

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы И.В. Талызина «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

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование плавления и кристаллизации наночастиц и сопутствующие этим фазовым переходам явления позволяют более четко представить и понять многие особенности физических явлений, протекающих в наномасштабе. Для фундаментальной физической химии актуальность выполненных расчётов вполне очевидна.

В результате проведённых диссертантом исследований получен ряд новых результатов:

1. Найдены и проанализированы температуры плавления и кристаллизации при различных скоростях нагрева и охлаждения наночастиц Cu, Au, Ag, Ni, Co и Pb, выяснены размерные зависимости равновесной температуры плавления этих металлов при релаксации частиц при постоянной температуре.
2. Установлено, что для всех исследованных металлов, а также аргона и кремния температуры плавления уменьшаются с ростом обратного радиуса частицы по линейному закону.
3. С использованием МД показано, что энтальпии плавления, испарения и сублимации при постоянной температуре уменьшаются с ростом обратного радиуса частицы.
4. Разработан и реализован кинетический подход к нахождению температуры плавления металлических наночастиц по температурной зависимости коэффициента самодиффузии.
5. Проиллюстрирована взаимосвязь между температурами плавления и кристаллизации однокомпонентных наночастиц и явлениями коалесценции нанок капель, спеканием наночастиц, смачиванием, деградацией шероховатости.

Изложенные в автореферате диссертации И.В. Талызина результаты систематического МД моделирования фазовых переходов представляются интересными, актуальными и важными.

Замечания.

1. Из текста автореферата не совсем ясно, как автор вводит в расчёты понятие «температура». Неясно, как в расчётах задавалась скорость изменения температуры в масштабе $dT/dt = 10^{12}$ К/с = 1 ТК/с и как эта скорость соотносится с частотой колебаний атомов в нанокластере.
2. Стр. 10. Автор пишет. В расчётах «использовался тот же способ регистрации температур плавления и кристаллизации по скачкам на температурной зависимости удельной когезионной энергии u . Такой подход можно назвать термодинамическим, а его вариант, отвечающий регистрации T_m и T_c в условиях постепенного изменения температуры – динамическим».

Способ вычисления энергии когезии U следовало бы описать в

автореферате.

3. Ранее на стр. 9 автор пишет: «Основное содержание данной главы связано с применением двух альтернативных вариантов термодинамического подхода к исследованию размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации. Динамический вариант отвечает равномерному нагреву наночастиц для определения температуры плавления и равномерному охлаждению с определённой скоростью изменения температуры для нахождения температуры кристаллизации, а квазистатический – релаксации наночастиц при фиксированных температурах».

Динамическое и квазистатическое описание фазовых переходов — это два варианта термодинамического рассмотрения явлений или нет? См. цитату в пункте 2.

4. Почему на рис. 2 температура плавления слабо зависит от скорости нагрева? Желательно пояснить.

5. На рис. 6 температура плавления серебра выше, чем температура плавления золота?

6. Интересный результат, приведенный на рис. 9 с отрицательной теплоёмкостью, следовало бы пояснить.

Высказанные замечания не затрагивают сути работы по моделированию размерных эффектов при плавлении и кристаллизации наночастиц, а являются, скорее, рекомендациями по дальнейшему анализу актуальных вопросов фазовых переходов в наночастицах различных материалов.

Диссертационная работа в полной мере соответствует критериям, установленным п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года №842, а ее автор Талызин Игорь Владимирович заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 — физическая химия.

Ведущий научный сотрудник

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН

кандидат физико-математических наук

Александр Ефимович Городецкий

Почтовый адрес: 119071, г. Москва, Ленинский просп., д. 31, корп. 4.

Адрес электронной почты: aegorodetsky@mail.ru

Телефон: 8(495)330-21-92

Согласен на обработку персональных данных

Подпись ведущего научного сотрудника А.Е. Городецкого заверяю

Учёный секретарь Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН кандидат химических наук И.Г. Варшавская.

20..февраля 2018 г.

