

Отзыв

на автореферат диссертационной работы Васильева Сергея Александровича на тему «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.

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование является мощным инструментом для изучения свойств различных материалов на атомистическом уровне. В диссертационной работе Васильева С.А. проведено исследование влияния исходной структуры и начальной формы, в частности икосаэдрической, на температуру плавления наночастиц. При этом анализируется роль поверхностного предплавления. Соискателем обнаружена двухстадийность плавления наночастиц подгруппы Cu, когда первая стадия характеризуется непрерывным уменьшением степени кристалличности, а вторая – скачкообразным падением до нуля. В МД-экспериментах автора обнаружено, что при затвердевании нанокпель металлов с ГЦК-структурой, помимо ГЦК, образуется также и икосаэдрическая структура.

К работе имеются следующие замечания:

1. На рисунках 1 – 3 приводится температурная зависимость степени кристалличности (СК) χ . При этом как в автореферате, так и в диссертационной работе отсутствует четкое количественное определение этой величины для атомов приповерхностного слоя, когда не заполнена первая координационная сфера.
2. Соискатель не связал используемое им «конфигурационное» определение СК с принятым в литературе термодинамическим определением, согласно которому СК представляет собой отношение энтальпии плавления рассматриваемого образца к энтальпии соответствующего кристалла.
3. Поверхностное натяжение и его размерное поведение при фазовом переходе, например, обращение в нуль для перехода жидкость-газ, является определяющим и для нахождения размерной зависимости температуры плавления. Однако, классическая молекулярная динамика с использованием любых многочастичных потенциалов не позволяет даже с грубой точностью получить значения поверхностного натяжения для металлов ввиду перераспределения электронной плотности на границе раздела. Такое перераспределение ведет к существенному изменению поверхностной энергии, что хорошо видно при применении метода функционала электронной плотности.

В целом, работа Васильева С.А. соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а сам автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Зав. лаб. субатомной и вычислительной
физики КБГУ, д.ф.-м.н., проф.

ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный
государственный университет им. Х.М. Бербекова»
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, д. 173
тел.: +7 928 081 17 03; e-mail: azkh@mail.ru

А.Х. Хоконов