

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» рассматриваются различные подходы для моделирования структуры и свойств материалов. В данном исследовании описано создание потенциала межатомного взаимодействия ReaxFF для сплава и наночастиц AuPd. В расчётах молекулярной динамики и Монте-Карло с данным потенциалом были исследованы фазовые переходы в сплаве, а также структура сферических наночастиц диаметром 4 нм. Кроме того, методы молекулярного моделирования были применены для анализа механических свойств плёнок кобальта с различной концентрацией дефектов. В работе также получены интересные результаты с применением методик машинного обучения для подбора параметров установок напыления износостойких покрытий.

Полученные в данной работе результаты достоверны, а разрабатываемые методики могут быть применены в промышленности. Сама работа выполнена на высоком уровне. Уровень диссертации подтверждается публикациями в ведущих международных научных журналах, в том числе первого квартиля: Journal of Physics: Condensed Matter, Molecules, ACS Catalysis.

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

- 1) В цитируемой литературе автор ссылается на работы десятилетней давности. Желательно было бы упомянуть более свежие публикации.
- 2) Воспроизводит ли разработанный потенциал ReaxFF температуру плавления для исследуемых смесей?
- 3) При расчёте механических свойств плёнок кобальта индентор погружался на 7 Å. Каким образом выбиралась глубина погружения?

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).

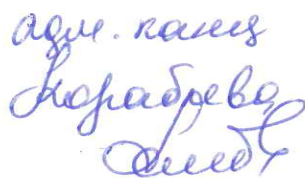
4 марта 2023

Согласен на обработку персональных данных.



Кондратюк Николай Дмитриевич
кандидат физико-математических наук
Заведующий лабораторией
многомасштабного моделирования
в физике мягкой материи МФТИ
141701, Московская область, г. Долгопрудный,
Институтский переулок, д. 9
kondratyuk.nd@mipt.ru

Подпись Кондратюка Н.Д. заверяю


А.В. ПОТАЧЕВ