

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

«ТЕРМОИНДУЦИРОВАННЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В НАНОЧАСТИЦАХ Pt, Pd И Pt-Pd: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ»

представленную **Романовым Александром Андреевичем**

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 - Физика конденсированного состояния.

Перспективным новым аппаратом познания сути структурных превращений в наночастицах является молекулярно-динамическое моделирование, которое позволяет предсказать и изучить характеристики процесса, заглянуть в те масштабы и времена, которые тяжело доступны для экспериментального исследования. Одна из сложностей этого подхода заключается в разработке потенциала взаимодействия для Pt-Pd системы.

Для реализации этого метода, автор диссертации не пошел по простому пути использования потенциала взаимодействия из литературных источников, а разработал свой ЕАМ потенциал для системы Pt-Pd, затем проведя его верификацию путем расчета основных термодинамических и структурных характеристик и их сопоставления со справочными экспериментальными значениями. Используя разработанный потенциал, были исследованы зависимости температур плавления и кристаллизации, энтальпии плавления и кристаллизации от размера частиц. Было проведено МД моделирование поверхностной сегрегации в наночастицах Pt-Pd.

В дополнении к МД моделированию были проведены термодинамические расчеты поверхностной сегрегации в наночастицах. Проведено сравнение результатов МД моделирования и термодинамических расчетов.

Автор установили, что температуры плавления и кристаллизации, как и энтальпии частиц Pt и Pd, содержащие до 100000 атомов, уменьшается с ростом их обратного радиуса по линейному закону. Предсказана

поверхностная сегрегация Pd в Pt-Pd частицах, при этом она уменьшается с ростом температуры. Было получено, что наночастицы Pd-Pt с оболочкой из палладия будут более стабильными, чем из платины, что подтверждает гипотезу о более высокой стабильности наночастиц с оболочкой из спонтанно сегрегирующему к поверхности атомов, при исходном однородным распределением компонентов.

Теоретические предсказания свойств наночастиц Pt-Pd могут подсказать исследователям новые области их применения, не рассматриваемые ранее ввиду отсутствия экспериментальных данных для столь малых размеров.

Принимая во внимание указанное выше, считаю, что представленная диссертация представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, выполненную на актуальную тему. Диссертация удовлетворяет всем требованиям Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842, а ее автор Александр Андреевич Романов заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Даю свое согласие на обработку персональных данных, указанных в отзыве.

Директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова Российской академии наук» (ИСМАН), доктор технических наук (05.16.06 – порошковая металлургия и композиционные материалы) профессор, член-корреспондент РАН

Михаил Иванович
Алымов
28.11.2022

Телефон 8 (49652) 46376. E-mail: director@ism.ac.ru.

142432, Московская обл., г. Черноголовка, ул. Академика Осипьяна, д. 8.

Подпись М.И. Алымова заверяю
Ученый секретарь ИСМАН
к.т.н.

Е.В. Петров