

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.131.01,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина
Российской академии наук (Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации), ПО ДИССЕТРАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ
СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 16.11.2022 г. № 5

О присуждении САГАТОВУ НУРСУЛТАНУ, гражданство Республики
Казахстан, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Первопринципное исследование фазовых соотношений и упругих свойств в системах металл-легкий элемент при высоких давлениях» по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния принята к защите 07.09.2022 г. (протокол № 2) Диссертационным советом 24.1.131.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук, 108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, д. 14 (приказ Минобрнауки России № 105/нк от 11.04.2012 г.).

Соискатель Сагатов Нурсултан, 23 августа 1993 года рождения, в 2017 году окончил магистратуру Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева (г. Астана, Казахстан) по специальности «техническая физика». В настоящее время соискатель работает в должности научного сотрудника в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте геологии и минералогии им. В.С. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук (ИГМ СО РАН), Минобрнауки России.

Диссертация выполнена в Лаборатории фазовых превращений и диаграмм состояния вещества Земли при высоких давлениях (№ 454) ИГМ СО РАН.

Научный руководитель – кандидат геолого-минералогических наук Гаврюшкин Павел Николаевич, ИГМ СО РАН, Лаборатория фазовых превращений и диаграмм состояния вещества Земли при высоких давлениях (№ 454), старший научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

Еремин Николай Николаевич, доктор химических наук, член-корреспондент РАН, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», Геологический факультет, заведующий кафедрой кристаллографии и кристаллохимии, и.о. декана факультета;

Квашнин Александр Геннадьевич, доктор физико-математических наук, Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», старший преподаватель, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация, Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Технологический институт сверхтвёрдых и новых углеродных материалов», г. Москва, г. Троицк, в своем положительном отзыве, подписанном Сорокиным Павлом Борисовичем, доктором физико-математических наук, заведующим лабораторией моделирования новых материалов, указала, что представленная работа полностью удовлетворяет всем требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Сагатов Нурсултан заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 28 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 9 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 9 работ. В 5 опубликованных по теме диссертации работах соискатель является первым автором. Совместные работы соискателем выполнены при его непосредственном участии в постановке задач, проведении теоретических расчетов, обработке и анализе полученных результатов, подготовке текста публикаций. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения о работах, опубликованных соискателем учёной степени.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

1. **Sagatov N.E.**, Sagatova D.N., Gavryushkin P.N., Litasov K.D. Fe–N system at high pressures and its relevance to the Earth's core composition // *Crystal Growth & Design*. – 2021. – V. 21. – № 11. – P. 6101-6109.

2. **Sagatov N.E.**, Abuova A.U., Sagatova D.N., Gavryushkin P.N., Abuova F.U., Litasov K.D. Phase relations, and mechanical and electronic properties of nickel borides, carbides, and nitrides from ab initio calculations // *RSC Advances*. – 2021. – V. 11. – № 53. – P. 33781-33787.

3. Litasov K.D., Bekker T.B., **Sagatov N.E.**, Gavryushkin P.N., Krinitsyn P.G., Kuper K.E. (Fe,Ni)₂P allabogdanite can be an ambient pressure phase in iron meteorites // *Scientific Reports*. – 2020. – V. 10. – № 1. – P. 8956.

На автореферат диссертации дали положительный отзыв:

Попов Захар Иванович, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Лаборатории акустической микроскопии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, прислал отзыв без замечаний;

Орешонков Александр Сергеевич, к.ф.-м.н., научный сотрудник Лаборатории молекулярной спектроскопии Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского Отделения Российской академии наук – обособленного подразделения ФИЦ «Красноярский научный центр

Сибирского отделения Российской академии наук», прислал отзыв без замечаний;

Марченко Екатерина Игоревна, к.х.н., ведущий научный сотрудник кафедры кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования "Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова" рекомендовала расширить обсуждение кристаллических структур и структурных типов фаз, показанных на фазовых диаграммах, а также обосновать выбор диапазона температур, использованных при моделировании;

Аксенов Сергей Михайлович, к.г.-м.н., заведующий Лабораторией арктической минералогии и материаловедения Федерального исследовательского центра «Кольский научный центр РАН» в качестве небольших замечаний отметил нераскрытый вопрос о причинах отсутствия полифосфидов, в том числе, полифосфидов железа при высоких давлениях и температурах и рекомендовал показать сложные изменения кристаллических структур соединений, претерпевающих фазовые переходы, например, Fe_3C .

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их известностью своими достижениями в данной отрасли науки, высокой квалификацией и профессиональной компетентностью в тематике диссертационного исследования, способностью определить научную новизну и практическую значимость диссертации, что подтверждается наличием опубликованных работ в соответствующей сфере исследований.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- С помощью эволюционного алгоритма USPEX и алгоритмов случайной выборки AIRSS были предсказаны новые фазы высокого давления в нитридах и фосфидах железа/никеля;
- Построены новые фазовые диаграммы для карбидов и фосфидов железа;

- Определена область стабильности на фазовой диаграмме давление-температура β -фазы нитрида железа, ранее синтезированной экспериментально;
- Рассчитаны упругие свойства стабильных при давлении внутреннего ядра Земли карбидов и нитридов железа.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что полученные результаты интересны как в целом для физики конденсированного состояния, так и для смежных областей науки – физики высоких давлений и геофизики. В частности:

- На основе предсказанных наиболее энергетически выгодных промежуточных фаз в бинарных системах Fe – X и Ni – X, где X = C, N и P в термодинамическом диапазоне $P = 0-400$ ГПа и $T = 0-4000$ К, продемонстрирована возможность обобщения и разработки кристаллохимических критериев при поиске новых фаз на основе переходных металлов и легких элементов, устойчивых при высоких давлениях и температурах;
- Разработаны критерии, которые могут быть использованы при построении фазовых диаграмм других подобных соединений;
- Теоретически исследованы фазы на основе никеля применительно к давлениям, характерным для ядра Земли.

Значение полученных соискателем результатов для практики подтверждается тем, что имеется возможность их экспериментальной проверки и включения в общую базу данных, используемую для исследования структуры и состава ядра Земли.

Оценка достоверности результатов исследования основана на том, что:

- В работе использован метод компьютерного моделирования, основанный на эволюционных алгоритмах программных пакетов USPEX и AIRSS, которые зарекомендовали себя как наиболее эффективные инструменты для предсказания кристаллических структур разнообразных соединений, в том числе при экстремальных термодинамических условиях. Расчеты

проводились в рамках теории функционала плотности (DFT, программный пакет VASP). Для учета влияния температуры при построении фазовых Р-Т диаграмм использовался метод динамики кристаллической решетки в квазигармоническом приближении. Основное преимущество такого комплексного подхода – проведение численного эксперимента при труднодостижимых или недостижимых в реальных экспериментах условиях;

- Результаты расчета упругих свойств карбидов и нитридов железа корректно воспроизводят имеющиеся экспериментальные данные и хорошо согласуются с результатами моделирования, полученными другими исследователями;
- Полученные результаты по фазовым переходам в фосфиде железа Fe_2P послужили мотивацией для проведения эксперимента, в котором была подтверждена теоретически предсказанная термодинамическая стабильность Fe_2P в структуре аллабогданита при нормальных условиях.

Таким образом, можно сделать заключение о надежности и достоверности полученных результатов. Научная значимость не вызывает сомнений, т.к. расчеты предсказывают свойства материалов при высоких давлениях, допускающие экспериментальную проверку. Результаты работы опубликованы в высокорейтинговых журналах, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science.

Личный вклад соискателя заключается в непосредственном участии на всех этапах исследовательского процесса, в самостоятельном проведении квантово-химических расчетов по поиску стабильных промежуточных составов и структур в системах Fe-X и Ni-X ($X = \text{C}, \text{N}, \text{P}$), расчете фононных спектров и построении Р-Т диаграмм, расчете упругих свойств карбидов и нитридов железа, в обработке, анализе и интерпретации материала, в апробации результатов исследования на всероссийских и международных научных конференциях, в подготовке публикаций по теме исследования.

В ходе защиты диссертации были заданы вопросы и высказаны следующие критические замечания от членов диссертационного совета:

Демишев С.В.: Что понимается под термином «фазовые соотношения»? Какова ошибка расчетных данных, представленных на графике и как они согласуются с экспериментом?

Арсеев П.И.: Означает ли, что вторая граница между фазами $Pnma-I$ и $Pnma-II$ идет вообще вертикально и фононный спектр совершенно идентичный? Граница между этими фазами не зависит от температуры? А это не означает, что в реальности у Вас там будет смесь фаз? Чем отличаются Ваши расчеты от результатов из китайской статьи Жоу?

Стегайлов В.В.: Как Вы обоснуете, что в расчетах не учитывается Хаббардовская поправка?

Рубцов А.Н.: Что Вы можете сказать о предположении, что ядро Земли облегчено фосфором и сколько его там есть? Или, например, кислородом, углеродом в фазе Fe_3C , которую Вы считали? Раз его там так мало, какой есть смысл считать вот такие кристаллические структуры? Почему вы думаете, что это кристаллы, а не какой-то твердый раствор?

Антонов В.Е.: Не могли бы Вы как-то кратко сформулировать, что вообще нового Вы узнали про ядро Земли благодаря этим расчетам, чего не было известно раньше?

Алексеев П.А.: Есть ли возможность сравнить Ваши расчеты дисперсионных кривых фононов с экспериментальными результатами? Имеют ли значение развитые Вами новые представления о земном магнетизме или это все малые добавки?

Давыдов В.А.: Почему не рассматривается в качестве кристаллических фаз с высоким содержанием углерода фаза Хегга, Fe_3C_2 ? Можете ли вы дать какую-то структурную модель в терминах упаковок, которые бы демонстрировали стабилизирующее действие давления, которое позволяет получать составы с более высоким содержанием углерода?

Фомин Ю.Д.: Вы говорили, что плотность ядра на 3–5 процентов ниже, чем плотность чистого железа при тех же давлении и температуре, это экстраполяция? А вы уверены, что экстраполяция не врет на 3–5 процентов?

Вопрос касается графического представления на слайде: например, при давлении 100 ГПа и температуре 1600, согласно левого графика там FeN, согласно правого - Fe₃N. Какая же фаза должна быть на самом деле?

Бражкин В.В.: Рассчитывались ли Вами коэффициенты Пуассона при нулевой температуре? Производили ли сравнение с тем, что там выше 6000 градусов? В общем, я так понимаю, что коэффициенты и так достаточно высокие, больше чем 0.4, что позволяет надеяться, что при высоких температурах они сохраняются.

Соискатель Сагатов Нурсултан дал аргументированные ответы на заданные ему в ходе заседания вопросы от членов диссертационного совета, а также на замечания ведущей организации, оппонентов и в отзывах на автореферат диссертации.

На заседании 16 ноября 2022 г. диссертационный совет принял решение присудить Сагатову Нурсултану ученую степень кандидата физико-математических наук за расчет фазовых диаграмм нитридов и фосфидов железа и никеля в экстремальных условиях, что является важным вкладом в исследовании структуры и состава ядра Земли.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 15 докторов наук, участвовавших в заседании, из 16 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 16, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель
диссертационного совета,

академик

Ученый секретарь
диссертационного совета,

кандидат физ.-мат. наук

« 18 » ноября 2022 г.



Бражкин Вадим Вениаминович

Циок Елена Николаевна