

Фамилия, имя, отчество	Квашнин Александр Геннадьевич
Должность, ученая степень, ученое звание	Профессор, д.ф.-м.н.
Корпоративная электронная почта	<a href="mailto:a.kvashnin@misis.ru">a.kvashnin@misis.ru</a>
Область научных интересов	Сверхтвердые материалы, поликристаллы, высокоэнтропийные покрытия и сплавы, катализ, химия поверхности, двумерные материалы, сверхпроводимость, машинное обучения, ИИ, ESG
Трудовая деятельность – год, организация, должность	2010-2015 – м.н.с., ТИСУМ 2011, 2013 – visiting researcher, Rice University, USA 2015 – visiting researcher, University of Namur, Belgium 2015 – м.н.с., Сколковский институт науки и технологий 2016-2022 – с.н.с., Сколковский институт науки и технологий 2021 – профессор кафедры МПид НИТУ МИСИС 2022 – старший преподаватель, Сколковский институт науки и технологий 2023 – профессор, Сколковский институт науки и технологий
Основные результаты деятельности (перечисление достигнутых результатов)	<p>1. Компьютерный поиск стабильных многокомпонентных соединений в системе Hf-Ta-C с последующим селективным синтезом предсказанных соединений с использованием плазмодинамического метода синтеза. Данный подход позволяет синтезировать соединения с предсказанной стехиометрией как в виде порошков, так и в виде функциональных покрытий. Данное исследование открывает путь к синтезу большого количества функциональных покрытий, состоящих из других карбидов, включая высокоэнтропийные карбиды. A.G. Kvashnin*, D.S. Nikitin*, I.I. Shanenkov, I.V. Chepkasov, Yu.A. Kvashnina, A. Nassyrbayev, A.A. Sivkov, Z. Bolatova, A.Ya. Pak, Large-Scale Synthesis and Applications of Hafnium–Tantalum Carbides, Adv. Func. Mat., 2206289 (2022) (DOI: 10.1002/adfm.202206289)</p> <p>2. Поиск и оптимизация процесса синтеза пентаборида вольфрама с использованием безвакуумного электродугового метода синтеза. Такой способ позволяет с высокой точностью контролировать стехиометрию получаемых порошков, а также является менее ресурсозатратным по сравнению с традиционными методами синтеза подобных материалов A.Ya. Pak, D.V. Rybkovskiy, Yu.Z. Vassilyeva, E.N. Kolobova, A.V. Filimonenko, A.G. Kvashnin*, Efficient Synthesis of WB5-x-WB2 Powders with Selectivity for WB5-x Content, Inorg. Chem. 61, 18, 6773-6784 (2022) (DOI: 10.1021/acs.inorgchem.1c03880)</p> <p>3. Синтез и расшифровка кристаллической структуры высшего борида вольфрама, структура которого много раз</p>

исследовалась, однако до конца не было уточнена. Данный материал обладает большим потенциалом применения в добывающей промышленности.

A.G. Kvashnin, D.V. Rybkovskiy, V.P. Filonenko, V.I. Bugakov, I.P. Zibrov, V.V. Brazhkin, A.R. Oganov, A.A. Osiptsov, A.Ya. Zakirov, WB5-x: Synthesis, Properties, and Crystal Structure. New Insights into the Long-Debated Compound, *Adv. Sci.* 2000775 (2020) (DOI: 10.1002/advs.202000775)

4. Разработка нового метода по моделированию наноиндентирования материалов с использованием машинно обучаемых потенциалов межатомного взаимодействия. Данный подход позволяет рассчитывать твердость материалов с учетом их анизотропии, что является крайне важным для скрининга и разработки новых сверхтвердых материалов.

E.V. Podryabinkin, A.G. Kvashnin, M. Asgarpour, I.I. Maslenikov, D.A. Ovsyannikov, P.B. Sorokin, M.Yu Popov, A.V. Shapeev, Nanohardness from First Principles with Active Learning on Atomic Environments, *J. Chem. Theory Comput.*, 18, 2, 1109-1121 (2022) (DOI: 10.1021/acs.jctc.1c00783)

5. Разработка метода, позволяющего исследовать изменение электронных свойств двумерных материалов с изменением давления, который был апробирован на примере силицена, как потенциального кандидата для использования в качестве солнечных элементов и полевых транзисторах.

C. Tantardini, A.G. Kvashnin, C. Gatti, B.I. Yakobson, X. Gonze, Computational Modeling of 2D Materials under High Pressure and Their Chemical Bonding: Silicene as Possible Field-Effect Transistor, *ACS Nano*, 15, 4, 6861-6871 (2021) (DOI: 10.1021/acsnano.0c10609)

6. Синтез предсказанных в п.7 супергидридов тория под давлением, которые являются высокотемпературными сверхпроводниками с критической температурой до 161 К. Измерение зависимости удельного сопротивления от температуры в различных магнитных полях подтверждают ярко выраженную сверхпроводимость этих соединений.

D.V. Semenok, A.G. Kvashnin, A.G. Ivanova, V. Svitlyk, V.Y. Fominski, A.V. Sadakov, O.A. Sobolevskiy, V.M. Pudalov, I.A. Troyan, and A.R. Oganov, Superconductivity at 161 K in Thorium Hydride ThH10: Synthesis and Properties, *Mat. Today*, 33, 36-44 (2020) (DOI: 10.1016/j.mattod.2019.10.005)

7. Предсказание новых высокотемпературных сверхпроводящих материалов на основе гидридов металлов, таких как уран, торий, актиний, лантан и ряд других соединений.

	<p>A.G. Kvashnin, I.A. Kruglov, D.V. Semenov, A.R. Oganov, Iron Superhydrides FeH<sub>5</sub> and FeH<sub>6</sub>: Stability, Electronic Properties, and Superconductivity, <i>J. Phys. Chem. C</i>, 122 (8), pp 4731–4736 (2018) (DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b01270); D.V. Semenov, A.G. Kvashnin, I.A. Kruglov, A.R. Oganov, Actinium Hydrides AcH<sub>10</sub>, AcH<sub>12</sub>, AcH<sub>16</sub> as High-Temperature Conventional Superconductors, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> 8, 1920-1926 (2018) (DOI: 10.1021/acs.jpcclett.8b00615); A.I. Kruglov, A.G. Kvashnin, A.F. Goncharov, A.R. Oganov, S.S. Lobanov, N. Holtgrewe, S. Jiang, V.B. Prakapenka, E. Greenberg and A.V. Yanilkin, Uranium polyhydrides at moderate pressures: prediction, synthesis, and expected superconductivity, <i>Sci. Adv.</i> 4, 10, eaat9776 (2018) (DOI: 10.1126/sciadv.aat9776); I.A. Kruglov, D.V. Semenov, H. Song, R. Szcześniak, I.A. Wrona, R. Akashi, M.M. Davari Esfahani, D. Duan, T. Cui, A.G. Kvashnin, and A.R. Oganov, Superconductivity of LaH<sub>10</sub> and LaH<sub>16</sub> polyhydrides, <i>Phys. Rev. B</i>, 101, 024508 (2020) (DOI: 10.1103/PhysRevB.101.024508)</p>
<p>Значимые исследовательские/преподавательские проекты, гранты (тема, заказчик, год, полученные результаты)</p>	<p>Грант РФФИ № 19-03-00100, Исследование сверхпроводимости с электрон-фононным механизмом спаривания в гидридах, боридах и карбидах металлов, стабилизированных давлением, руководитель, 2019. Предсказан и синтезирован ряд высокотемпературных сверхпроводников под давлением.</p> <p>Грант РФФИ № 17-73-20038, Компьютерный дизайн новых материалов с оптимальными показателями твердости и трещиностойкости, руководитель, 2017. Предсказан и синтезирован новый сверхтвердый материал для добывающей промышленности, а также получена карта сверхтвердых материалов на основе боридов и карбидов переходных металлов.</p>
<p>Значимые публикации (список, не более 10)</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. A.D. Radina, V.S. Baidyshev, I.V. Chepkasov, N.A. Matsokin, T. Altalhi, B.I. Yakobson, A.G. Kvashnin, Theoretical study of adsorption properties and CO oxidation reaction on surfaces of higher tungsten boride, <i>Sci. Rep.</i>, 14, 12788 (2024) (DOI: 10.1038/s41598-024-63676-7), Q1.</li> <li>2. A.Yu. Kurenkova, A.D. Radina, V.S. Baidyshev, P.V. Povalyaev, E.E. Aidakov, E.Yu. Gerasimov, D.D. Mishchenko, A.V. Zhurenok, A.Ya. Pak, E.A. Kozlova, A.G. Kvashnin, Photocatalytic H<sub>2</sub> generation and CO<sub>2</sub> reduction by WB<sub>5</sub>-x cocatalyst of TiO<sub>2</sub> catalyst, <i>Appl. Surf. Sci.</i>, 661, 160095 (2024) (DOI: 10.1016/j.apsusc.2024.160095), Q1</li> <li>3. F.N. Jalolov, E.V. Podryabinkin, A.R. Oganov, A.V. Shapeev, A.G. Kvashnin, Mechanical Properties of Single and Polycrystalline Solids from Machine Learning, <i>Adv. Theory and Sim.</i>, ASAP (2024) (DOI: 10.1002/adts.202301171), Q1</li> <li>4. I.V. Chepkasov, A.D. Radina, A.G. Kvashnin, Structure-driven tuning of catalytic properties of core-shell nanostructures, <i>Nanoscale</i>, 16, 5870-5892 (2024) (DOI: 10.1039/D3NR06194A), Q1</li> <li>5. I.A. Troyan, D.V. Semenov, A.G. Ivanova, A.V. Sadakov, D. Zhou, A.G. Kvashnin, I.A. Kruglov, O.A. Sobolevskiy, M.V. Lyubutina, T. Helm, S.W. Tozer, M. Bykov, A.F. Goncharov, V.M. Pudalov, I.S.</li> </ol>

	<p>Lyubutin, Non-Fermi-Liquid Behavior of Superconducting SnH<sub>4</sub>, <i>Adv. Sci.</i>, 2303622 (2023) (DOI: 10.1002/advs.202303622), Q1.</p> <p>6. C. Tantardini, A.G. Kvashnin, M. Azizi, X. Gonze, C. Gatti, T. Altalhi, B.I. Yakobson, Electronic Properties of Functionalized Diamanes for Field-Emission Displays, <i>ACS Appl. Mater. Interfaces</i>, 15, 12, 16317–16326 (2023) (DOI: 10.1021/acsami.3c01536), Q1</p> <p>7. A.Ya. Pak*, V. Sotskov*, A.A. Gumovskaya, Yu.Z. Vassilyeva, Z.S. Bolatova, Yu.A. Kvashnina, G.Ya. Mamontov, A.V. Shapeev, A.G. Kvashnin, Machine learning-Driven Synthesis of TiZrNbHfTaC<sub>5</sub> High-Entropy Carbide, <i>npj Comp. Mat.</i>, 9, 7 (2023) (DOI: 10.1038/s41524-022-00955-9), Q1</p> <p>8. I.V. Chepkasov, V.S. Baidyshev, A.A. Golubnichiy, I.S. Zamulin, A.G. Kvashnin, S.M. Kozlov, Cu–Au nanoparticles produced by the aggregation of gas-phase metal atoms for CO oxidation, <i>Aggregate</i>, e273 (2022) (DOI: 10.1002/agt2.273), Q1</p> <p>9. A.G. Kvashnin*, D.S. Nikitin*, I.I. Shanenkov, I.V. Chepkasov, Yu.A. Kvashnina, A. Nassyrbayev, A.A. Sivkov, Z. Bolatova, A.Ya. Pak, Large-Scale Synthesis and Applications of Hafnium–Tantalum Carbides, <i>Adv. Func. Mat.</i>, 2206289 (2022) (DOI: 10.1002/adfm.202206289), Q1, NI</p> <p>10. D.V. Semenok, W. Chen, X. Huang*, D. Zhou, I.A. Kruglov, A.B. Mazitov, M. Galasso, C. Tantardini, X. Gonze, A.G. Kvashnin*, A.R. Oganov, T. Cui*, Sr-Doped Molecular Hydrogen: Synthesis and Properties of SrH<sub>2</sub>, <i>Adv. Mat.</i> 2200924 (2022) (DOI: 10.1002/adma.202200924), Q1, NI</p>
<p>Индекс Хирша по Scopus Количество статей по Scopus SPIN РИНЦ ORCID ResearcherID Scopus AuthorID Google Scholar:</p>	<p>29 93 2918-9657 <a href="http://orcid.org/0000-0002-0718-6691">http://orcid.org/0000-0002-0718-6691</a> A-1825-2014 6603118309 <a href="https://scholar.google.ru/citations?user=6x6tbTYAAAAJ&amp;hl=en">https://scholar.google.ru/citations?user=6x6tbTYAAAAJ&amp;hl=en</a></p>
<p>Значимые патенты (список, не более 10)</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. RU 2698827, В.В. Бражкин, В.И. Бугаков, И.П. Зибров, В.П. Филоненко, А.Р. Оганов, А.Г. Квашнин, А.Я. Закиров, А.А. Осипцов, Способ получения сверхтвердого материала и сверхтвердый материал на основе пентаборида вольфрама, 2019</li> <li>2. RU 2753339, В.В. Бражкин, В.И. Бугаков, И.П. Зибров, В.П. Филоненко, А.Р. Оганов, А.Г. Квашнин, А.Я. Закиров, Материалы на основе тетраборида хрома и способы их получения, 2020</li> <li>3. RU 2757450, А.Г. Квашнин, И.С. Любутин, И.А. Троян, Д.В. Семенов, А.Р. Оганов, Высокотемпературный сверхпроводящий гидрид и способ его получения, 2021</li> <li>4. RU 2796134, А.Я. Пак, А.А. Гумовская, П.В. Поваляев, А.Г. Квашнин, Способ получения порошка на основе однофазного высокоэнтропийного карбида состава Ti-Zr-Nb-Hf-Ta-C с кубической решеткой, 2023</li> </ol>
<p>Научное руководство/Преподавание</p>	<p>Руководство студентами бакалавриата Быстров Д.А. (НИТУ МИСИС, 2021-2023), Пигулевская Т.С. (НИТУ МИСИС, 2021-2023), Янаев И.Т. (НИТУ МИСИС,</p>

2021-2023), Федоров Д. (НИТУ МИСИС, 2023-н.в.), Козлан Т. (НИТУ МИСИС, 2023-н.в.), Пушкова О.Э. (НИТУ МИСИС, 2023-н.в.), Фаткулина Э.Э. (НИТУ МИСИС, 2023-н.в.)

Руководство студентами магистратуры

Джалолов Ф.Н. (Сколтех, 2020-2022), Радина А.Д. (НИТУ МИСИС, 2021-2023), Бакр Л.А.М. (НИТУ МИСИС, 2021-2023), Мацокин Н.А. (МГУ, 2021-2023)

Руководство аспирантами

Семенов Д.В. (Сколтех, 2018-2022), Джалолов Ф.Н. (Сколтех, 2022-н.в.), Радина А.Д. (Сколтех, 2023-н.в.)

2020 - н.в. Собственный курс лекций и семинарских занятий

"Введение в квантовую теорию твердого тела" в НИТУ МИСИС

2022 - Собственный курс лекций "Программирование химических задач" в Университете ИТМО

2022 - н.в. Участвую в чтении курса "Computational Chemistry and Materials Modeling" в Сколтехе

2023 - н.в. Участвую в чтении курса "Advanced Materials Modeling" в Сколтехе

2023 - н.в. Собственный курс лекций и практических занятий

"Computational Methods in Atomistic Simulations" в Сколтехе

2024 - н.в. Собственный курс лекций и практических занятий "Thermodynamics of Materials" в Сколтехе