

В диссертационный совет
24.2.411.03 при ФГБОУ ВО
«Тверской государственной
университет»

Отзыв на автореферат диссертации Романова А.А. «Термоиндуцированные структурные превращения в наночастицах Pt, Pd и Pt-Pd: молекулярно-динамическое моделирование», представленный на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Диссертация Романова Александра Андреевича посвящена актуальной теме – моделированию свойств наночастиц платины, палладия, а также их сплавов. Важность изучения таких систем обусловлена недостатком экспериментальных данных, в первую очередь, достоверных размерных зависимостей температур плавления наночастиц.

В работе Романова А.А. проведена параметризация потенциалов межатомного взаимодействия для платины и палладия в рамках модели погруженного атома, полученные функции использованы для расчета свойств объемных фаз Pd и Pt. Продемонстрировано хорошее согласие рассчитанных констант упругости, плотности, температур и энтальпий плавления с имеющимися экспериментальными данными. Это позволило использовать полученные потенциалы взаимодействия для изучения размерных зависимостей температур плавления T_m и затвердевания T_f , а также энтальпий плавления ΔH_m наночастиц Pt и Pd. Установлено, что температуры и энтальпии плавления имеют линейную зависимость от обратного радиуса наночастиц. С помощью молекулярно-динамического моделирования показано, что в бинарных наночастицах Pt-Pd происходит сегрегация атомов Pd на поверхности, что согласуется с результатами термодинамического моделирования, а также подтверждает гипотезу о более высокой стабильности наноструктур типа ядро-оболочка с оболочкой из атомов Pd.

Текст автореферата написан аккуратно и четко, практически не содержит опечаток. В качестве незначительного замечания можно указать использование автором на стр.9 автореферата неудачного выражения «платиновые металлы» по отношению к Pd и Pt. Автореферат отражает структуру и содержание работы, содержит необходимые сведения об актуальности, новизне, основных положениях, выносимых на защиту и выводы. В целом, диссертационная работа Романова А.А. представляет собой законченное научное исследование и отвечает требованиям, предъявляемым к работам, представляемым на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук. Романов А.А. заслуживает присуждения ему искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 - Физика конденсированного состояния.

Согласен на обработку персональных данных

Кандидат физико-математических наук
(02.00.04 – физическая химия)
ФГБОУ ВО «Московский государственный
университет имени М.В.Ломоносова»,
химический факультет,
ведущий научный сотрудник

Боченков Владимир Евгеньевич
05.12.2022

Адрес:
119991, г. Москва, Ленинские горы, д.1 стр.3
Тел. 8(495) 939-5442
E-mail: boch@kinet.chem.msu.ru