

## ОТЗЫВ

об автореферате диссертационной работы Талызина Игоря Владимировича  
«МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ  
И КИНЕТИЧЕСКИХ АСПЕКТОВ ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ  
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ»,

представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук  
по специальности 02.00.04 – физическая химия

В последние годы во всем мире активно ведутся теоретические и экспериментальные исследования наносистем и наночастиц, разрабатываются методы их практического применения. В связи с этим работа, целью которой является изучение закономерностей плавления и кристаллизации наночастиц, нахождение температуры плавления и других термодинамических характеристик наночастиц методом молекулярно-динамического моделирования (МД), безусловно, актуальна.

В диссертационной работе Талызина И.В. получены новые научные результаты, например, показано, что природа химической связи не оказывает существенно влияния на вид размерной зависимости температуры плавления, которая линейно уменьшается с ростом обратного радиуса частицы как для металлических наночастиц, так и для молекулярных и ковалентных нанокластеров; впервые в МД экспериментах изучено влияние скорости нагрева на температуру плавления наночастиц и скорости охлаждения на температуру кристаллизации; разработан и реализован кинетический подход к нахождению температуры плавления металлических наночастиц по температурной зависимости коэффициента самодиффузии.

Практическая значимость диссертационной работы Талызина И.В. связана с тем, что закономерности и механизмы фазовых превращений в наночастицах необходимо учитывать при разработке технологий получения наночастиц и наноструктурированных материалов, а также для определения температурных интервалов и других условий штатного функционирования устройств на основе наноразмерных элементов.

По автореферату есть замечание:

В тексте автореферата нет достаточной информации для обоснования п.6 раздела «Научная новизна», касающегося того, что теплоёмкость мезоскопических наночастиц переходных металлов, может принимать отрицательные значения, нет объяснения, что это не артефакт.

Указанное замечание не умаляет научной и практической значимости диссертационной работы Талызина И.В., которая является законченным самостоятельным научным исследованием, ее актуальность, новизна и практическая значимость не вызывает сомнений. Представленная диссертационная работа отвечает квалификационным требованиям, установленным в п. 9 «Положения о присуждении учёных степеней», а ее автор, Талызин Игорь Владимирович, безусловно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

12.03.2019

Гельчинский Борис Рафаилович

Доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией порошковых, композиционных и наноматериалов, Федеральное государственное учреждение науки Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук.

620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101.

Тел./факс: 343 267 8914. E-mail: brg47@list.ru

<http://www.imet-uran.ru>

Подпись д.ф.-м.н., зав. лабораторией Гельчинского Б.Р. удостоверяю.

Ученый секретарь Института металлургии УрО РАН, к.х.н.

А.В. Долматов

