

РЕШЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА УрФУ 1.3.02.06
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

от 29 сентября 2023 г. № 23

о присуждении Балякину Илье Александровичу, гражданство Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Потенциалы глубокого машинного обучения для неупорядоченных систем: применимость, переносимость, предсказательная способность» по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния принята к защите диссертационным советом УрФУ 1.3.02.06 «10» июля 2023 г., протокол № 19.

Соискатель, Балякин Илья Александрович, 1994 года рождения,

в 2018 г. окончил ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению подготовки 11.04.04 Электроника и нанoeлектроника;

в 2022 г. окончил очную аспирантуру ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия (Физика конденсированного состояния);

работает в ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук в должности младшего научного сотрудника лаборатории высокоэнтропийных сплавов, и по совместительству в ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» в должности младшего научного сотрудника Научно-образовательного центра «Наноматериалы и нанотехнологии».

Диссертация выполнена на кафедре физических методов и приборов контроля качества Физико-технологического института и в Научно-образовательном центре «Нanomатериалы и нанотехнологии» ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России, и в лаборатории высокоэнтропийных сплавов ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, Минобрнауки России.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, академик РАН, профессор, **Ремпель Андрей Андреевич**, ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, директор института.

Официальные оппоненты:

Горностырёв Юрий Николаевич – доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, лаборатория цветных сплавов, главный научный сотрудник;

Воронцов Александр Геннадьевич – доктор физико-математических наук, доцент, ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», г. Челябинск, кафедра «Физика наноразмерных систем», заведующий кафедрой;

Кондратюк Николай Дмитриевич – кандидат физико-математических наук, ФГАОУ ВО «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», г. Долгопрудный, лаборатория многомасштабного моделирования в физике мягкой материи, заведующий лабораторией

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 33 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации опубликована 21 работа, из них 10 статей, опубликованных в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ и входящих в международные реферативные базы данных Scopus и Web of Science. Общий объем опубликованных работ по теме диссертации – 5,19 п.л., авторский вклад – 1,74 п.л.

Основные публикации по теме диссертации

Статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ:

1. **Balyakin I.A.** Partial pair correlation functions of liquid TiZrHfNbTa high-entropy alloy / **I. A. Balyakin**, A.A. Yuryev, B.R. Gelchinski, A.A. Rempel // AIP Conference proceedings. Physics, Technologies and Innovation, PTI 2019. Proceedings of the IV International Young Researchers Conference. – 2019. – Vol. 2174. – 020082; 0,31 п.л./ 0,08 п.л. (Web of Science, Scopus).

2. **Balyakin I.A.** Ab initio molecular dynamics study of TiZrHfNbTa and VZrMoHfW liquid alloys / **I. A. Balyakin**, B. R. Gelchinski, A. A. Rempel // Materials Today Communications. – 2019. – Vol. 21. – 100627; 0,31 п.л./0,10 п.л. (Web of Science, Scopus).

3. **Balyakin I.A.** Machine learning interatomic potential for molten TiZrHfNb / **I. A. Balyakin**, A. A. Rempel, // AIP Conference proceedings. Physics, Technologies and Innovation, PTI 2020. Proceedings of the VII International Young Researchers Conference. – 2020. – Vol. 2313. – 030037; 0,38 п.л./0,19 п.л. (Web of Science, Scopus).

4. **Balyakin I.A.** Ab initio molecular dynamics and high dimensional neural network potential study of VZrNbHfTa melt / **I.A. Balyakin**, A.A. Yuryev, B.R. Gelchinski, A.A. Rempel // Journal of Physics Condensed Matter. – 2020. – Vol. 32. – 214006; 0,69 п.л./0,17 п.л. (Web of Science, Scopus).

5. **Balyakin I.A.** Deep machine learning interatomic potential for liquid silica / **I.A. Balyakin**, Rempel S.V., Ryltsev R.E., Rempel A.A. // Physical Review E. – 2020. – Vol. 102. – 052125; 0,44 п.л./0,11 п.л. (Web of Science, Scopus).

6. Uporov S.A. Pressure effects on electronic structure and electrical conductivity of TiZrHfNb high-entropy alloys / S.A. Uporov, R.E. Ryltsev, V.A. Sidorov, S.Kh. Estemirova, E.V. Sterkhov, **I.A. Balyakin**, N.M. Chtchelkatchev // Intermetallics. – 2022. – Vol. 140. – 107394; 0,50 п.л./0,07 п.л. (Web of Science, Scopus).

7. **Balyakin I.A.** Deep learning potentials for superionic phase of Ag₂S / **I.A. Balyakin**, S. I. Sadovnikov // Computational Materials Science. – 2022. – Vol. 202. – 110963; 0,50 п.л./0,25 п.л. (Web of Science, Scopus).

8. **Balyakin I. A.** Atomistic Calculation of the Melting Points of the High-Entropy Cantor Alloy CoCrFeMnNi / **I. A. Balyakin**, A. A. Rempel // Doklady Physical Chemistry. – 2022. – Vol. 502, № 1. – PP. 11-17; 0,44 п.л./0,22 п.л. (Web of Science, Scopus).

9. **Balyakin I.A.** Viscosity of liquid gallium: Neural network potential molecular dynamics and experimental study / **I. A. Balyakin**, A.A. Yuryev, V.V. Filippov, B.R. Gelchinski// Computational Materials Science. – 2022. – Vol. 215. – 111802; 0,38 п.л./0,09 п.л. (Web of Science, Scopus).

10. **Balyakin I.A.** Liquid-crystal Inheritance in Machine Learning Potentials for Network-Forming Systems / **I.A. Balyakin**, R.E. Ryltsev, N. M. Chtchelkatchev // JETP Letters. – 2023. – Vol. 117, № 5. – PP. 370-376; 0,44 п.л./0,15 п.л. (Web of Science, Scopus).

На автореферат поступили отзывы:

1. **Жеребцова Сергея Валерьевича**, доктора технических наук, доцента, профессора кафедры материаловедения и нанотехнологий ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет». Содержит вопрос об исследовании влияния размеров тренировочной ячейки на качество моделей, и вопрос о том, вносились ли в модельную систему TiZrHfNbTa точечные дефекты.

2. **Анкудинова Владимира Евгеньевича**, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника теоретического отдела ФГБУН Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук, г. Москва. Содержит вопрос о скорости охлаждения при моделировании фазового распада в системе Bi-Ga .

3. **Байдакова Владимира Георгиевича**, доктора физико-математических наук, профессора, научного руководителя института, и **Проценко Сергея Павловича**, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника лаборатории криогеники и энергетики ФГБУН Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Содержит вопросы по критерию определения стабильности кристаллических фаз SiO_2 .

4. **Попова Ильи Сергеевича**, кандидата химических наук, научного сотрудника лаборатории квантовой химии и спектроскопии ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Содержит замечания о ряде опечаток в автореферате, а также вопрос о причине выбора для построения межчастичных потенциалов программы DeePMD, и вопрос о применимости данного подхода к задачам моделирования поверхностей и наночастиц.

Выбор официальных оппонентов обосновывается их широкой известностью своими достижениями и высокой научной компетентностью в области физики конденсированного состояния, близостью тематики проводимых ими исследований и темы диссертационной работы.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ и является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, связанной с анализом применимости, переносимости и

предсказательной способности нейросетевых межчастичных потенциалов взаимодействия, имеющей значение для физики конденсированного состояния в области атомистического компьютерного моделирования.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

– продемонстрировано, что использование межчастичных потенциалов на основе искусственных нейронных сетей позволяет рассчитывать температурные зависимости вязкости и прогнозировать фазовое расслоение в бинарных металлических расплавах;

– построена модель для расчета энергии расплавов системы Bi-Ga, основанная на топологии многогранников Вороного, установлено, что данная модель хорошо описывает как температурную, так и концентрационную зависимость энергии в расплавах системы Bi-Ga;

– установлено, что локальная структура расплавов SiO_2 содержит фрагменты всех известных кристаллических фаз диоксида кремния, что позволяет количественно описывать свойства данных фаз, основываясь только на свойствах расплава SiO_2 ;

– показано, что при помощи нейросетевых потенциалов, обученных на высокотемпературных неупорядоченных конфигурациях сетепорядочивающих систем, возможно прогнозировать устойчивые кристаллические фазы для данных систем;

– при помощи ИНС-потенциала описана поверхность потенциальной энергии системы с высокой размерностью композиционного пространства – высокоэнтропийного сплава TiZrHfNbTa;

– установлено, что атому водорода энергетически более выгодно находиться в тетраэдрических междоузлиях ОЦК-TiZrHfNbTa, обогащенных титаном.

Полученные результаты о применимости, переносимости и предсказательной способности потенциалов глубокого машинного обучения для неупорядоченных систем являются актуальными для решения задач атомистического моделирования конденсированных сред.

На заседании 29 сентября 2023 г. диссертационный совет УрФУ 1.3.02.06 принял решение присудить Балякину И.А. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет УрФУ 1.3.02.06 в количестве 17 человек, из них 5 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали за – 17 человек, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета

УрФУ 1.3.02.06



Handwritten signature of Igor Ogorodnikov

Огородников Игорь Николаевич

Ученый секретарь

диссертационного совета

УрФУ 1.3.02.06



Handwritten signature of Alexey Ishchenko

Ищенко Алексей Владимирович

29 сентября 2023 г.