

ОТЗЫВ

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

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

Быстрое развитие современных нанотехнологий требует глубокого проникновения в физику процессов, протекающих в микрочастицах на атомном уровне. Большой интерес вызывают в частности изучение свойств металлических наночастиц, которые обладают рядом особых свойств, которые делают их полезными в качестве катализаторов или модификаторов поверхности. В связи с этим, рецензируемая работа, посвященная моделированию термодинамических и кинетических характеристик плавления наночастиц на атомном уровне, безусловно, актуальна.

Диссертационная работа написана ясным языком и производит неплохое впечатление рядом интересных результатов моделирования. Выглядит вполне логичным выбор объектов исследования - кластеров Cu, Au, Ag, Ni, Co, Pb, для которых потенциалы межчастичного взаимодействия хорошо изучены. Это позволяет говорить о достаточной достоверности полученных в работе выводов.

Из числа полученных в работе результатов внимание привлекает исследование термодинамических характеристик в области мезоскопических размеров нанокластеров (от нескольких десятков до нескольких сотен тысяч атомов), который недостаточно исследован к настоящему времени.

Однако следует сделать ряд замечаний по тексту автореферата:

1. Вызывает сомнение уместность пункта 8 раздела научная новизна работы. Вряд ли предположение о связи температуры плавления наночастицы с температурной границей спекания и коалесценции может претендовать на новизну, поскольку многократно обсуждалось в литературе (см. например Гегузин Я.Е «Физика спекания»);
2. В нескольких местах автореферата для описания скачкообразного понижения температуры наночастицы при приближении к точке плавления использован термин «отрицательная теплоемкость». Это вызывает возражения по двум причинам: во-первых, это противоречит известному критерию устойчивости термодинамической системы (Ландау «Статистическая физика» стр.81), а во вторых, при МД-моделировании система находится довольно далеко от равновесия, и связь скачка температуры с равновесной характеристикой не имеет особого смысла;
3. В автореферате, к сожалению, отсутствуют ссылки на первую классическую работу по влиянию размера микрочастиц на их температуру плавления, выполненную нашим соотечественником П.Павловым в Одесском университете в 1909 г. (Pawlow, P. Z. Phys. Chem. 1909, 65U, 1–35. doi:10.1515/zpch-1909-6502), хотя все зарубежные авторы ее непременно цитируют.

Сделанные выше замечания не снижают заметно положительной оценки работы в целом. Считаю, что представленная работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор **Талызин Игорь Владимирович** заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 "Физическая химия".

Д.ф.-м.н., профессор
кафедры компьютерного моделирования и нанотехнологий
Южно-Уральского
государственного университета

454080 г. Челябинск, пр-т Ленина, 76

31.01.2019

e-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru
тел: 8-312-65-47-13

ВЕРНО

Ведущий документовед
О.В. Брюхова

