

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Талызина Игоря Владимировича «Молекулярно-динамическое исследование термодинамических и кинетических аспектов плавления и кристаллизации металлических наночастиц», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Диссертационное исследование И.В.Талызина посвящено изучению влияния скоростей нагрева и охлаждения на размерные зависимости температур плавления и кристаллизации, энтальпий плавления и кристаллизации, энтальпий испарения и сублимации металлических наночастиц. Основными объектами исследования были наночастицы Ni, Co, Cu, Au, Ag, Al и Pb, для которых имелись надежные параметры потенциалов сильной связи (ПСС) и погруженного атома (МПА).

Среди наиболее оригинальных результатов работы я бы выделил определение размерной зависимости равновесной температуры плавления  $T_m^{(eq)}$  в результате релаксации наночастиц при фиксированных температурах и установление линейности ее зависимости от обратного радиуса частицы.

Кроме того, диссертантом впервые:

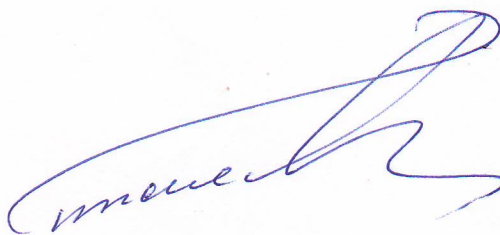
- показано, что энтальпии плавления, испарения и сублимации также уменьшаются с ростом обратного радиуса частицы;
- разработан и реализован кинетический подход к нахождению температуры плавления металлических наночастиц по температурной зависимости коэффициента самодиффузии;
- выдвинута и обоснована гипотеза о корреляции между температурой плавления однокомпонентных наночастиц и некоторыми явлениями в отдельных наночастицах и наносистемах, такими как сегрегация в бинарных наночастицах, коалесценция нанок капель и спекание наночастиц, смачивание в твёрдом состоянии на наномасштабах и деградация нанорельефа.

Перечисленные результаты свидетельствуют о том, что к защите представлены оригинальные результаты, свидетельствующие о научной зрелости диссертанта. Найденные им закономерности фазовых переходов в наночастицах принципиально важны для обоснования применимости понятий термодинамической фазы и фазового перехода к наноразмерным объектам. Эти результаты необходимо учитывать при разработке технологий получения наночастиц и наноструктурированных материалов, для определения температурных интервалов и других условий штатного функционирования устройств на основе наноразмерных элементов и для прогнозирования

стабильности наноструктурированных материалов в варьирующихся внешних условиях.

Таким образом, по объему и оригинальности полученных результатов, глубине их анализа представленная работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 02.00.04 – физическая химия, а ее автор И.В.Талызин заслуживает присуждения искомой степени.

Доктор физ.-мат.наук, профессор  
Попель Петр Станиславович,  
620073, г.Екатеринбург,  
ул.Крестинского, д.57, кв.113,  
Тел. 8 922 204 44 22,  
e-mail: pspopel@mail.ru  
профессор кафедры физики  
и математического моделирования  
Уральского государственного  
педагогического университета



г.Екатеринбург

6.03.2019