

ОТЗЫВ

на автореферат **Талызина Игоря Владимировича**, «молекулярно-динамическое исследование термодинамических и кинетических аспектов плавления и кристаллизации металлических наночастиц», на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 — физическая химия.

Целью работы Талызина И.В. являлось моделирование процессов перехода фаз в условиях когда вещество состоит в наноразмерном состоянии и моделирование развития поверхности наночастицы при наличии на ней дефекта. В современной технике и химической промышленности наноразмерные порошки уже используются повсеместно, это и регуляторы реологических свойств жидкостей, и антислеживатели для сыпучих материалов и каталитические материалы идущие на поверхности. Близость всех молекул частицы к поверхности меняет в том числе и физические свойства таких частиц, такие как температура плавления, температура кристаллизации, вязкость и т.д. Детальное изучение внутренних свойств материалов в наноразмерной форме может быть полезной для создания новых функциональных материалов, наножидкостей, химических катализаторов.

Вместе с тем не можем не упомянуть о вопросах которые у нас возникли при прочтении автореферата:

В автореферате указаны только названия потенциалов "потенциал сильной связи" "потенциал погруженного атома" - без аналитических выражений или графиков названия мало информативны. Не понятно чем автора не устроил широко распространенный потенциал Леннарда-Джонса, чем обусловлен выбор конкретно этих потенциалов?

Когда речь идет про размерные характеристики, то размером является кубический корень из числа частиц - это не очень удобный параметр для сравнения, куда приятнее сравнивать нанометры или ангстремы. На рис. 4. размерный параметр представлен в виде обратной зависимости от радиуса, такой график тоже не удобен, в добавок ко всему не объяснено почему все экспериментальные точки для крупных частиц лежат выше расчетной кривой? Как связано это с применимостью методики расчета?

Если мы представим частицу как каплю, то ее будет стягивать поверхностное натяжение и чем меньше частица тем сильнее будет избыточное давление внутри нее, такое приближение тоже объясняет изменение температуры плавления частиц. Почему такое интуитивное описание процесса не может быть использовано, а требуются МД?

Тем не менее по уровню теоретического описания, методам исследования, научно-практическому значению полученных результатов и выводов диссертация Талызина Игоря Владимировича удовлетворяет требованиям ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 — физическая химия

Труфанов Дмитрий Юрьевич
к.ф.-м.н. trufanov@itam.nsc.ru
Научный сотрудник ИТПМ СО РАН

Труфанов

15.02.2019

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт теоретической и прикладной механики им С.А.Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук
ул. Институтская, 4/1
г. Новосибирск,
630090,
РОССИЯ

