

## 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)

В диссертационном исследовании Русалева Юрия Владимировича «Определение взаимосвязи между локальной атомной структурой наноматериалов, их стабильностью и каталитическими свойствами методами суперкомпьютерного моделирования и машинного обучения» описаны методики для рационального дизайна материалов. Расчёты методом теории функционала электронной плотности, а также созданная на их основе аппроксимация энергии межатомного взаимодействия типа ReaxFF, применяются для исследования локальной атомной структуры и свойств биметаллических наночастиц. В работе также описаны методики машинного обучения для ускоренной разработки материалов. В частности, особый интерес представляет раздел, посвящённый установлению связи между получаемыми свойствами напыляемых покрытий и параметрами установки напыления, полученные на основе количественного анализа большого объёма литературных данных с построением модели случайных деревьев ExtraTrees. Такие методики могут быть использованы для подбора параметров установок магнетронного распыления в промышленности.

Диссертационная работа Русалева Ю.В. свидетельствует о высоком научном уровне соискателя, что подтверждается публикацией 6 научных статей по тематике исследования. Изложенные результаты являются достоверными. Тематика исследований актуальна, а полученные результаты имеют практическую значимость для промышленности.

В то же время, к диссертационной работе есть ряд вопросов и замечаний:

- 1) На рисунках 6 и 7 указаны аббревиатуры названий дескрипторов, однако в тексте автореферата отсутствуют полные расшифровки данных аббревиатур.
- 2) Автор пишет о том, что для исследования механических плёнок кобальта был использован индентор в форме шара, однако в экспериментах по

наноиндентированию часто применяется индентор Берковича. Чем обусловлен выбор формы индентора?

- 3) В разделе 3.2 приведено сравнение различных дескрипторов для оценки энергии адсорбции СО на поверхности наночастицах Pd. Не совсем ясно на каких сайтах адсорбции на поверхности наночастиц Pd проверялись различные дескрипторы, сколько было рассмотрено сайтов адсорбции?

Тем не менее, вышеприведенные замечания носят в значительной степени рекомендательный характер и не преуменьшают 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).

дата 28.02.24

Согласен на обработку персональных данных.

*Чепкасов*

Чепкасов Илья Васильевич

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник

Сколковский институт науки и технологий

г. Москва, Большой бул., 30, стр 1, Москва, 121205

*Подпись Чепкасова И.В. подтверждаю.*  
Руководитель отдела  
Административного управления  
Гук О.С.

