

О Т З Ы В

на автореферат диссертации Романова Александра Андреевича
“Термоиндуцированные структурные превращения в наночастицах Pt, Pd и Pt-Pd: молекулярно-динамическое моделирование”, представленной к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности
1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Александра Андреевича посвящена весьма актуальному направлению исследования, связанному с поведением наноразмерных дисперсных материалов при термическом воздействии. Автор сосредоточил внимание на исследовании наночастиц Pt, Pd и Pt-Pd. Высокий интерес к данным материал обусловлен в первую очередь их каталитическими свойствами, но и механические характеристики, несомненно, играют важную роль в этих процессах.

В качестве метода исследования применен метод атомистического моделирования. Основные результаты получены с помощью метода молекулярной динамики. Особо отмечу тщательный подход автора к проработке моделей, потенциалов межатомного взаимодействия и их проверке. Описанные подходы в автореферате позволяют сделать вывод о высокой степени достоверности результатов и корректности моделей.

Среди большого количества результатов выделю ряд наиболее интересные и важные на мой взгляд. Так для описания взаимодействия автором найдены и апробированы функции погружения объемных фаз Pt и Pd. Показано, что в бинарных наночастицах Pt-Pd имеет место сегрегация атомов Pd к поверхности наночастиц. Для наночастиц Pt и Pd продемонстрированы линейные зависимости уменьшения энтальпии плавления с ростом обратного радиуса, это показано и для температуры затвердевания.

Полученные результаты обеспечивают как теоретическую, так и практическую значимость работы. Основные защищаемые положения, научная новизна и выводы диссертационной работы не вызывают сомнения. Их достоверность обеспечивается использованием современных методов исследования, соответствием установленных закономерностей имеющимся в литературе данным. Работа апробирована на международных и российских конференциях и в полной мере отражена в печати. Автореферат написан хорошим научным языком, дает полное представление о диссертационном исследовании.

Считаю, что работа “Термоиндуцированные структурные превращения в наночастицах Pt, Pd и Pt-Pd: молекулярно-динамическое моделирование” соответствует всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Романов А. А., заслуживает присвоения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

Я, Захаров Павел Васильевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой Романова Александра Андреевича, и их дальнейшую обработку.

Рецензент:

Захаров Павел Васильевич

Санкт-Петербургский политехнический университет
Петра Великого, адрес: 195251 г. Санкт-Петербург,
ул. Политехническая 29, кб. 154.

Профессор кафедры физики, доктор физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния, доцент.

т.: +7-923-648-06-74

e-mail: zakharovpvl@rambler.ru

05.12.2022