

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

Диссертационная работа Талызина И.В. посвящена исследованию процессов плавления и кристаллизации металлических наночастиц методами молекулярно-динамического моделирования с использованием многочастичных потенциалов, соответствующих потенциалу сильной связи и потенциалам, отвечающих методу погруженного атома. Она соответствует приоритетному направлению развития науки, технологий и техники «Индустрия наносистем и материалов» и критической технологии «Компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий» и ее актуальность не вызывает сомнений.

В работе получен ряд новых результатов, имеющих принципиальное значение для дальнейшего развития теории фазовых переходов первого рода в наносистемах. К ним относятся установленные в работе размерные зависимости температур плавления и кристаллизации, а также энтальпий фазовых переходов (плавление, испарение, сублимация) в условиях гистерезиса плавление – кристаллизация и квазистатического варианта. Достаточно обстоятельно изучены вопросы влияния скорости изменения температуры на размерные зависимости ряда термодинамических характеристик наночастиц. С интересом воспринимаются результаты молекулярно-динамических экспериментов автора по отрицательным значениям теплоемкости наночастиц переходных металлов в окрестности температуры плавления, влиянию размерных эффектов на смачивания, коалесценцию наночапель и деградации нанорельефа.

Автором, с использованием молекулярно-динамического моделирования, показано, что температуры плавления и кристаллизации, а также энтальпий фа-

зовых переходов уменьшаются линейно с ростом кривизны ($C = 1/r$, r - радиус) поверхности дисперсной частицы. Отметим, что в рамках классической термодинамики дисперсных систем, основанная на использовании концепции разделяющих поверхностей, для изменения температуры фазового перехода при искривлении плоской поверхности получаются аналогичные зависимости только для больших радиусов кривизны. Представляется интересным продолжение работ по атомистическому моделированию фазовых переходов для случая, когда радиус кривизны поверхности является малым (в пределах, например, размера критического зародыша новой фазы).

По нашему мнению, чрезвычайно актуальными являются проблемы, обсуждаемые в последней (четвертой) главе диссертационной работы, связанные с процессом поверхностной (межфазной) сегрегации компонентов, а также влиянием наноразмерных эффектов на адгезию, смачивание и растекание в наносистемах. Целесообразно продолжить эти исследования с использованием метода компьютерного моделирования нанообъектов.

Диссертационная работа Талызина И.В. является законченным научным исследованием, выполненном на достаточно высоком научном уровне. По актуальности, научной новизне, практической значимости и достоверности выводов, публикации результатов исследований в журналах, входящих в перечень ВАК и изданиях Web of Science и Scopus, данная диссертационная работа удовлетворяет требованиям ВАК к кандидатским диссертациям по физико-математическим наукам, а ее автор Талызин Игорь Владимирович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 физическая химия «Физико-математические науки».

Заведующий кафедрой физических
основ микро- и наноэлектроники
ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский
государственный университет им. Х.М. Бербекова»,
доктор физико-математических наук, профессор,
Заслуженный деятель науки РФ

360004, г. Нальчик, ул.
Чернышевского, 173

А.А.Шебзухов

11.03.2019

zav-kfomn@mail.ru

Заведующий
Ученый секретарь КБТУ *И.В. Ашмиз*

