

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

по защите диссертации Квашнина Александра Геннадьевича на тему «Компьютерный дизайн новых функциональных и конструкционных материалов с заданными физико-химическими свойствами для целенаправленного синтеза», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» и состоявшейся в НИТУ «МИСиС» 25 февраля 2021 года

Диссертация принята к защите Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» 16.11.2020, протокол №23.

Диссертация выполнена в лаборатории компьютерного дизайна материалов Центра энергетических наук и технологий Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий».

Научный консультант – доктор физико-математических наук, профессор РАН, руководитель лаборатории компьютерного дизайна материалов Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий» Оганов Артём Ромаевич.

Экспертная комиссия утверждена Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» (протокол №23 от 16.11.2020) в составе:

1. Штремель Мстислав Андреевич, д.ф.-м.н., ведущий эксперт НИЛ «Гибридные наноструктурные материалы» НИТУ «МИСиС» – председатель комиссии;
2. Векилов Юрий Хоренович, д.ф.-м.н., профессор кафедры теоретической физики и квантовых технологий НИТУ «МИСиС»;
3. Штанский Дмитрий Владимирович, д.ф.-м.н., главный научный сотрудник Научно-учебного центра СВС МИСиС-ИСМАН, НИТУ «МИСиС»;
4. Григорьев Павел Дмитриевич, д.ф.-м.н., старший научный сотрудник Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук, по совместительству профессор кафедры теоретической физики и квантовых технологий НИТУ «МИСиС»;
5. Таюрский Дмитрий Альбертович, д.ф.-м.н., проректор по образовательной деятельности Казанского (Приволжского) федерального университета;
6. Рубцов Алексей Николаевич, д.ф.-м.н., профессор кафедры квантовой электроники Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова;
7. Литасов Константин Дмитриевич, д.г.-м.н., главный научный сотрудник, Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (ИФВД РАН);

В качестве ведущей организации утружден Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск.

Экспертная комиссия отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- была проведена оптимизация синтеза сверхтвёрдого материала на основе высшего борида вольфрама с уникальным набором физико-химических свойств, который способен стать более дешёвой и эффективной заменой традиционным твёрдым сплавам, применяемым в добывающей промышленности;
 - получена карта распределения твердых и сверхтвердых материалов, обладающих высокими значениями твердости и трещиностойкости, которая дает подробную информацию о наиболее перспективных соединениях для дальнейших экспериментальных исследований;
 - рассчитаны сверхпроводящие характеристики большого количества гидридов металлов, полученные данные использованы для проведения целенаправленных экспериментальных исследований по синтезу и измерению сверхпроводящих характеристик наиболее перспективных;
 - получены новые данные о распределении сверхпроводящих характеристик гидридов химических элементов, обладающих высокой критической температурой, способные дать направление для дальнейших экспериментальных исследований в этой области;
 - доказана перспективность использования методов компьютерного предсказания материалов, определяющих наиболее перспективные соединения для дальнейшего целенаправленного синтеза.
- Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:
- применительно к проблематике диссертации эффективно использованы методы компьютерного предсказания материалов для поиска новых соединений, способных найти потенциальное применение в различных областях промышленности;
 - разработана решеточная модель кристаллической структуры типа MeV_{5-x} , с помощью которой были объяснены причины образования нестехиометричных фаз высших боридов вольфрама и молибдена;
 - изложены положения, связывающие между собой сверхпроводящие характеристики гидридов, их химический состав и кристаллическую структуру.

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

- предсказанные кристаллические структуры твердых и сверхтвердых материалов могут быть синтезированы экспериментально без использования высоких давлений и применяться в различных областях науки и техники;

- спрогнозированная структура высшего борида вольфрама позволила разработать метод синтеза нового материала на основе высшего борид вольфрама для добывающей промышленности (получен патент);

- предложены правила, определяющие области новых гидридных соединений для проведения дальнейших экспериментальных исследований по синтезу сверхпроводящих гидридов элементов, обладающих высокой критической температурой.

Оценка достоверности результатов исследования:

- использованы современные и зарекомендованные теоретические методы для исследования физических свойств конденсированных сред;

- установлены количественное совпадение авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках по данной тематике, в тех случаях, когда такое сравнение является обоснованным;

- основные результаты исследования были представлены на большом количестве конференций высокого уровня, как международных, так и всероссийских

Личный вклад соискателя состоит в:

непосредственной постановке всех решенных в диссертационном исследовании задач, выборе методик расчёта, сопровождении и планировании экспериментальных исследований, обсуждении полученных результатов с научным консультантом и соавторами, написании научных статей и патентов.

Соискатель представил 17 опубликованных работ в рецензируемых научных изданиях из перечня, утвержденного Минобрнауки России, 16 из них опубликованы в изданиях, индексируемых в наукометрических базах данных Web of Science, Scopus.

Пункт 2.6 Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ «МИСиС» соискателем ученой степени не нарушен.

Диссертация Квашнина А.Г. соответствует критериям п. 2 Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ «МИСиС», так как в ней изложены теоретические положения, квалифицируемые как значимое научное достижение в области сверхпроводящих и сверхтвердых материалов, которое приводит к созданию современных направлений по исследованиям ВТСП гидридов для электроники и сверхтвердых боридов для добывающей промышленности.

Экспертная комиссия приняла решение о возможности присуждения Квашнину Александру Геннадьевичу ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

При проведении тайного голосования экспертная комиссия в количестве 5 человек, участвовавших в заседании, из 7 человек, входящих в состав комиссии, проголосовала: за - 5, против - 2, недействительных бюллетеней - 0.

Председатель Экспертной комиссии



Штремель М.А.

25.02.2021