

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.411.03 НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

Аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 23.12.2022 г. № 6

О присуждении Романову Александру Андреевичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Термоиндуцированные структурные превращения в наночастицах Pt, Pd и Pt-Pd: молекулярно-динамическое моделирование» в виде рукописи по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния принята к защите 20.10.2022, протокол № 5, диссертационным советом 24.2.411.03, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ. Адрес: 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33. Приказ № 423/нк от 12.08.2013 г.

Соискатель – Романов Александр Андреевич, 2 сентября 1992 года рождения, в 2016 году окончил магистратуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» по направлению подготовки 03.04.03 Радиофизика; в 2020 окончил аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия. В настоящее время работает младшим научным сотрудником Управления научных исследований федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре общей физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор, заслуженный работник высшей школы РФ Самсонов Владимир

Михайлович, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», кафедра общей физики, профессор.

Официальные оппоненты:

Гафнер Светлана Леонидовна, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры математики, физики и информационных технологий ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова»; Тытик Дмитрий Леонидович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физикохимии коллоидных систем ФГБУН «Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук», дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация ФГБУН «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук», г. Москва, в своем положительном заключении, подписанном Гришиным Максимом Вячеславовичем, д.ф.-м.н., заместителем директора по научной работе, ведущим научным сотрудником лаборатории «Химической физики наноструктур» и утвержденном директором института Надточенко Виктором Андреевичем, д.х.н., профессором, указала, что диссертация является научно-квалификационной работой, в которой с использованием атомистического и термодинамического моделирования установлены закономерности и механизмы структурных превращений в наночастицах Pt, Pd и Pt-Pd и которая соответствует требованиям пунктов 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года (в текущей редакции). Автор диссертации Романов Александр Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 9 печатных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 7 работ, включая 5 статей, опубликованных в журналах, входящих в перечень ВАК и индексируемых в базах данных WoS и Scopus:

1. Samsonov, V.M. Embedding functions for Pt and Pd: recalculation and verification on properties of bulk phases, Pt, Pd, and Pt-Pd nanoparticles / V.M. Samsonov, A.A. Romanov, A.Yu. Kartoshkin, I.V. Talyzin, V.V. Puytov// Applied Physics A. – 2022. - V. 128. – P. 826.

2. Samsonov, V.M. When mechanisms of coalescence and sintering at the nanoscale fundamentally differ: Molecular dynamics study/ V.M. Samsonov, I.V. Talyzin, V.V. Puytov, S.A. Vasilyev, A.A. Romanov, M.I. Alymov // J. Chem. Phys. - 2022. - V. 156. - P. 214302.

3. Пуйтов, В.В. Закономерности и механизмы коалесценции нанокапель и спекания металлических наночастиц: молекулярно-динамическое

моделирование / В. В. Пуйтов, А. А. Романов, И. В. Талызин, В. М. Самсонов // Известия Академии наук. Серия химическая. – 2022. - № 4. – С. 686-693.

4. Васильев, С.А. Изучение размерных зависимостей теплот плавления и кристаллизации нанокластеров платины и палладия методом молекулярной динамики / С.А. Васильев, А.А. Романов, Н.В. Востров и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. - 2019. — Вып. 11. — С. 436-442.

5. Васильев, С.А. Изучение размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации нанокластеров платины методом молекулярной динамики / С.А. Васильев, А.А. Романов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2017. – Вып. 9. – С. 121-127.

Подготовка публикаций выполнена соискателем совместно с научным руководителем В.М. Самсоновым. Результаты диссертационной работы полностью отражены в опубликованных работах, в частности, результаты компьютерных экспериментов по моделированию плавления и затвердевания наночастиц Pt и Pd. А также результаты атомистического и термодинамического моделирования сегрегации в бинарных наночастицах Pt-Pd.

На диссертацию и автореферат поступило 13 отзывов, все отзывы положительные:

1. Вербенко И.А., д.ф.-м.н., директора Научно-исследовательского института физики ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет» и Резниченко Л.А., д.ф.-м.н., заведующей отделом интеллектуальных материалов и нанотехнологий. Замечаний не содержит.

2. Алымова М.И., д.т.н., профессора, член-корреспондента РАН, директора ФГБУН «Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Меражанова» РАН. Замечаний не содержит.

3. Шебзуховой М.А., д.ф.-м.н., профессора кафедры физики наносистем ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова». В отзыве содержится вопрос, о причине отсутствия нелинейности размерных зависимостей температур плавления наночастиц Pt и Pd.

4. Попеля П.С., д.ф.-м.н., профессора, профессора кафедры «Физики, технологии и методики преподавания физики и технологии» ФГБОУ ВО «Уральский государственный педагогический университет». Замечаний не содержит.

5. Мирзоева А.А., д.ф.-м.н., профессора кафедры «Физики наноразмерных систем» ФГБОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет». Замечаний не содержит.

6. Емельяненко А.М., д.ф.-м.н., заведующего лабораторией поверхностных сил ФГБУН «Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина» РАН. Содержит следующие замечания: в тексте автореферата на стр. 15 и 5 указано разное значение числа атомов в

наночастице для анализа размерных зависимостей температур плавления и затвердевания; учитывая, что температура 300 К в 5-7 раз ниже температур плавления компонентов сплава Pt-Pd, достаточно ли она для релаксации (отжига)? Сильно ли отличалось конечное радиальное распределение компонентов от такового сразу после затвердевания наночастицы?

7. Старикова С.В., к.ф.-м.н., старшего научного сотрудника лаборатории 1.6 ФГБУН «Объединенный институт высоких температур» РАН. Замечаний не содержит.

8. Цыбули С.В., д.ф.-м.н., профессора, главного научного сотрудника отдела исследования катализаторов ФГБУН «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова» СО РАН. Содержит следующие замечания: правильно ли для аморфизованной оболочки наночастиц использовать термин «жидкоподобное соединение»? По какому критерию атомы относились к имеющим и не имеющим кристаллическое окружение?

9. Старостенкова М.Д., д.ф.-м.н., профессора, главного научного сотрудника, профессора кафедры физики ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова». Содержит следующие вопросы: как сказывается на результатах зависимость от времени компьютерного эксперимента? возникают ли в компьютерном эксперименте зародыши сверхструктур и каких?

10. Боченкова В.Е., к.ф.-м.н., ведущего научного сотрудника лаборатории химии низких температур кафедры химической кинетики химического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» содержит замечание о неудачном термине «платиновые металлы».

11. Щёкина А.К., д.ф.-м.н., профессора, член-корреспондента РАН, заведующего кафедрой статистической физики и Волкова Н.А., к.ф.-м.н., доцента кафедры статистической физики ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет» замечаний не содержит.

12. Захарова А.Ю., д.ф.-м.н., профессора кафедры общей и экспериментальной физики ФГБОУ ВО «Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого» замечаний не содержит.

13. Захарова П.В., д.ф.-м.н., профессора кафедры физики ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» замечаний не содержит.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что официальные оппоненты и работники ведущей организации являются известными специалистами по теме диссертации. В частности, в области моделирования металлических систем, в том числе с использованием

потенциала сильной связи, а также экспериментальных исследований свойств однокомпонентных и бинарных металлических наночастиц.

Диссертационный совет отмечает, что выполненные соискателем исследования вносят вклад в изучение свойств наночастиц платины и палладия, в теоретическое описание механизмов плавления и кристаллизации указанных нанообъектов. Были **выявлены** закономерности поверхностной сегрегации в бинарных наночастицах Pt-Pd, **обоснована** взаимосвязь между поверхностной сегрегацией Pd и степенью стабильности наноструктур ядро-оболочка Pt@Pd и Pd@Pt.

Теоретическая значимость исследования состоит в том, что предложенные методы молекулярно-динамического моделирования структурных превращений в однокомпонентных наночастицах Pt и Pd, а также атомистического и термодинамического моделирования бинарных наночастиц Pt-Pd могут быть использованы для последующей разработки теоретических моделей термоиндуцируемых структурных превращения в более сложных по строению системах, структурными элементами которых являются наночастицы Pt, Pd и Pt-Pd.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что: выявленные закономерности и механизмы плавления имеют важное значение для технологий порошковой металлургии и аддитивных технологий.

Оценка достоверности результатов исследования выявила: полученные автором результаты согласуются с теоретическими предсказаниями других авторов; автором использовались две независимо разработанные компьютерные программы с различными многочастичными потенциалами, а также несколько различных параметризаций потенциалов, отвечающих методу погруженного атома (МПА). Автором диссертации были предложены и тщательно апробированы собственные параметризации МПА потенциалов для Pt и Pd. Результаты атомистического моделирования наночастиц, полученные с использованием предварительно апробированных на свойствах объёмных фаз потенциалов, хорошо согласуются друг с другом и имеющимися экспериментальными данными.

Личный вклад соискателя состоит в расчете функций погружения для Pt и Pd, получении и анализе результатов атомистического моделирования плавления и кристаллизации наночастиц указанных металлов, а также поверхностной сегрегации в бинарных наночастицах Pt-Pd, подготовке количественных данных и иллюстративных материалов для публикаций по результатам проведенных исследований.

В ходе защиты диссертации были высказаны критические замечания о возможности достижения в экспериментах скоростей ТК/с и равновесного состояния.

Соискатель Романов А.А. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию, что подобные скорости связаны с малым шагом моделирования (1 фс), а также есть упоминания в литературе о скоростях порядка 10 ТК/с, получаемых в экспериментах с нагревом наночастиц фемтосекундными лазерами.

Диссертация соответствует критериям Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 в текущей редакции. На заседании 23.12.2022 г. диссертационный совет принял решение присудить Романову Александру Андреевичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния за нахождение функций погружения потенциалов, отвечающих методу погруженного атома, выявленные закономерности плавления в наночастицах Pt и Pd, а также поверхностной сегрегации в бинарных наночастицах Pt-Pd.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 12 человек, из них 6 докторов наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 15 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 12, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета

Пастушенко
Юрий Григорьевич

Ученый секретарь
диссертационного совета

Барабанова
Екатерина Владимировна

23.12.2022 г.