

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Талызина Игоря Владимировича «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

Актуальность исследований по теме диссертации Талызина И.В. определяется тем, что интерпретация структурных превращений в наночастицах как фазовых переходов требует дополнительного обоснования и уточнения границ применимости понятий и концепций классической термодинамики к наносистемам. В частности, не выяснены в полной мере закономерности и механизмы гистерезиса плавления-кристаллизации, хотя вполне понятно, что само наличие такого гистерезиса свидетельствует о неравновесном характере соответствующих процессов. Остаётся открытым и вопрос о том, в какой степени гистерезис плавления-кристаллизации может быть уменьшен или полностью устранён.

Несмотря на целый ряд имеющихся теоретических концепций, а также результатов компьютерных экспериментов, закономерности и механизмы гистерезиса плавления и кристаллизации наночастиц остаются не вполне ясными. Так, размерная зависимость температуры плавления наночастиц различных металлов исследовалась ранее с использованием атомистического моделирования. Вместе с тем, зависимость температуры кристаллизации, механизмы плавления и кристаллизации наночастиц, а также кинетические аспекты данных фазовых переходов исследованы в гораздо меньшей степени.

Поэтому целью диссертационной работы было выяснение кинетических закономерностей плавления и кристаллизации наночастиц, разработка и реализация термодинамического и кинетического подходов к нахождению температуры плавления и других термодинамических характеристик наночастиц в молекулярно-динамических экспериментах.

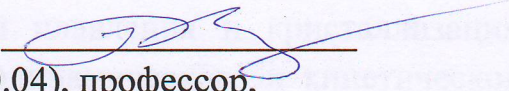
Автором диссертационной работы впервые помимо температуры плавления и температуры кристаллизации найдены и проанализированы размерные зависимости равновесной температуры плавления, которая находилась путём релаксации наночастиц при фиксированных температурах. Исследованы размерные зависимости энтальпий плавления и кристаллизации, энтальпий испарения и сублимации и показано, что энтальпии плавления, испарения и сублимации уменьшаются с ростом обратного радиуса частицы. Изучено влияние скорости нагрева на температуру плавления наночастиц и скорости охлаждения на температуру

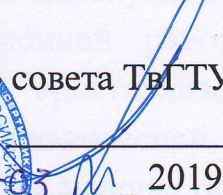
кристаллизации. Установлено, что увеличение скорости изменения температуры приводит к росту гистерезиса плавления-кристаллизации. Показано, что природа химической связи не оказывает существенного влияния на вид размерной зависимости температуры плавления: линейно уменьшается с ростом обратного радиуса частицы как для металлических наночастиц, так и для молекулярных и ковалентных нанокластеров. Показано, что в окрестности температуры плавления теплоёмкость мезоскопических наночастиц переходных металлов может принимать отрицательные значения.

В работе предложен и реализован кинетический подход к нахождению температуры плавления металлических наночастиц по температурной зависимости коэффициента самодиффузии. Установлено, что результаты, полученные с помощью термодинамического и кинетического подходов, хорошо согласуются друг с другом. Выдвинута и обоснована гипотеза о взаимосвязи между температурой плавления однокомпонентных наночастиц и некоторыми явлениями в отдельных наночастицах и наносистемах.

Результаты исследования опубликованы в 22 научных работах, в том числе в 9 статьях в изданиях, рекомендованных ВАК, а также представлены в тезисах докладов на международных конференциях и не вызывают сомнений в своей достоверности.

Считаю, что диссертационная работа Талызина И.В. представляет собой законченное исследование, соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», а её автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Сульман Михаил Геннадьевич 
доктор химических наук (02.00.04), профессор,
зав. кафедрой стандартизации, сертификации и управления качеством

Подпись заверяю, 
ученый секретарь ученого совета ТвГТУ
д.т.н., проф. А.Н. Болотов
(Гербовая печать) «14» 2019 г.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

170026, г. Тверь, наб. А. Никитина, 22

Тел.: +7(4822)789348

E-mail: sulman@online.tver.ru