

ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа Русалева Юрия Владимировича посвящена разработке экспериментальных и теоретических методик для исследования локальной атомной структуры материалов, определяющей их свойства. В работе для анализа структуры и свойств тонких плёнок и биметаллических наночастиц применено суперкомпьютерное моделирование с применением методов машинного обучения. Проведены уникальные экспериментальные исследования, в которых спектры рентгеновского поглощения катализаторов на основе меди регистрировались непосредственно в ходе реакции. Исследованы новые функциональные материалы, применяемые в промышленности. Это позволяет охарактеризовать работу как **актуальную и практически важную**.

Работа Русалева Ю.В. изложена на 119 страницах и включает в себя 39 рисунков, 12 таблиц, список литературы из 164 наименований. Отдельно приведены статьи автора по тематике исследования, опубликованные в изданиях, индексируемых базами Scopus и Web of Science. Структура диссертации традиционная. Диссертация содержит введение, три главы и заключение.

Во введении обоснована актуальность и практическая значимость исследования, сформулирована цель работы, сформулированы положения, выносимые на защиту.

В первой главе приведен обзор литературы, посвящённой современному состоянию методик суперкомпьютерного моделирования и машинного обучения для задач материаловедения.

Во второй главе описаны детали и технические подробности расчётов и экспериментов по измерению спектров рентгеновского поглощения.

Третья глава содержит основные результаты, полученные в ходе диссертационного исследования.

В заключении приведены основные результаты и выводы работы.

В диссертации были оптимизированы параметры потенциала ReaxFF для систем, состоящих из золота и палладия. Использование потенциала с оптимизированными параметрами для описания межатомных взаимодействий в расчётах методами молекулярной динамики и Монте-Карло позволило определить характер упорядочивания и локальную атомную структуру наночастиц Au-Pd с диаметром порядка нескольких нанометров.

Методики суперкомпьютерного моделирования и машинного обучения были использованы для исследования механических свойств тонких плёнок и покрытий, применяемых в промышленности. Использование алгоритмов машинного обучения позволило проанализировать большой объем экспериментальных результатов по нанесению нитрида титана на металлические подложки. В результате были найдены параметры установок магнетронного распыления, приводящие к наибольшей твёрдости напыляемых покрытий. Эти результаты представляются **важными** и обладают несомненной **научной новизной и практической значимостью..**

Достоверность полученных результатов и сделанных на их основе выводов обеспечена высоким экспериментальным и теоретическим уровнем работы с применением самых современных методик исследования. Расчёты проведены на современном суперкомпьютере «Блохин» с помощью лицензионного программного обеспечения (пакет LAMMPS для расчётов методами молекулярной динамики и Монте-Карло, пакет VASP для расчётов методом теории функционала электронной плотности).

Особое внимание было уделено исследованию качества разработанных потенциалов ReaxFF. Погрешности предсказания энергии, как на тренировочном, так и на валидационном наборе данных, определены количественно. С помощью полученных потенциалов были рассчитаны физические характеристики сплавов золото-палладий, приведено их сравнение с экспериментом. В работе применены стандартные, надежные и хорошо апробированные алгоритмы машинного обучения, реализованные на языке Python.

Эксперименты по измерению спектров рентгеновского поглощения выполнены на современном оборудовании на станции SuperXAS синхротрона SLS (г. Виллиген, Швейцария). Анализ спектров рентгеновского поглощения проводился с использованием широко используемого и хорошо зарекомендовавшего себя пакета Demeter.

Работа, однако, не свободна от некоторых **недостатков**.

1)

Описание применяемых методов нельзя назвать достаточным. Соответствующие места диссертации выглядят подчас как набор текстовых блоков, взятых из какого-то (возможно в целом и толкового) текста, но в представленной комбинации не позволяющих уловить мысль автора.

Возьмем, к примеру, раздел «Материалы и методы». В первом же абзаце, после странного утверждения, что «атомы разбиваются на кластеры» говорится, что (цитата) «для разбиения строятся списки соседей. В список соседей заносились все пары атомов, находящиеся на расстоянии обрезки конкретного потенциала ReaxFF плюс 0.2 Å». Что такое соседи? Чьи соседи? На основании чего составляются их списки? Что такое расстояние обрезки? Таких примеров можно привести достаточно много.

2)

В пояснениях к формуле (2) для общей энергии системы с использованием потенциалов RelaxFF встречаются вызывающие удивление пояснения, например, говорится, что « E_{Coul} и E_{vdW} представляют электростатический и дисперсионный вклады в энергию, рассчитанные для всех атомов независимо от расстояния между ними». Как кулоновская и ван-дер-ваальсовская энергии взаимодействия могут не зависеть от расстояния между атомами?

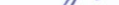
3)

Часто не определены ключевые понятия метода, например, ковариационная матрица. Этот термин может употребляться в различных смыслах и контекстах. Например, понятие ковариационной матрицы используется при фазовом анализе по набору спектров для определения числа присутствующих фаз. А здесь какой смысл имеет ковариационная матрица, и самое главное, как она строится?

4)

Одним из основных результатов работы является параметризация потенциала межатомного взаимодействия для системы золото-палладий на основе метода ReaxFF. Предложены четыре набора параметров для потенциалов, обозначенных в работе RF1, RF2, RF3 и RF4. В таблице 3.2 приведены, как сказано, «Некоторые избранные параметры потенциалов RF1-4». Получается, есть еще и какие-то неизбранные параметры? При этом выражения для потенциалов, куда эти параметры надо подставить, не приведены. Возможно эти параметры являются просто входными данными для некоего коммерческого программного продукта? Здесь следовало внести ясность.

Исходя из вышеизложенного, следует заключить, что представленная к защите диссертационная работа Русалева Юрия Владимировича выполнена на высоком научном уровне и полностью соответствует критериям раздела 2 Положения о присуждении ученых степеней в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Южный Федеральный Университет», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а соискатель – Русалев Юрий Владимирович заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 2.6.6 – Нанотехнологии и наноматериалы (физико-математические науки).

 Кочур Андрей Григорьевич,
доктор физико-математических наук

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ростовский государственный университет путей сообщения»,

официальный оппонент

пл. Ростовского Стрелкового Полка Народного Ополчения, 2,

тел.: +7 (863) 272-64-20, e-mail: agk@rgups.ru

Подпись

УДОСТОВЕРЯЮ

Начальник управления делами

ФГБОУ ВО РГУПС

« 12 » 02 2002



Т.М. Канина