

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Талызина Игоря Владимировича «Молекулярно-динамическое исследование термодинамических и кинетических аспектов плавления и кристаллизации металлических нано- частиц», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04–физическая химия

Кристаллизация расплавов и растворов начинается со спонтанного возникновения нано- зародышей твердой фазы. Знание закономерностей начальной стадии этих процессов необходимо как при получении монокристаллов, так и нано- размерных пленок, и нано- структур. Поэтому молекулярно-динамическое (МД) изучение размерных зависимостей структуры и свойств нано- частиц, кинетики их «плавления-кристаллизации», и фазовых превращений является актуальными для ряда направлений физической химии, физики конденсированных сред, и многих технических приложений.

Основными объектами исследований И.В. Талызиным выбраны металлические нано- частицы переходных металлов: Ni, Co, Cu, Au, Ag, а также Al, Pb, и Si. Кроме того, изучены процессы «плавления-кристаллизации» в модельных системах из двух нано- частиц, нано- частиц со структурами «ядро-оболочка», «нано- частица –твердая плоская поверхность», и нано- рельеф металлической поверхности. Основным предметом исследования являлись размерные зависимости «температур плавления и кристаллизации», «энтальпий плавления и кристаллизации», «энтальпий испарения и сублимации» при различных скоростях нагрева и охлаждения нано- частиц. Цель работы: разработка и реализация кинетического и термодинамического подходов в итоговом нахождении равновесных «температур плавления и кристаллизации». Соответственно сформулировано 6 пунктов основных задач исследования, выполнение которых позволило автору выдвинуть 10 пунктов основных положений, выносимых на защиту, и отметить 8 пунктов научной новизны работы. Полное сопоставление достигнутых результатов обобщено в 10 пунктах выводов работы. Достоинством работы является концептуальный и критический анализ не только публикаций других авторов, но также и своих собственных работ с введением понятий «равновесная температура плавления и кристаллизации», «термодинамический и кинетический подход». Все запланированные задачи исследования полностью выполнены. При этом результаты работы важны не только в фундаментальном изучении проблемы «плавления-кристаллизации», но и в оценке теоретической и практической значимости работы. Наиболее существенно установление размерной зависимости равновесной температуры плавления и ее роли в процессах коалесценции и спекания нано- частиц.

Достоверность и обоснованность результатов работы несомненны, а также, несмотря на ее междисциплинарность, она вполне соответствует паспорту специальности 02.00.04 физическая химия

Замечания.

1. Несмотря на хорошее согласие компьютерных МД результатов с экспериментальными данными (Рис.4), заметный разброс последних и отклонение от расчетных данных все же наблюдаются. Что в прочем не удивительно, поскольку многие эксперименты с нано- объектами все еще остаются «искусством» экспериментатора.
2. Пересечение расчетных температур «плавления-кристаллизации» является нонсенсом (Рис. 5), поскольку температура кристаллизации не может быть выше температуры плавления. При малых размерах зародышей должно происходить слияние кривых плавления и кристаллизации.
3. Хотя термин структурные превращения в нано- частицах используется в работе, однако об иных фазовых превращениях кроме плавления и кристаллизации в

работе не упомянуто. Означает ли это, что в изученных объектах структурных фазовых превращений в твердом состоянии вообще не наблюдалось?

Указанные замечания являются редакционными. Диссертация И.В. Талызина является вполне завершенной научно-исследовательской работой. Соблюдено ее соответствие критериям, установленным п. 9 «Положением о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г.: соответствие целей и задач исследования; автореферат соответствует содержанию диссертации и содержанию опубликованных работ, а также видно четкое соответствие темы диссертации и научной специальности. Работа прекрасно апробирована на многочисленных международных конференциях, а ее результаты опубликованы как в Международных, так и в Российских изданиях.

Основные научные положения диссертации полностью отражены в ведущих рецензируемых научных журналах, удовлетворяющих требованиям ВАК РФ.

На основании вышеизложенного считаю, что по актуальности, новизне, солидной апробации, несомненной достоверности и практической значимости результатов, работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Талызин Игорь Владимирович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 - «Физическая химия».

С.н.с. Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения РАН,

Д.ф.-м.н.

Специальность

01.04.07 Физика конденсированного состояния.

02.00.04 Физическая химия.

Кидяров Борис Иванович

e-mail:kidyarov@ips.nsc.ru

тел.: +7(383)-333-32-66

Подпись Б.И. Кидярова заверяю

Ученый секретарь ИФП СО РАН

к.ф.-м.н.

С.А. Аржанникова

22 марта 2019 г.

630090 Новосибирск, 90 Тпр. Ак. Лаврентьева, 13.

