

## ОТЗЫВ

об автореферате диссертации А.А.Романова

«Термоиндуцированные структурные превращения

в наночастицах Pt, Pd и Pt-Pd: молекулярно-динамическое моделирование»  
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук  
по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Рецензируемая диссертация имеет своей целью исследование структурных изменений в наночастицах платины, палладия и их взаимных растворов, причем в последнем случае внимание автора направлено на процесс поверхностной сегрегации компонентов. Основным методом при этом является метод молекулярной динамики, который автор вместе со своим руководителем и коллегами в течение последних лет активно используют для решения подобных задач. Отметим, что аналогичные расчеты проводились и ранее, однако они не привели к однозначному представлению даже о том, температура плавления частиц какого из изучаемых элементов выше. В работе А.А.Романова для усиления объективности полученных результатов использованы два различных силовых поля, определяемых приближением сильной связи (ПСС) и методом погруженного атома (МПА), а также две независимо разработанных компьютерных программы: программы, разработанной под руководством научного руководителя и известной открытой программы LAMMPS (Sandia National Laboratories, USA). Последняя позволяет осуществлять параллельные вычисления, что существенно повышает производительность компьютерных расчётов. Сопоставление полученных результатов между собой оказалось достаточно плодотворным и позволило однозначно отдать предпочтение рассчитанным диссертантом функциям погружения, которые правильно воспроизводят экспериментальное соотношение между температурами плавления компонентов. Важным достижением диссертанта явился переход в его анализе от изучения температурной зависимости температуры кристаллизации  $T_c$  к изучению гораздо более воспроизводимой величины - температуры затвердевания  $T_f$ , при которой в охлаждаемой жидкой частице появляются первые кристаллические включения.

Таким образом, в рецензируемой работе предложен ряд существенных уточнений метода молекулярной динамики, которые позволили автору получить новые результаты. Среди наиболее существенных рецензент считает необходимым упомянуть о том, что:

- доказана поверхностная сегрегация палладия в бинарных частицах платина-палладий, убывающая по мере уменьшения размера частицы;
- установлено, что для наночастиц платины и палладия ярче, чем для частиц других изученных металлов, проявляется эффект непрерывного, в том числе поверхностного плавления;
- показано, что коэффициент наклона в зависимости температуры затвердевания от числа атомов в частице заметно ниже, чем для аналогичной

зависимости температуры плавления, что согласуется с теоретическими предсказаниями Скрипова и Коверды, отмечавшими, что размерная зависимость температуры кристаллизации, является, в отличие от температуры плавления, не термодинамическим, а кинетическим эффектом.

Подводя итог анализу автореферата А.А.Романова, полагаю, что по объему проведенных расчетов, глубине и значимости полученных результатов его диссертационная работа вполне соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного Постановлением №842 Правительства российской Федерации от 24 сентября 2013 г. (в редакции Постановления Правительства РФ от 21.04.2016 года №3356 №748 от 02.08.2016 г.), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Романов А.А. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, профессор, профессор кафедры физики, технологии и методики преподавания физики и технологии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уральский государственный педагогический университет»

Контактная информация:

Почтовый адрес: 620017, г.Екатеринбург, пр.Космонавтов, 26, УрГПУ.

Факс: (353) 336-12-42.

Сайт: [www.uspu.ru](http://www.uspu.ru).

Телефон: (343) 218-06-41.

E-mail: [pspopel@mail.ru](mailto:pspopel@mail.ru).

Попель Петр Станиславович

---

9 декабря 2022 г.