

Отзыв

на автореферат диссертационной работы Талызина Игоря Владимировича на тему «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.

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование с использованием современных высокопроизводительных компьютеров является мощным инструментом для изучения свойств различных материалов на атомистическом уровне. В диссертационной работе Талызина И.В. предпринята попытка использования МД методов для исследования процессов плавления и кристаллизации наноразмерных металлических кластеров. Оригинальность работы заключается в том, что для решения поставленной задачи диссертант использовал разработанную в коллективе программу для МД моделирования (именуемую авторами как CSEG). Это позволило использовать термостат Берендсена в сочетании с процедурой устранения «горячих частиц», что, на наш взгляд, гораздо корректнее традиционно используемого в программе LAMMPS термостата Нозе-Говера, искусственно сглаживающего флуктуации скоростей вблизи точки фазового перехода, где они существенны для формирования новой фазы.

К работе имеются следующие замечания:

1. Автор использует в качестве кинетического критерия плавления резкое изменение – «скачок» коэффициента диффузии (КД). При этом не поясняется для каких именно областей кластера проводится его вычисление. КД существенно различается в приповерхностных и внутренних областях, а также вблизи зародыша новой фазы. Кроме того, при МД моделировании кластеров малого размера резко выраженного «скачка» КД не происходит. В этом случае можно более точно определить температуру плавления, используя автокорреляционную функцию скоростей частиц.
2. Плавление (кристаллизация) начинается с появления зародыша новой фазы и распространения фронта плавления, что нарушает гомогенность системы. Процесс идет с изменением числа частиц, объема и давления в контактирующих фазах. При этом изменение внутренней энергии системы не равно энтальпии плавления, как полагает автор.

3. С одной стороны, в работе обсуждается проблематичность рассмотрения кластера с небольшим числом частиц как термодинамической системы. С другой стороны, используются положения термодинамики макроскопических систем, такие как экстенсивность энергии, энтропии, без адаптации их к случаю, когда размер системы порядка радиуса взаимодействия.

Перечисленные выше замечания можно предъявить к большинству работ в области МД моделирования фазовых переходов в наносистемах. Это, по-видимому, связано с отсутствием в настоящее время теоретической базы для определения и вычисления термодинамических параметров ипотенциалов малых кластеров. Работа Талызина И.В. представляет собой заметный и смелый шаг на пути решения обсуждаемых выше проблем, соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а сам автор безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Зав. лаб. субатомной и вычислительной физики КБГУ, д.ф.-м.н., проф.

 А.Х. Хоконов

Кабардино-Балкарский государственный университет
360004, Нальчик, ул. Чернышевского 173
Тел: +7-928-081-17-03, e-mail: azkh@mail.ru
На обработку персональных данных согласен

Подпись <u>Хоконова</u>
<u>А.Х.</u> заверяю
Начальник управления кадрового и правового обеспечения КБГУ
<u>Е.М. Машукова</u>
« <u>21</u> » <u>03</u> 20 <u>10</u> г.

