах состав-давление;

- определена структура и свойства экспериментально синтезированной при 36 ГПа фазы высокого давления сульфида бора. Расчет показал, что при давлении 50 ГПа в ней должен происходить фазовый переход диэлектрик-металл;

- разработан межатомный потенциал взаимодействия на основе алгоритмов машинного обучения, способный с высокой точностью предсказывать энергию структуры и межатомные силы. С его помощью были рассчитаны термодинамические свойства алюминия и построена фазовая диаграмма урана в диапазоне температур до 15000 К и давлений до 800 ГПа.

Теоретическая значимость исследований обусловлена тем, что был разработан метод для построения фазовых диаграмм бинарных соединений в координатах состав-давление с помощью эволюционного алгоритма USPEX. Этим методом были определены области стабильности гидридов серы, железа и урана. Разработанный на основе алгоритмов машинного обучения межатомный потенциал позволил с высокой точностью рассчитывать кривые плавления и фазовые диаграммы больших систем в рамках метода классической молекулярной динамики.

Практическое значение полученных соискателем результатов обусловлено определением области стабильности потенциальных высокотемпературных сверхпроводников на основе гидридов серы, железа и урана, что позволит экспериментаторам проводить направленный синтез данных соединений. Рассчитанная фаза высокого давления сульфида бора позволила расшифровать экспериментально полученную дифрактограмму и определить кристаллическую структуру синтезированного вещества. Разработанный межатомный потенциал позволяет с высокой точностью рассчитать кривую плавления и построить фазовую диаграмму системы в широком диапазоне давлений и температур.

Оценка достоверности приведенных результатов исследований выявила совпадение экспериментальных и теоретически рассчитанных уравнений состояния для гидридов железа $\text{FeH}_{2.5}$. Теоретические расчеты структур семейства полигидридов урана $\text{UH}_{5.9}$ были подтверждены экспериментально в алмазных наковальнях для синтезированных гидридов урана $\text{UH}_{5.7,8}$. Дифрактограмма изначально синтезированной фазы высокого давления сульфида бора была расшифрована благодаря последующему расчету её кристаллической структуры. Плотность фононных состояний, функция радиального распределения и энтропия алюминия, рассчитанные с помощью разработанного межатомного потенциала, находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии на всех этапах, представленных в диссертации, а именно: поиска новых материалов при высоких давлениях, изучения их структуры и свойств и разработки межатомного потенциала взаимодействия, а также подготовки публикаций.

На заседании диссертационный совет принял решение присудить И.А. Круглову ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них 13 докторов наук, участвовавших в заседании, из 19 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 14, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного
совета, академик



СТИШОВ Сергей Михайлович

Ученый секретарь
диссертационного совета
к.ф.-м.н.




Валянская Татьяна Валентиновна

20 ноября 2018 г.