

[RU](#)

[ENG](#)



Русалев Юрий Владимирович

Email: rusalev@sfedu.ru

Дата рождения: 25.01.1996 г. , Ростов-на-Дону, Россия

Должность: Аспирант

Образование и ученые степени

2019 - Степень магистра с отличием по физике, Южный федеральный университет, Россия.

2017- Степень бакалавра с отличием по физике, Южный федеральный университет, Россия.

Область научных интересов:

Разработка потенциалов ReaxFF для молекулярно-динамического моделирования катализаторов. Расчет механических свойств тонких пленок нитрида металла с помощью молекулярно-динамического моделирования.

Методы:

- Вычисления DFT (VASP, AMS).
- Разработка потенциала ReaxFF.
- Молекулярная динамика и Монте-Карло (LAMMPS).
- Машинное обучение, статистика и навыки программирования (Python & R, Java, SQL).

Опыт работы на источниках синхротронного излучения:

- Швейцария, синхротрон SLS, линия луча Super-XAS, эксперимент № 20170695.
- Франция, синхротрон ESRF, линия луча Super-XAS BM26A, эксперимент № CH 4871.
- Швейцария, синхротрон SLS, линия луча Super-XAS, эксперимент № 20151321.
- Швейцария, Институт Пауля Шерера, 27.08-28.09 2018, Стажировка
- Россия, Курчатовский институт, июнь 2021 г., эксперимент №1430.
- Россия, Курчатовский институт, февраль 2020 г., эксперимент №1424.

Награды и звания:

- Стипендия Президента Российской Федерации по приоритетным направлениям в 2020 и 2021 годах.
- Повышенная государственная академическая стипендия за выдающиеся достижения в науке 2016-2019. Третья премия за лучшую презентацию на IWSN 2018, Ростов-на-Дону, Россия, 2018.
- Вторая премия за лучшую презентацию на Неделе науки в ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия, 2020.
- Победитель благотворительного фонда Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия, 2018.
- Обладатель стипендии Банка "Центр-инвест", Ростов-на-Дону, Россия, 2019.

Научные публикации в реферируемых журналах:

33 публикации (Scopus)

Scopus ID: 57195916464

Researcher ID: U-5077-2019

10 наиболее цитируемых публикаций:

1. Rusalev Y. V., Motseyko A.V., Guda A.A., Guda S.A., Soldatov A.V., TerOganessian N.V. "Development of a ReaxFF potential for Au-Pd" *Journal of Physics Condensed Matter* 2023 35 (6) 065901 DOI:10.1088/1361-648X/aca250 Last edit: September 2023
2. Y.V. Rusalev, A.A. Guda, D.M. Pashkov, O.A. Belyak, V.I. Kolesnikov, A.V. Soldatov "Modeling of the Surface Mechanical Properties by Molecular Dynamics with ReaxFF Potential" *The Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* 2021 15 S92–S97 DOI: 10.1134/S1027451022020185
3. O.V. Safonova, A.Guda, Yu.Rusalev, R.Kopelent, G. Smolentsev, W.Y. Teoh, J.A. van Bokhoven, and M. Nachtegaal "Elucidating the Oxygen Activation Mechanism on Ceria-Supported Copper-Oxo Species Using Time-Resolved Xray Absorption Spectroscopy" *ACS Catalysis* 2020 10 (8) 4692–4701 DOI: 10.1021/acscatal.0c00551
4. Guda A. A., Chegerev M., Starikov A. G., Vlasenko V. G., Zolotukhin A. A., Bubnov M. P., Cherkasov V. K., Shapovalov V. V., Rusalev Y.V., Tereshchenko A. A., Trigub A. L., Chernyshev A. V., Soldatov A.V. "Valence tautomeric transition of bis(o-dioxolene) cobalt complex in solid state and solution" *JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER* 2021 33 (21) 215405 DOI: 10.1088/1361-648X/abe650

Патенты:

- A.A. Skorynina, Y.V. Rusalev, A.A. Guda, A.V. Soldatov, A.L. Bugaev, Cell for spectral diagnostics. RF Patent 190702, published 09.07.2019. · Y.V. Rusalev, A.A. Guda, Software: Redox kinetics. RF Patent 2018663598, published 01.11.2018.
- A.A. Tereshchenko, A.A. Guda, Y.V. Rusalev, A.L. Bugaev, A.V. Soldatov, Method for determining the oxygen storage capacity in oxide materials. RF Patent 2708899, published 12.12.2019
- V.V. Shapovalov, Y.V. Rusalev, A.A. Guda, A.V. Soldatov, Cell for spectral investigation of materials. RF Patent 2650825, published 17.09.2019

[RU](#)

[ENG](#)



Yuriy V. Rusalev

Date of birth: 25 January 1996 Location: Russia, Rostov-on-Don

Languages: Russian, English

E-mail: rusalev@sfedu.ru

Current position: PhD student at the Smart Materials Research Institute, Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia, nano.sfedu.ru

Education: Bachelor's degree (2017) and Master's degree (2019) with excellence in Physics at Southern Federal University, Russia

Research interests: Development of ReaxFF potentials for molecular dynamics simulations of catalysts. Calculation of mechanical properties of thin metal-nitride films via molecular dynamics

simulations.

Methods:

- DFT calculations (VASP, AMS)
- ReaxFF potentials development
- Molecular dynamics and Monte-Carlo (LAMMPS)
- Machine Learning, statistics, and programming skills (Python & R, Java, SQL)

Publication activity:

33 publications according to Scopus database Scopus ID: 57195916464

Researcher ID: U-5077-2019

Selected papers:

1. Rusalev Y. V., Motseyko A.V., Guda A.A., Guda S.A., Soldatov A.V., Ter-Oganessian N.V. "Development of a ReaxFF potential for Au-Pd" Journal of Physics Condensed Matter 2023 35 (6) 065901 DOI:10.1088/1361-648X/aca250 Last edit: September 2023
2. Y.V. Rusalev, A.A. Guda, D.M. Pashkov, O.A. Belyak, V.I. Kolesnikov, A.V. Soldatov "Modeling of the Surface Mechanical Properties by Molecular Dynamics with

- ReaxFF Potential" The Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques 2021 15 S92–S97 DOI: 10.1134/S1027451022020185
3. O.V. Safonova, A.Guda, Yu.Rusalev, R.Kopelent, G. Smolentsev, W.Y. Teoh, J.A. van Bokhoven, and M. Nachtegaal "Elucidating the Oxygen Activation Mechanism on Ceria-Supported Copper-Oxo Species Using Time-Resolved X- ray Absorption Spectroscopy" ACS Catalysis 2020 10 (8) 4692–4701 DOI: 10.1021/acscatal.0c00551
 4. Guda A. A., Chegerev M., Starikov A. G., Vlasenko V. G., Zolotukhin A. A., Bubnov M. P., Cherkasov V. K., Shapovalov V. V., Rusalev Y.V., Tereshchenko A. A., Trigub A. L., Chernyshev A. V., Soldatov A.V. "Valence tautomeric transition of bis(o-dioxolene) cobalt complex in solid state and solution" JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER 2021 33 (21) 215405 DOI: 10.1088/1361-648X/abe650

Synchrotron experience and internships:

- Switzerland, synchrotron SLS, Super-XAS beamline, experiment # 20170695
- France, synchrotron ESRF, Super-XAS beamline BM26A, experiment # CH-4871
- Switzerland, synchrotron SLS, Super-XAS beamline, experiment # 20151321
- Switzerland, Paul Scherrer Institute, 27.08-28.09 2018, Internship
- Russia, Kurchatov Institute, June 2021, experiment #1430
- Russia, Kurchatov Institute, February 2020, experiment #142

Patents:

A.A. Skorynina, Y.V. Rusalev, A.A. Guda, A.V. Soldatov, A.L. Bugaev, Cell for spectral diagnostics. RF Patent 190702, published 09.07.2019.

Y.V. Rusalev, A.A. Guda, Software: Redox kinetics. RF Patent 2018663598, published 01.11.2018.

A.A. Tereshchenko, A.A. Guda, Y.V. Rusalev, A.L. Bugaev, A.V. Soldatov, Method for determining the oxygen storage capacity in oxide materials. RF Patent 2708899, published 12.12.2019

V.V. Shapovalov, Y.V. Rusalev, A.A. Guda, A.V. Soldatov, Cell for spectral investigation of materials. RF Patent 2650825, published 17.09.2018

Awards:

Scholarship in priority areas of the President of the Russian Federation in 2020 and 2021.
Last edit: September 2023

Enhanced state academic scholarship award for excellence in science 2016- 2019.

The third prize for the best presentation on IWSN 2018, Rostov-on-Don, Russia, 2018.

The second prize for the best presentation on Scientific week at SFedU, Rostov-on-Don, Russia, 2020.

The winner of Endowment Fund of Southern Federal University, Rostov-on- Don, Russia, 2018.

The winner of scholarship of Center-invest Bank, Rostov-on-Don, Russia, 2019.