

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)

Диссертация Русалева Юрия Владимировича «Определение взаимосвязи между локальной атомной структурой наноматериалов, их стабильностью и каталитическими свойствами методами суперкомпьютерного моделирования и машинного обучения» посвящена исследованию свойств наночастиц и тонких плёнок с помощью молекулярного моделирования и методик машинного обучения. В работе исследованы активные центры различных наночастиц. Для адсорбции угарного газа на наночастицах палладия был разработан алгоритм машинного обучения, предсказывающий энергию связи данной молекулы с разными активными центрами катализатора. Кроме того, в работе есть и экспериментальная часть. С помощью анализа спектров рентгеновского поглощения с временным разрешением были изучены активные центры наночастиц меди. Разработанная методика измерения и анализа спектров может служить валидацией теоретических расчётов, что актуально для разработки новых катализаторов. Таким образом, в данной диссертации разрабатываются методики, направленные на установление взаимосвязи между локальной структурой материалов и их свойствами.

Диссертационная работа Русалева Ю.В. выполнена на высоком уровне, а результаты достоверны, что подтверждается дополнительно тем, что по теме диссертации опубликовано 8 работ, из которых 6 научных статей в журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus. Разрабатываемые методики имеют практическую значимость и могут быть использованы для сокращения цикла разработки наноматериалов.

В то же время, к диссертационной работе есть вопрос и замечание:

- 1) В разделе 3.2 в качестве одного из дескрипторов структуры были использованы функции радиального распределения. Каким образом выбиралось расстояние для расчёта этой функции?

- 2) Представленные в автореферате графики могли бы быть представлены более четко.

Тем не менее, вышеприведенное замечание носит 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»».

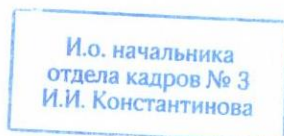
Автор диссертации — Русалев Юрий Владимирович заслуживает присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 2.6.6 – Нанотехнологии и наноматериалы (физико-математические науки).

04.03.2024

Согласна на обработку персональных данных.

Пенькова Анастасия Владимировна
Доктор химических наук (специальность
05.17.18 - Мембраны и мембранная технология (химические науки)),
профессор кафедры аналитической химии института химии федерального
государственного бюджетного образовательного учреждения высшего
образования «Санкт-Петербургский государственный университет»,
Университетский проспект 26, Петергоф, 198504,
Санкт-Петербург, Россия,
+79516646747

Подпись Пеньковой А.В. заверяю



Конст
04.03.2024

