

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.193.01  
(Д 002.110.02), СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО  
ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ  
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА  
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 04.10.2023г. № 6

О присуждении Мальцеву Максиму Александровичу, гражданину Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Двухатомные соединения аргона в равновесной низкотемпературной плазме» по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника принята к защите 31.07.2023г., (протокол заседания № 3) диссертационным советом 24.1.193.01 (Д 002.110.02), созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2, (495) 485-8345, jiht.ru), утвержденного Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 86/нк от 26.01.2022г.

Соискатель Мальцев Максим Александрович 1993 года рождения, в 2019 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Работает в должности научного сотрудника лаборатории № 1.6 – теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

В 2023 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего

образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Диссертация выполнена в лаборатории № 1.6 – теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель доктор физико-математических наук, доцент, заведующий лабораторией № 1.6 - теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук Морозов Игорь Владимирович.

Официальные оппоненты:

– доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической химии химического факультета ФГБОУ ВО Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова Пазюк Елена Александровна;

– доктор химических наук, профессор, ведущий научный сотрудник ФГБУН Ордена Трудового Красного Знамени Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук Лопатин Сергей Игоревич.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет» в своем положительном заключении, составленном проф. кафедры физики ИГХТУ, д.х.н. Кудиным Львом Семеновичем. (утвержденном 11.09.2023г. ученым секретарем совета ИГХТУ к.э.н. Хомяковой А.А.) указала, что научная значимость работы заключается, в первую очередь, в создании новой методики расчета термодинамических функций для двухатомных идеальных газов. Ключевой особенностью разработанного метода является способность рассчитывать внутренние статистические суммы в том случае, когда потенциальные кривые межатомного взаимодействия имеют сложную форму

(например, два локальных минимума и локальные максимумы). Оригинальность предложенного метода заключается в прямом использовании потенциалов межатомного взаимодействия, которые можно рассчитать высокоточными методами квантовой химии.

Разработанный метод расчета был использован для определения термодинамических функций двухатомных соединений аргона, которые активно обнаруживаются в экспериментальных установках, использующих аргоновую плазму в качестве ионного источника (МС ИСП, ГД МС). Рассчитанные термодинамические зависимости ранее не изучались и были опубликованы впервые.

Полученные в диссертационной работе новые результаты в области термодинамического моделирования представляют несомненный интерес для специалистов в областях и отраслях, использующих масс-спектрометрические установки с низкотемпературной плазмой в качестве ионного источника. С полученными результатами целесообразно ознакомить следующие организации: Московский государственный университет, Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химической физики РАН им. Н.Н. Семенова, Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований, Физический институт РАН им. П.Н. Лебедева, Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН и др.

Соискатель имеет 6 опубликованных работ по теме диссертации в реферируемых журналах из списка ВАК:

1. *Maltsev M.A., Kulikov A.N., Morozov I.V.* Thermodynamic properties of vanadium and cobalt argide ions,  $VAr^+$  and  $CoAr^+$  // *Journal of Physics: Conference Series* — 2016. — Vol. 774, no. 1. — P. 012023
2. *Мальцев М.А., Морозов И.В., Осина Е.Л.* Термодинамические свойства димеров аргона  $Ar_2^+$  и  $Ar_2$  // *ТВТ.* — 2019. — Том 57, вып. 1. — С. 42–46
3. *Мальцев М.А., Морозов И.В., Осина Е.Л.* Термодинамические свойства  $ArH^+$  и  $ArH$  // *ТВТ.* — 2019. — Том. 57, вып. 3. — С. 367–370
4. *Мальцев М.А., Морозов И.В., Осина Е.Л.* Термодинамические свойства  $ArO$

и  $\text{ArO}^+$  // ТВТ. — 2020. — Том. 58, вып. 2. — С. 202–207

5. *Maltsev M.A., Morozov I.V., Osina E.L.* Computation of molecular spectra and thermodynamic functions for diatomic ideal gases using interatomic potentials // J. Phys.: Conf. Ser. — 2021. — Vol. 1787. no. 1. — P. 012009

6. *Maltsev M.A., Aksenova S.A., Morozov I.V., Minenkov Y., Osina E.L.* Ab initio calculations of the interaction potentials and thermodynamic functions for  $\text{ArN}$  and  $\text{ArN}^+$  // Journal of Computational Chemistry — 2023. — Vol. 44. no. 12. — P. 1189–1198

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук (ИНХС РАН)** (и.о. зав. лабораторией, главный научный сотрудник д.ф.-м.н. Лебедев Ю.А.) – отзыв положительный, без замечаний.

2. **Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»** (профессор кафедры физико-химические методы анализа, д.х.н. Пупышев А.А.) – отзыв положительный, с замечаниями:

– Стр. 3. В таких источниках ионов, как тлеющий разряд и индуктивно связанная плазма, плазма, аргон не является буферным газом, как ошибочно определяет его автор. В газовых электрических разрядах аргон является главным компонентом рабочего тела системы, определяющим температуру плазмы, концентрацию электронов в ней, основной ионный состав и характер ионно-молекулярных реакций.

– Стр. 19. Отнесение автором работы [38] к примерам моделирования процессов в низкотемпературной плазме является ошибочным, поскольку состояние рабочего тела в графитовой печи определяется температурой и концентрацией электронов, задаваемой термоэмиссией стенок графитовой печи, а не процессами в плазме.

– Стр. 20. Статистический коэффициент  $R^2$  является коэффициентом детерминации, а не корреляции. Поэтому полученные автором коэффициенты корреляция между экспериментальными и теоретическим данными, особенно в случае нормальной плазмы, будут более высокими, чем показано автором.

– Стр. 20. При наличии существенных расхождений между экспериментом и расчетом по некоторым индивидуальным веществам (например,  $\text{NO}^+$ ) в нормальной плазме автором почему-то не проанализированы возможные причины этих расхождений, особенно со стороны правильности основных термодинамических функций в этом диапазоне температур.

**3. Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (с.н.с. лаборатории квантово-химических расчетов к.х.н. Отлетов А.А.) – отзыв положительный, с замечанием:**

– при ознакомлении с текстом автореферата вызывало сомнение использование автором термина «энергетическая структура» применительно к молекулам и ионам. Также из текста не вполне ясно, каким образом были вычислены спин–орбитальные и спин–спиновые поправки к потенциальной энергии (Рис. 2).

**4. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова» (зав. Лабораторией химической термодинамики химического факультета МГУ, д.х.н., проф. Успенская И.А.)**  
- отзыв положительный, с замечанием:

– в части работы, касающейся аппроксимации потенциальных кривых, из текста автореферата не вполне понятно, какими критериями руководствовался автор при выборе той или иной модели, как оценивались достаточное число параметров моделей.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

– д.ф.-м.н., профессор Пазюк Елена Александровна является ведущим ученым в области молекулярной спектроскопии и квантово-химического моделирования.

1. Мешков В.В., Пазюк Е.А., Столяров А.В., Усов Д.П., Рыжков А.М., Савельев И.М., Кожедуб Ю.С., Мосягин Н.С., Шабает В.М. Ab initio-реконструкция межатомного потенциала для основного электронного состояния молекулы CO // Журнал физической химии, Т. 97, № 10, с. 1, 2023;
2. Козлов С.В., Пазюк Е.А., Столяров А.В. Неэмпирический анализ спин-орбитального взаимодействия между возбужденными электронными состояниями молекулы KRb // Журнал физической химии, Т. 97, № 9, с. 1, 2023;
3. Terashkevich V.A., Pazyuk E.A., Stolyarov A.V., Yurchenko S.N. A coupled-channel deperturbation treatment of the  $X^2\Sigma^+ \sim A^2\Pi \sim B^2\Sigma^+$  complex of the CN radical towards spectroscopic accuracy // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Vol. 292, p. 108366, 2022.

– д.х.н., профессор Лопатин Сергей Игоревич является признанным специалистом в области неорганической высокотемпературной масс-спектрометрии.

1. Lopatin S.I., Shugurov S.M., Tyurnina Z.G., Turnina N.G., Polyakova I.G. Thermodynamic properties of the Na<sub>2</sub>O-BaO-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> glasses and melts. // J. Non-Cryst. Solids. 2023. Vol. 612. N 122353;
2. Kablov E.N., Shilov A.L., Stolyarova V.L., Karachevtsev F.N., Lopatin S.I., Shugurov S.M., Vorozhtcov V.A. Thermodynamics and vaporization of ceramics based on the Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> and Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-HfO<sub>2</sub> systems studied by KEMS // J. Alloys Compd. 2022. Vol. 908. P. 164575;
3. Lopatin S.I., Shugurov S.M., Tyuinina N.G., Tyurnina Z.G., Polyakova I.G., Balabanova E.A. Vaporization and thermodynamic properties of the SrO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

system studied by Knudsen effusion mass spectrometry // *Rapid. Commun. Mass Spectrom.* 2022. Vol. 36. Is. 12. e9298.

– Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет» является профильной организацией, специализирующейся на проведении теоретических и практических исследований термодинамических свойств неорганических веществ, в том числе проведении высокоточных квантово-химических расчетов, определяющих теплофизические свойства различных соединений.

1. Elena F. Belogolova, Sergey A. Shlykov, Alexey V. Eroshin, Evgeniya P. Doronina, Valery F. Sidorkin The hierarchy of ab initio and DFT methods for describing an intramolecular non-covalent Si...N contact in the silicon compounds using electron diffraction geometries // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 23, pp. 2762-2774, 2021;

2. Zhabanov Y.A., Eroshin A.V., Ryzhov, I.V., Kuzmin, I.A., Finogenov D.N., Stuzhin P.A. Molecular Structure, Thermodynamic and Spectral Characteristics of Metal-Free and Nickel Complex of Tetrakis(1,2,5-thiadiazolo)porphyrizine // *Molecules*, vol. 26, no. 10, p. 2945, 2021;

3. V.B. Motalov, L.S. Kudin, A.M. Dunaev, M.F. Butman, K.W. Krämer Molecular and ionic sublimation of the lanthanide triiodides. Thermochemical properties of  $\text{LnI}_3$  and  $\text{Ln}_2\text{I}_6$  molecules and  $\text{LnI}_4^-$  and  $\text{Ln}_2\text{I}_7^-$  ions // *International Journal of Mass Spectrometry*, vol. 465, p. 116606, 2021.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

– Предложена методика расчета термодинамических функций двухатомных молекул на основе методов квантово-химического моделирования. Показано, что предложенный метод позволяет рассчитывать внутренние статистические суммы двухатомных молекул, имеющих два локальных минимума или локальный максимум потенциальной кривой межатомного взаимодействия.

– Методом мультиреференсного конфигурационного взаимодействия (MRCI) рассчитаны потенциальные кривые межатомного взаимодействия основных и возбужденных состояний молекулы ArN и молекулярного иона ArN<sup>+</sup>. Показано влияние спин-орбитального взаимодействия на поведение функций потенциальной энергии в области квазипересечения электронных состояний.

– Используя предложенную методику расчета статистической суммы, были рассчитаны термодинамические функции для двухатомных соединений аргона и их ионов: ArV<sup>+</sup>, ArCo<sup>+</sup>, Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>, Ar<sub>2</sub>, ArO<sup>+</sup>, ArO, ArN<sup>+</sup>, ArN, ArH<sup>+</sup>, ArH. Для каждого из указанных соединений определялась верхняя граница температуры, при которой возбужденные электронные состояния не вносят существенный вклад в термодинамические функции.

– С использованием полученных термодинамических функций проведено равновесное термодинамическое моделирование индуктивно-связанной плазмы. Было получено хорошее согласие рассчитанных равновесных концентраций ионов аргидов в плазме с экспериментальными значениями ионных токов, полученными в масс-спектрометрическом эксперименте.

**Теоретическая значимость исследования** обоснована тем, что результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы для фундаментальных исследований в области физики низкотемпературной плазмы, газовых разрядов. Созданная программа и алгоритм расчета термодинамических функций на основе потенциалов межатомного взаимодействия могут быть использованы для оценки применимости современных методов квантовой химии при расчете термодинамических свойств веществ двухатомных молекул в газовой фазе «из первых принципов». Результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы для фундаментальных исследований в области физики низкотемпературной плазмы, с ними целесообразно ознакомить следующие организации: Московский государственный университет, Санкт-



Петербургский государственный университет, Институт химической физики РАН им. Н.Н. Семенова, Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований, Физический институт РАН им. П.Н. Лебедева, Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН и др.

**Оценка достоверности результатов.** Степень достоверности полученных результатов является высокой, что подтверждается, с одной стороны, публикацией материалов диссертационной работы в рецензируемых изданиях, индексируемых в системах Web of Science, Scopus и РИНЦ, а с другой стороны, непротиворечивостью полученных закономерностей и данных, известных из научной литературы. В работе использованы современные математические методы и методы математического моделирования. Обсуждение опирается на надежно установленные факты и закономерности.

**Личный вклад соискателя.** Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

Апробация результатов исследования проводилась на 23 российских и международных конференциях и симпозиумах. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

Соискатель Мальцев Максим Александрович ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы, согласился с рядом технических замечаний и привел собственную аргументацию.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям пункта 9, установленным Положением о порядке

присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г

На заседании от 04.10.2023г. диссертационный совет принял решение: за решение научной задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний, либо новые научно обоснованные технические, технологические или иные решения и разработки, имеющие существенное значение для развития страны, присудить Мальцеву Максиму Александровичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет 24.1.193.01 (Д 002.110.02) в количестве 24 человек, из них очно: 5 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 4 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, дистанционно: 4 доктора наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 9 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, участвовавших в заседании, из 31 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 23, против 0, недействительных бюллетеней - 1.

Председатель диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)  
академик РАН, д.ф.-м.н., профессор

Ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)  
к.ф.-м.н.

Петров О.Ф.  
Тимофеев А.В.  
04.10.2023г.