

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Сергея Александровича Васильева **«Молекулярно-динамическое моделирование термоиндуцированных структурных превращений в наночастицах металлов подгруппы меди»**, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 “Физика конденсированного состояния”.

Актуальность диссертационной работы С. А. Васильева обусловлена необходимостью развития научно обоснованных подходов к получению металлических наночастиц, включая применение в нанотехнологических процессах. Диссертантом представлен ряд новых интересных результатов, из которых наиболее важными и интересными мне представляются следующие.

1. Впервые выполнено систематическое МД исследование плавления и затвердевания наночастиц металлов подгруппы меди, содержащих до 200000 атомов. Результаты расчётов для наночастиц серебра и золота находятся в хорошем согласии с калориметрическими экспериментальными данными для температуры плавления. При этом установлено, что поверхностное плавление и другие механизмы непрерывного плавления наблюдаются при нагревании наночастиц любого размера, в том числе наночастиц, содержащих менее 10000 атомов.
2. Проведено сравнительное МД исследование плавления глобулярных наночастиц и нанопроволок того же радиуса. Установлено, что при повышении температуры имеет место потеря стабильности металлической нанопроволоки, отвечающая переходу к глобулярной частице.

Совокупность результатов диссертанта по структурным превращениям в наночастицах могут быть использованы для разработки соответствующих теоретических моделей, а также для планирования экспериментальных исследований и последующего применения металлических наночастиц в порошковой металлургии, аддитивных технологиях и других технологических процессах с использованием наночастиц. Результаты исследований диссертанта опубликованы в 17 статьях в журналах, входящих в перечень ВАК и индексируемых в базах данных WoS и Scopus. Результаты, включённые в диссертацию, докладывались на ряде конференций различного уровня.

По моему мнению, диссертационная работа С. А. Васильева «Молекулярно-динамическое моделирование термоиндуцированных структурных превращений в наночастицах металлов подгруппы меди» удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Соответственно автор диссертации – Сергей Александрович Васильев – несомненно заслуживает присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 “Физика конденсированного состояния”.

Захаров Анатолий Юльевич
доктор физико-математических наук, профессор
кафедра общей и экспериментальной физики
Новгородский государственный
университет им. Ярослава Мудрого
173003, В. Новгород, ул. Б. С. – Петербургская, 41
тел. +7(8162)974269
E-mail: Anatoly.Zakharov@novsu.ru