

Отзыв на автореферат диссертации

Талызина Игоря Владимировича

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕСКИХ АСПЕКТОВ  
ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ  
НАНОЧАСТИЦ**

представленной к защите на соискание научной степени кандидата наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

В представленной к защите диссертации изложены результаты компьютерного моделирования наночастиц металлов для определения их характеристик в области плавления, включая структурные, кинетические и термодинамические свойства. Интерес к таким объектам связан, не в последнюю очередь, широким применением композитных материалов с участием металлических частиц, что обуславливает **актуальность** диссертационной темы. В работе рассмотрен ряд переходных металлов, а также алюминий и свинец, с использованием двух видов межатомных потенциалов.

Хотя в литературе имеется немало работ, посвященных изучению плавления микрочастиц различных веществ, данная работа выделяется тщательным анализом способов определения температур плавления и кристаллизации для наночастиц. Выявлена существенная зависимость этих величин от скорости нагрева или охлаждения частиц, и сделан вывод о возможности добиться исчезновения гистерезиса калорических кривых в процессах нагрева и охлаждения при переходах плавление-затвердевание, что является **новым и оригинальным** результатом этой работы. Обоснованы способы фиксации равновесной температуры плавления как по калорическим кривым, так и по температурной зависимости коэффициента самодиффузии.

Одной из задач работы было определение зависимости свойств частиц от их размера. В согласии с предыдущими исследованиями показано, что температура плавления и энтальпия монотонно уменьшаются с уменьшением размера частиц, которые изменялись в широких пределах от нано- до мезоразмеров.

Сравнение с частицами леннард-джонского вещества и кремния позволило автору диссертации утверждать, что полученные результаты носят общий характер и не зависят от химической природы вещества наночастицы.

Автореферат хорошо написан, полностью отражает содержание диссертационной работы, которое изложено в нескольких статьях в журналах, индексируемых в системах WoS и Scopus. По актуальности, научной новизне, объему и обоснованности научных результатов представленная работа соответствует необходимым требованиям пункта 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., а автор диссертации Тальзин Игорь Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

19.02.2019

Ведущий научный сотрудник института химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»  
профессор, доктор физ.-мат. наук  
по специальности 01.04.14-теплофизика и теоретическая теплотехника.

Бродская Елена Николаевна

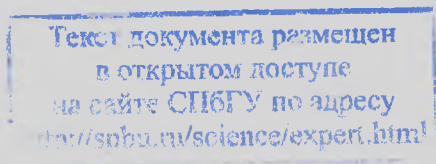
198504, Россия, Санкт-Петербург, Петродворец,  
Университетский пр., 26, Институт химии СПбГУ  
<http://chem/spbu.ru>  
Тел. +7(812)-428-4093  
email: [e.brodskaya@spbu.ru](mailto:e.brodskaya@spbu.ru)

Подпись Бродской Е.Н. заверяю

Личную подпись заверяю

Начальник отдела кадров №3

Н.И. Мад...



ДОКУМЕНТ  
ПОДГОТОВЛЕН  
ПО ЛИЧНОЙ  
ИНИЦИАТИВЕ