

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Русалева Юрия Владимировича «Определение взаимосвязи между локальной атомной структурой наноматериалов, их стабильностью и каталитическими свойствами методами суперкомпьютерного моделирования и машинного обучения», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 2.6.6 – Нанотехнологии и наноматериалы (физико-математические науки)

Диссертационное исследование Русалева Юрия Владимировича «Определение взаимосвязи между локальной атомной структурой наноматериалов, их стабильностью и каталитическими свойствами методами суперкомпьютерного моделирования и машинного обучения» посвящено разработке новых методик моделирования методом молекулярной динамики и обладающих локальной чувствительностью экспериментальных методик рентгеноспектральной диагностики, позволяющих установить связь между локальной атомной структурой и свойствами материалов. В работе можно выделить несколько ключевых задач, решённых соискателем: разработка новых потенциалов межатомного взаимодействия, использование разработанных потенциалов для моделирования упорядочения атомов металла и полученных механических свойств наноматериалов, применение методов машинного обучения для исследования свойств материалов на основе выборки опубликованных данных и мониторинг локальной атомной структуры функциональных материалов с помощью спектроскопии рентгеновского поглощения. Все эти методики посвящены актуальному направлению – ускорению цикла разработки новых материалов.

Диссертационная работа Русалева Ю.В. выполнена на высоком уровне с использованием современных методик расчётов, программных комплексов и оборудования. Достоверность изложенных результатов подтверждается уровнем опубликованных работ и не вызывает сомнений, а результаты проведенного исследования имеют практическую значимость для сокращения временных затрат на разработку новых материалов. В то же время, к автореферату работы есть ряд вопросов:

- 1) Из текста автореферата неясно, насколько был сбалансирован тренировочный и валидационный набор структур. Из рисунка 1 создаётся впечатление, что

количество объектов, связанных с поверхностью и наночастицами (зелёные точки) существенно меньше остальных, а качество аппроксимации у них ниже.

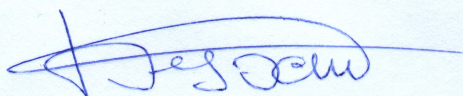
- 2) При описании раздела 3.2.2 автор пишет, что энергия адсорбции молекулы на PtSn не коррелирует с координационным числом атома углерода молекулы CO. С другой стороны, указывается что координация CO атомами металла влияет на частоты колебаний CO. С чем связано такое различие? Что автор понимает под термином корреляция и как можно объяснить её отсутствие? Как учитывается наличие платины во второй и более дальних координационных сферах при анализе частот колебаний?

Вышеприведенные замечания носят в значительной степени рекомендательный характер и не уменьшают ценность полученных результатов и выносимых на защиту положений диссертации Русалева Ю.В. Диссертационная работа по своему содержанию соответствует специальности 2.6.6 – Нанотехнологии и наноматериалы (физико-математические науки) и удовлетворяет критериям раздела 2 «Положения о присуждении ученых степеней в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Южный федеральный университет»».

По моему мнению, автор диссертации — Русалев Юрий Владимирович заслуживает присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 2.6.6 – Нанотехнологии и наноматериалы (физико-математические науки).

27.02.2024

Согласен на обработку персональных данных.



Бухтияров Андрей Валерьевич

Кандидат химических наук

(специальность 02.00.15 – Кинетика и катализ),

научный сотрудник ОФХИ на АМУ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

«Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова

Сибирского отделения Российской академии наук» (ИК СО РАН)

Тел.: +7(913)9219618, e-mail: avb@catalysis.ru

Подпись Бухтиярова А.В. заверяю

Ученый секретарь ИК СО РАН

к.х.н. Дубинин Юрий Владимирович

