

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Романова Александра Андреевича “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.

Наноразмерные металлические системы представляют значительный интерес, особенно в качестве эффективных катализаторов различных химических процессов, если речь идет о благородных металлах и их сплавах. Над повышением активности таких катализаторов работают многие исследовательские группы, пытаясь модифицировать как состав, так и структуру наночастиц. Экспериментальные исследования ультрадисперсных металлических частиц весьма затруднены, и их результаты не всегда позволяют сделать полные выводы о структуре и свойствах наносистем даже при использовании самого современного комплекса методов, сочетающих возможности рентгеновской дифракции, рентгеновской спектроскопии, электронной микроскопии высокого разрешения. Поэтому важны теоретические модели и компьютерные эксперименты, предоставляющие весомые дополнительные аргументы относительно возможного строения моно- и биметаллических частиц и их свойств. В рецензируемой работе такие исследования были выполнены с использованием методов атомистического и термодинамического моделирования, творчески примененных и модифицированных соискателем с учетом имеющихся в литературных источниках противоречий и нестыковок с экспериментальными данными. Так диссертанту пришлось пересмотреть и заново рассчитать функции погружения Pt и Pd ввиду неадекватности некоторых результатов, получаемых при ранее предложенной параметризации потенциалов для этих металлов. Это обеспечило корректность последующих вычислений, большее согласие с известными характеристиками изучаемых металлов и их сплавов (в частности, качественное соответствие температур плавления Pt и Pd, соответствие плотностей в твердом и жидком состояниях и т.д.) и повысило надежность выводов, сделанных диссертантом по результатам модельных экспериментов. К наиболее интересным результатам можно отнести вывод, касающийся сегрегации атомов Pd к поверхности наночастиц в бинарных сплавах Pt-Pd, а также заключение о большей стабильности наноструктур «ядро-оболочка» Pd@Pt с оболочкой из атомов Pd по сравнению с оболочкой из атомов Pt. Известны, конечно, экспериментальные работы, в которых демонстрируются подобные наноструктуры обоих типов, но оценки их стабильности безусловно также важны и с теоретической, и с практической точек зрения. Другие

существенные результаты - изучены размерные зависимости температуры плавления Pt и Pd; предложен и реализован оригинальный алгоритм нахождения энтальпий плавления кристаллизации.

Некоторые вопросы, появившиеся при чтении автореферата:

1. Правильно ли для аморфизованной оболочки наночастиц использовать термин «жидкоподобное состояние» (стр.13)? Отсутствие кристаллического порядка –не единственный признак, отличающий аморфное твердое тело от жидкой фазы.
2. По какому критерию атомы относились к имеющим и не имеющим кристаллическое окружение?

Сделанные замечания имеют исключительно уточняющий характер и не снижают высокой оценки данной работы.

В целом автореферат дает ясное представление о характере диссертационной работы и высоком качестве полученных результатов. По своей актуальности, научной значимости и объему выполненных исследований диссертационная работа удовлетворяет требованиям ВАК, а её автор Романов Александр Андреевич заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

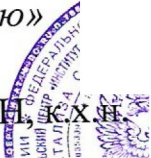
Главный научный сотрудник отдела исследования катализаторов  
Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
«Федеральный исследовательский центр «Институт катализа  
им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»  
(ИК СО РАН)

доктор физ.-мат. наук, профессор  
02.00.04 Физическая химия


С.В.Цыбуля

630090 г. Новосибирск, пр. Лаврентьева 5  
ИК СО РАН, тел.: 8(383)326-9547, e-mail: [tzybulya@catalysis.ru](mailto:tzybulya@catalysis.ru).

«Подпись Цыбули С.В. заверяю»

Ученый секретарь ИК СО РАН, 

М.О.Казаков

 *С.В.Цыбуля 02.02.22*