

ОТЗЫВ

научного руководителя, проф. В.М. Самсонова о работе А.А. Романова над кандидатской диссертацией на тему “Термоиндуцированные структурные превращения в наночастицах Pt, Pd и Pt-Pd: молекулярно-динамическое моделирование”, представленной к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Данная диссертационная работа является результатом исследований, проводившимся соискателем в течение шести лет, включая четыре года обучения в аспирантуре. При этом подготовка диссертации и ее защита никогда не выступали в качестве его основной и единственной цели: полученные научные результаты тщательно проверялись, сравнивались, когда это было возможно, с результатами других авторов. Если какие-либо результаты вызывали сомнения у него самого или у меня, то компьютерные эксперименты выполнялись заново, хотя это очень трудоемкие расчеты, занимающие много времени, не говоря уже об обработке результатов. За время работы над диссертацией А.А. Романов освоил как метод молекулярно-динамического моделирования с использованием параллельных вычислений, так и метод термодинамического моделирования сплавов, основывающийся на решении уравнения Батлера. И хотя исследования по тематике диссертационной работы А.А. Романова проводились совместно с нашими коллегами, соискатель проявил высокую степень самостоятельности при осуществлении атомистического и термодинамического моделирования, обработке полученных результатов и их сравнении с имеющимися в литературе данными.

В ходе исследований А.А. Романов обнаружил, что некоторые хорошо известные и часто применяющиеся параметризации потенциалов для Pt и Pd неадекватно предсказывают для Pd более высокую температуру плавления, чем для Pt. Это ставит под сомнение и все прочие результаты, полученные с использованием этих потенциалов, найденных с использованием метода погруженного атома. Учитывая это, он предложил заново рассчитать функции погружения для этих металлов. За такую задачу мало кто берется как среди российских, так и среди зарубежных исследователей, занимающихся атомистическим моделированием. Обычно используют готовые потенциалы, предложенные еще в 80-х – начале 2000-х гг., и остается не ясным, являются ли некоторые артефакты моделирования следствием применения метода погруженного атома или же выбора недостаточно надежных параметров и функций погружения. Соискатель

успешно справился с этой вспомогательной, но очень важной для последующих исследователей задачей: были рассчитаны функции погружения для Pt и Pd. В течение примерно полугода мы проверяли адекватность полученных результатов, обсуждали проблему выбора наборов волновых функций для Pt и Pd, обращаясь за консультациями к специалистам, научная деятельность которых связана с квантово-механическими расчетами. Только после тщательного анализа подходов к параметризации потенциалов, применяющихся в рамках метода погруженного атома, были окончательно найдены функции погружения для Pt и Pd, которые затем были апробированы на свойствах объемных фаз и использованы для атомистического моделирования однокомпонентных и бинарных наночастиц.

Таким образом, диссертационная работа А.А. Романова является результатом очень большого объема исследований, поисков, сомнений и озарений. Для повышения достоверности результатов атомистического моделирования были использованы два разных типа силовых полей: потенциал сильной связи и метод погруженного атома, а также две независимо разработанные компьютерные программы: наша и известная программа LAMMPS, позволяющая осуществлять высокопроизводительные параллельные вычисления. Кроме того, сравнивались результаты, полученные с использованием четырех различных МПА параметризаций. Как по собственной, так и по моей инициативе А.А. Романов находил и анализировал работы, прямо или косвенно связанные с нашей тематикой.

Можно заключить, что за период нашего сотрудничества А.А. Романов сформировался как зрелый и талантливый исследователь, подготовивший интересную кандидатскую диссертацию, характеризующуюся новизной и практической значимостью полученных результатов. Считаю, что он в полной мере заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Научный руководитель:
 профессор кафедры общей физики
 Тверского государственного университета,
 доктор физико-математических наук, профессор,
 Заслуженный работник высшей школы

В.М. Самсонов
 29.09.2022