

ОТЗЫВ

на автореферат 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

Сто лет назад (!), для объяснения изменения температуры плавления нанообъектов, наиболее широко используется термодинамический подход, восходящий к работе Павлова (Pawlow P.J. Uher die Ahhangigkeit des Schmelzpunktes von der Oberflächenenergie eines festen Körpers // Zs. Phys. Chem.-1909.- Vol. 65. - P. 1-35) и основанный на учете возрастающей роли поверхностной энергии с уменьшением характерного размера.

Совершенно иная физическая картина плавления малых частиц была предложена в (Berry R.S., Jellinek J., Natanson G. Melting of clusters and melting // Physical Review A, 1984, V. 30. – P. 919-926). Она состоит в том, что кластеры с заданным числом атомов в них обнаруживают резкий нижний предел температуры для термодинамической стабильности жидкой формы и резкий верхний предел T_m для стабильности твердой формы. Совокупность одинаковых кластеров ведет себя как статистический ансамбль, который внутри определенной области температур и давлений состоит из двух типов кластеров: твердых и жидких. Отношение их чисел в термическом равновесии равно разности свободных энергий в твердом и жидком состояниях. Но это равновесие динамическое, каждый индивидуальный кластер меняет форму, в которой он находится. Однако частота перехода между этими фазами достаточно низкая, и для каждой фазы успевают установиться равновесные свойства. Результаты этой работы были получены аналитически анализом плотности состояний кластера.

В работах (Самсонова В.М. и др.) с использованием молекулярной динамики (МД) и потенциала сильной связи, исследовались закономерности и механизмы гистерезиса плавления-кристаллизации в наночастицах переходных металлов: золота, никеля, серебра и меди. МД позволяет изучать структурные переходы, термодинамические параметры, свойства переноса, а также электронные состояния в сложных системах. Возрастающая вычислительная мощность компьютеров постоянно расширяет спектр возможных приложений метода МД. В настоящее время успешно моделируется поведение достаточно сложных систем, содержащих десятки тысяч атомов.

Для достижения цели ставились основные задачи исследования:

1. МД исследование размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации, а также энтальпий фазовых переходов 1 рода в наночастицах с использованием двух альтернативных вариантов термодинамического подхода: в условиях гистерезиса плавления - кристаллизации (динамический вариант) и путём релаксации наночастиц при фиксированных температурах (квазистатический вариант);

2. Выяснение влияния скоростей нагрева и охлаждения на гистерезис плавления и кристаллизации, включая их влияние на температуры плавления и кристаллизации, регистрируемые в МД экспериментах;

3. МД исследование поведения теплоёмкости наночастиц в окрестности температуры плавления;

4. Разработка и реализация кинетического подхода к нахождению температуры плавления наночастиц по температурной зависимости коэффициента самодиффузии;

5. Выяснение степени влияния природы химической связи в наночастицах на размерную зависимость температуры плавления;

6. МД исследование влияния температуры плавления и её размерной зависимости на явления в наночастицах и наносистемах, включая сегрегационные явления в бинарных наночастицах, коалесценцию нанок капель и спекание твёрдых наночастиц, смачивание на наномасштабах и деградацию нанорельефа твёрдой поверхности.

В результате получены следующие основные выводы:

С использованием результатов МД экспериментов показано, что температуры плавления и кристаллизации металлических наночастиц зависят от скоростей их нагрева и охлаждения: увеличение приводит к росту величины гистерезиса плавления-кристаллизации, т.е. величины. Результаты, полученные с использованием потенциала сильной связи, подтверждены результатами МД экспериментов с использованием альтернативных многочастичных потенциалов, отвечающих МПА.

Размерные зависимости температур плавления и кристаллизации, а также энтальпий фазовых переходов (энтальпий плавления, испарения и сублимации) исследованы с использованием двух альтернативных вариантов термодинамического подхода: в условиях постепенного изменения температуры и путём релаксации при фиксированных температурах.

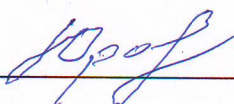
Личный вклад автора. Основные результаты диссертационной работы получены лично автором. Положения диссертационной работы опубликованы в соавторстве с научным руководителем и аспирантом С.А. Васильевым.

Постановка задач и выбор методик расчёта осуществлялся совместно с научным руководителем. Автором лично проведены все молекулярно-динамические расчёты с использованием программы LAMMPS. Расчёты с использованием программы CSEG осуществлялись с участием С.А. Васильева. Кроме того, были самостоятельно разработаны программные коды для создания начальных конфигураций, обработки результатов МД экспериментов и нахождения характеристик нанокластеров и наносистем. Одна из этих программ, "Расчёт структурных и энергетических характеристик наночастиц" прошла государственную регистрацию (№ 2016617014 от 23.06.2016).

Автореферат написан грамотным языком, характерным для научных работ. Автореферат и опубликованные статьи в полной мере отражают содержание диссертации. Актуальность темы, степень обоснованности выводов и научных положений работы, достоверность и новизна результатов позволяют заключить, что автореферат Талызина И.В. «МОЛЕКУЛЯРНО-

ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕСКИХ АСПЕКТОВ ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ», представляет собой законченную научно-квалификационную работу. Диссертация соответствует требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым ВАК Министерства образования и науки РФ к кандидатским диссертациям, а её автор Талызин И.В. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Директор научно-технического центра
Карагандинского государственного университета,
кандидат физико-математических наук, доцент



Юров В.М.

Подпись заверяю:



ҚОЙЫЛҒАН ҚОЛДЫ РАСТАЙМЫН

Юров Виктор Михайлович
Карагандинский государственный университет имени Е.А. Букетова
100028, Республика Казахстан, г. Караганда, ул. Университетская, 28
Адрес электронной почты: exciton@list.ru
Телефон: 8(7212) 77-03-89
Согласен на обработку персональных данных

19 февраля 2019 г.