

ОТЗЫВ на автореферат диссертационной работы Талызина И.В. «Молекулярно-динамическое исследование термодинамических и кинетических аспектов плавления и кристаллизации металлических наночастиц», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

Диссертация И.В.Талызина весьма оригинальное исследование физико-химических процессов при разных структурных превращениях в кластерах ряда металлов, имеющих в твердой фазе ГЦК структуру (кобальт – ГП структура), на основе молекулярного моделирования. Одной из актуальных задач автор считает выяснение механизмов гистерезиса плавление-кристаллизация в кластерах. Для моделирования структурных превращений в кластерах автором используются популярные и хорошо проверенные потенциалы взаимодействия, например, модель погруженного атома.

В работе получен ряд важных зависимостей, в частности, температуры плавления и кристаллизации от скорости нагрева и охлаждения нанокластеров. Приведены данные расчета этих характеристик для кластеров с разным числом атомов. Получены размерные зависимости теплоты испарения и сублимации при температурах плавления и кристаллизации. Определенный интерес представляет расчет изменения температуры вблизи точки плавления для наночастиц серебра с разным числом атомов в кластерах. Этот результат, по-видимому, можно использовать при моделировании в качестве критерия перехода кластерного состояния вещества в состояние твердого тела.

Интересными представляются результаты оценки коэффициента самодиффузии в наночастицах. В работе выполнено моделирование важных физико-химических процессов, таких как явление сегрегации в бинарных наночастицах, деградация нанорельефа (нановыступ на поверхности). Проведена большая вычислительная работа по моделированию других физико-химических свойств кластеров металлов, важных для материаловедения и катализа.

В качестве замечания и пожелания автору хочу отметить – в дальнейших работах не упускать из рассмотрения стабильные кластеры с регулярной упаковкой. Например, для ГЦК металлов это икосаэдрическая упаковка с магическими числами атомов – 13, 55, 147, 309, 561, 923,.... Они обнаруживаются в масс-спектрометрических экспериментах как стабильные кластеры. Для них зарегистрирован (электронная микроскопия высокого разрешения) обратимый структурный переход кубооктаэдр-икосаэдр, что поможет взглянуть на проблему гистерезиса при плавлении-кристаллизации кластеров с несколько иной точки зрения.

Судя по автореферату, автор хорошо понимает и владеет современными методами численного моделирования физико-химических свойств нанокластеров. Материалы диссертации прошли апробацию на международных, всероссийских научных конференциях и опубликованы в ведущих российских и зарубежных журналах.

Представленная к защите работа отвечает требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а её автор И.В.Талызин заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Ведущий научный сотрудник лаборатории физикохимии коллоидных систем Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физической химии и электрохимии им.А.Н.Фrumкина Российской академии наук,

доктор физико-математических наук

Тытик Дмитрий Леонидович

Подпись Д.Л.Тытика удостоверяю:

Ученый секретарь Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физической химии и электрохимии им. А.Н.Фrumкина Российской академии наук, кандидат химических наук



И.Г.Варшавская

18 марта 2019

Почтовый адрес: 119071, Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4
Телефон (495)955-4421; E-mail: dtytik@rambler.ru