

ОТЗЫВ

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

Диссертация Романова А.А. посвящена выявлению закономерностей и механизмов структурных превращений в однокомпонентных частицах Pt и Pd, а также в бинарных наночастицах Pt-Pd с использованием атомистического молекулярного моделирования. Тема данного исследования, безусловно, является весьма актуальной ввиду широкого применения наночастиц платины и палладия, а также наносплавов этих элементов в различных областях науки и нанотехнологий. Известно, что сплавы платиновых металлов имеют огромное значение из-за стабильности в кислых и щелочных средах. Они способны катализировать большой ряд химических реакций. Композитные материалы на основе платиновых сплавов рассматриваются в качестве катализаторов реакции селективного гидрирования углеводородов, электрохимических процессов окисления метанола, этанола, восстановления водорода и кислорода. В связи с этим, исследования Романова А.А. по изучению бинарного наносплава Pt-Pd представляются достаточно перспективными и важными. Кроме того, данные по размерным зависимостям температуры плавления однокомпонентных частиц Pt и Pd, могут быть полезны при разработке нанокатализаторов на основе этих металлов.

Хотелось бы отметить грамотно поставленные задачи данного научного исследования, что является следствием хорошего анализа имеющихся в литературе экспериментальных и теоретических данных, а также результатов компьютерного моделирования по теме диссертации (всего 195 литературных источников).

Для автора данного отзыва особенно интересны были результаты по размерным зависимостям температур плавления металлических наночастиц Pt и Pd (глава 3 диссертации), полученные с использованием потенциала сильной связи и метода погруженного атома.

Все полученные соискателем результаты в рамках метода МД отвечают линейной зависимости температуры плавления от числа атомов, содержащихся в наночастицах в степени $(-1/3)$, т.е. наблюдается линейная размерная зависимость температуры плавления для наночастиц данных металлов. В своих расчетах по размерной зависимости температуры плавления некоторых металлов, в частности для металлических наночастиц олова (Известия РАН, 2021г., т.85, №9, с.1262-1265) мы обнаруживали нелинейные участки в области малых размеров. Расчеты проводились в рамках термодинамического метода разделяющих поверхностей с учетом влияния размера на поверхностное натяжение и хорошо согласовывались с экспериментальными данными, которые анализировались в известной монографии Скрипова В.П. и Коверды В.П. «Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей» (1984, см. стр.198-199). В той же

монографии обсуждались экспериментальные результаты, полученные при плавлении малых частиц свинца и индия, для которых также был подтвержден вывод о том, что зависимость понижения температуры плавления малых частиц от кривизны поверхности отличается от линейной. Авторы монографии объяснили такое поведение размерной зависимости с точки зрения термодинамической теории с учетом возможности флуктуационного преодоления энергетического барьера плавления. Кроме того нелинейность может быть связана с учетом зависимости поверхностной энергии твердых наночастиц на границе с собственным расплавом с уменьшением размеров частицы.

В связи с изложенным, возникает закономерный вопрос к соискателю: Как Вы объясняете линейный характер размерной зависимости P_t и P_d , полученные в Ваших расчетах с использованием атомистического молекулярного моделирования. С чем, по Вашему мнению, может быть связано отсутствие факта нелинейности у наночастиц данных металлов?

В целом же, хочется отметить высокий научный уровень выполненного исследования. Работа Романова А.А. посвящена актуальной теме, и ее результаты представляют большой практический интерес.

Считаю, что диссертация А.А. Романова заслуживает высокой оценки. Она является законченной научно-квалификационной работой, отвечающей всем основным требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» ВАК РФ, предъявляемых к кандидатским диссертациям, а ее автор, Романов Александр Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Шебзухова Мадина Азметовна

Доктор физико-математических наук по специальности 01.04.15 – физика и технология наноструктур, атомная и молекулярная физика, профессор кафедры физики наносистем ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова»

Адрес: 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173

Сайт организации: <https://kbsu.ru/>

Тел.: +7 (8662) 42-25-60

Факс: +7 (495) 337-99-55

E-mail: yka@kbsu.ru

Подпись Шебзуховой М.А. заверяю:

Ученый секретарь ФГБОУ ВО
«Кабардино-Балкарский государственный
университет им. Х.М. Бербекова»

Ашинова И.В.