

## **ОТЗЫВ**

на автореферат диссертации «Термоиндуцированные структурные превращения в наночастицах Pt, Pd и Pt-Pd: молекулярно-динамическое моделирование», представленной Романовым А.А. в докторский совет 24.2.411.03 при ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет» на соискание им ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Диссертация Романова Александра Андреевича посвящена актуальной проблеме установления природы, механизмов и закономерностей структурных превращений в однокомпонентных и бинарных металлических наночастицах Pt, Pd с использованием процедур молекулярно-динамического (МД) моделирования, дополненного, в случае бинарных систем, применением и термодинамического моделирования, основанного на решении уравнения Батлера. Это и явилось целью представленной докторской работы. Для ее достижения автором необходимо было решить ряд задач. Это позволило ему сформулировать основные результаты и выводы по работе, представленные, в том числе, в высокорейтинговых изданиях из БД WoS, Scopus и апробированные в виде докладов на Международных и Всероссийских конференциях.

Достоверность и обоснованность результатов подтверждаются применением для МД-моделирования двух различных силовых полей и двух независимо разработанных компьютерных программ; апробацией на свойствах объемных фаз Pt и Pd рассчитанных автором функций погружения; согласием линейной зависимости  $T_m$  от обратного радиуса с экспериментальными данными и результатами атомистического моделирования наночастиц; согласием МД-результатов, свидетельствующих о сегрегации атомов Pd к поверхности бинарных наночастиц, с имеющимися экспериментальными данными и др.

Автореферат Романова А.А. дает полное представление о защищаемой им диссертации. Работа, несомненно, актуальна, своевременна, востребована как в научном плане, так и в практическом из-за широкого применения наночастиц платины и палладия, а также наносплавов Pt-Pd в катализе и других областях нанотехнологий.

Диссертационная работа представляет собой законченное научное исследование, удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание авторами ученой степени кандидата физико-математических наук, а Романов Александр Андреевич заслуживает присуждения ему искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

*Согласны на обработку персональных данных:*

Доктор физико-математических наук  
(1,3,8 – физика конденсированного состояния)  
Научно-исследовательский институт физики  
ФГАО ВО «Южный федеральный  
университет»,  
директор НИИ физики

Вербенко Илья Александрович

10.11.2022

Доктор физико-математических наук  
(1,3,8 – физика конденсированного состояния)  
Научно-исследовательский институт физики  
ФГАО ВО «Южный федеральный  
университет»,  
зав. отделом интеллектуальных материалов и  
нанотехнологий

Резниченко Лариса Андреевна

10.11.2022

Адрес: 34409, г.Ростов-на-Дону, Россия, пр-т Стачки 194.  
Тел: 8(908)-519-58-38  
E-mail: [ilich001@yandex.ru](mailto:ilich001@yandex.ru)