

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Романова Александра Андреевича “ТЕРМОИНДУЦИРОВАННЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В НАНОЧАСТИЦАХ Pt, Pd И Pt-Pd: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ”, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Работа Романова А.А. посвящена изучению закономерностей и механизмов структурных превращений в однокомпонентных наночастицах Pt и Pd, а также в бинарных наночастицах Pt-Pd при помощи атомистического молекулярно-динамического моделирования. Применительно к однокомпонентным наночастицам это подразумевает изучение процессов плавления и затвердевания наночастиц, а применительно к бинарным наночастицам Pt-Pd – исследование процессов сегрегации их компонентов. Молекулярно-динамическое моделирование бинарных наночастиц дополнено термодинамическим моделированием на основе уравнения Батлера. Поскольку Pt и Pd характеризуются достаточно высокими температурами плавления, экспериментальные данные по их размерным зависимостям в литературе практически отсутствуют, что делает особо значимыми результаты молекулярного моделирования. Представленная работа также может представлять интерес с точки зрения разработки нанокатализаторов на основе Pt и Pd.

Зачастую в работах по молекулярному моделированию металлических систем используются готовые параметризации, предложенные другими авторами, и не проводятся их верификация и уточнение. Этого недостатка, безусловно, лишена работа Романова А.А. Для проведения молекулярного моделирования в работе были использованы два различных типа силовых полей и две независимо разработанных компьютерных программы, одна из которых была создана в процессе работы над диссертацией, а другая представляет собой широко известный программный пакет LAMMPS. В автореферате отмечается, что результаты молекулярного и термодинамического моделирования хорошо согласуются между собой. Результаты молекулярного моделирования, свидетельствующие о сегрегации атомов Pd к поверхности бинарных наночастиц Pt-Pd, согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Интересным результатом является обнаруженный в работе эффект уменьшения поверхностной сегрегации Pd за счет его истощения в центральной части частицы. Все вышесказанное свидетельствует об актуальности, достоверности, а также о теоретической и практической значимости диссертационной работы Романова А.А.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложения. Работа содержит 171 страницу основного текста, 57 рисунков, 9 таблиц и одно приложение, список литературы состоит из 195 наименований. Основное содержание диссертации представлено в 7 работах, включая 5 статей, опубликованных в журналах из перечня ВАК, также индексируемых в базах данных WoS и Scopus. Основные результаты работы докладывались на трех всероссийских и международных конференциях.

В целом, судя по автореферату и выносимым на защиту публикациям, диссертационная работа выполнена на высоком профессиональном уровне и полностью соответствует специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния. Считаем, что эта работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Заведующий кафедрой статистической физики

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования “Санкт-Петербургский государственный университет”, доктор физико-математических наук (специальность 01.04.14 – теплофизика и молекулярная физика), профессор, член-корреспондент РАН

Щёкин Александр Кимович

02.12.2022

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Санкт-Петербургский государственный университет”

Адрес: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб. д.7-9, Тел.: +7 (812) 328-20-00, адрес
электронной почты: a.shchekin@spbu.ru

Даю согласие на обработку персональных данных, включение их в аттестационное дело
соискателя, вывешивание отзыва на сайте Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный
университет».

Доцент кафедры статистической физики

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего
образования “Санкт-Петербургский государственный университет”, кандидат физико-
математических наук (специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния),

Волков Николай Александрович

02.12.2022

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Санкт-Петербургский государственный университет”

Адрес: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб. д.7-9, Тел.: +7 (812) 328-20-00, адрес
электронной почты: nikolay.volkov@spbu.ru

Даю согласие на обработку персональных данных, включение их в аттестационное дело
соискателя, вывешивание отзыва на сайте Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный
университет».

Подписи Щёкина А.К. и Волкова Н.А. заверяю

Должность _____ подпись _____

И.о. начальника
отдела кадров № 3
И.И. Константинова

02.12.2022

Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<http://spbu.ru/science/experiments>