

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу Кузамишева Алима Гисаевича на тему «Размерные зависимости теплофизических свойств однокомпонентных металлических наночастиц», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Диссертационная работа Кузамишева А.Г. посвящена изучению размерных эффектов в однокомпонентных наносистемах. Основное внимание уделено размерным зависимостям теплофизических свойств однокомпонентных металлических наночастиц. В работе проведены исследования таких характеристик, как поверхностное натяжение, температура, теплота и энтропия плавления, а также коэффициент теплового расширения. Актуальность настоящей работы определяется, прежде всего, современными запросами в области разработки новых материалов, внедрения нанотехнологий и развития наноинженерии. Как известно, уменьшение размера образца приводит к возрастанию удельного веса поверхностных атомов (молекул) по отношению к общему числу таких частиц в этом образце и, следовательно, сопровождается возрастанием роли поверхности в формировании структуры и свойств такого объекта. Результаты диссертационной работы Кузамишева А.Г. представляют несомненный интерес для дальнейшего углубления теоретических знаний и объяснения специфических свойств наноматериалов.

Структура диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка цитированной литературы из 205 наименований. Материал изложен на 149 страницах, содержит 33 рисунка и 8 таблиц.

Первая глава диссертации посвящена современному состоянию исследований по размерным зависимостям теплофизических характеристик однокомпонентных наночастиц: поверхностного натяжения, температуры плавления, теплоты и энтропии плавления, а также коэффициента термического расширения. Рассмотрены основные подходы и результаты, полученные в рамках термодинамики поверхностных явлений с использованием термодинамического метода и метода функционала плотности, компьютерного моделирования, а также методы и результаты экспериментальных исследований.

В обзорной главе показано, что литературные данные по размерной зависимости поверхностного натяжения достаточно часто имеют качественные различия. Большинство уравнений для нахождения этой зависимости в однокомпонентных системах являются разновидностями известной формулы Толмена, которая непригодна для описания малых наночастиц. Автор также отмечает отсутствие единого мнения о способе введения знака параметра Толмена.

Также в этой главе диссертации рассматривались основные методы исследования размерных зависимостей калорических величин (энтропии и теплоты плавления), сделан вывод о том, что их размерные зависимости исследованы гораздо меньше по сравнению с температурой плавления, что предполагает их дальнейшее изучение.

По нашему мнению, из анализа литературных данных, проведенного диссертантом, логически вытекает целесообразность постановки тех конкретных задач, которые решаются в настоящей диссертационной работе Кузамишева А.Г.

Вторая глава посвящена исследованию, проведенному диссертантом по нахождению размерной зависимости поверхностного натяжения наночастиц $\sigma(r)$ сферической формы. Рассмотрена однокомпонентная система, состоящая из двух фаз: α -фазы (сферическая наночастица) и β -фазы (макроскопическая среда), т.е. исследовалась двухфазная система, состоящая из дисперсной частицы и дисперсионной среды. Для нахождения искомой зависимости $\sigma(r)$ применяя метод слоя конечной толщины, который является классическим методом термодинамики поверхности. Автором диссертационной работы получено уравнение, описывающее зависимость поверхностного натяжения от размера сферических наночастиц при их взаимодействии с массивной фазой при условии постоянства давления в ней. При этом, данное соотношение достаточно корректно учитывало размерные эффекты при определении температуры фазового равновесия.

В этой же главе был выявлен эффект немонотонного изменения поверхностного натяжения в зависимости от радиуса кривизны поверхности, который наблюдался исключительно при изобарном процессе в отличие от изотермических условий. Было установлено, что максимум поверхностного натяжения смещается в сторону меньших размеров радиуса кривизны, а сами значения поверхностного натяжения понижаются при учете размерных зависимостей молярных объемов и скачков энтропий плавления.

Соискатель провел численные расчеты для жидких нанок капель 14-ти металлов с использованием полученного уравнения для размерной зависимости поверхностного натяжения, которые также подтвердили существование немонотонной зависимости $\sigma(r)$.

Третья глава диссертации посвящена изучению влияния размера на температуру плавления однокомпонентных металлических наночастиц. Автор провел последовательное рассмотрение зависимости температуры плавления наночастиц от их размера, а также температуры плавления на основе метода Гиббса с использованием концепции о разделяющих поверхностях. Была рассмотрена система, состоящая из α -фазы (твердая наночастица) и β -фазы (собственный жидкий расплав). Было получено уравнение размерной зависимости температуры плавления для такой системы. При этом оно было согласовано с выражением для размерной зависимости поверхностного натяжения, полученного во второй главе представленной диссертации. Автор также рассмотрел частные случаи, которые вытекают из этого уравнения при тех или иных допущениях и предположениях, в том числе и для очень малых

частиц.

В этой же главе было получено выражение для размерной зависимости температуры тройной точки в однокомпонентной системе, состоящей из α , β и γ -фаз. В качестве α -фазы рассматривалась твердая металлическая наночастица, β -фазы — жидкость, а γ -фазы — пар макроскопического размера. Было установлено, что температура тройной точки уменьшается с увеличением кривизны поверхности натяжения, разделяющей твердую и жидкую фазы.

С использованием полученных соотношений соискатель провел численные расчеты для размерной зависимости температуры плавления для наночастиц олова, золота, платины и алюминия, которые показали хорошее совпадение с экспериментальными данными, имеющимися в литературе.

В четвертой главе диссертационной работы Кузамишева А.Г. с использованием термодинамики дисперсных систем были рассмотрены размерные зависимости таких калорических величин, как теплота и энтропия плавления. В этой главе были получены соотношения размерных зависимостей скачков энтропии и теплоты плавления дисперсной частицы сферической формы в изобарических условиях для макроскопической фазы и для наночастиц с заданной степенью дисперсности, по которым также были проведены численные расчеты. Они показали монотонное уменьшение теплоты и энтропии плавления с уменьшением радиуса поверхности натяжения металлических однокомпонентных наночастиц.

Заключительная пятая глава представленной работы посвящена изучению термического расширения монометаллических наночастиц в зависимости от их размера. Диссертант рассматривает влияние размера на объемный коэффициент термического расширения наночастицы сферической формы, находящейся в равновесии с окружающей средой. В качестве такой частицы берется металлическая наночастица, находящаяся в собственном паре макроскопического размера.

С помощью полученного соотношения для зависимости коэффициента термического расширения наночастиц от их размера при постоянстве давления в макроскопической фазе были проведены численные расчеты для металлических наночастиц свинца и олова, имеющих сферическую форму, которые показали хорошее совпадение вычисленных значений коэффициента объемного расширения с имеющимися литературными данными.

В заключении диссертации приводятся основные выводы по работе.

Оценка новизны и достоверности диссертационной работы. Научная новизна диссертации Кузамишева А.Г. заключается в следующем:

1) в работе впервые получено уравнение размерной зависимости поверхностного натяжения однокомпонентной наночастицы, из которого следует существование двух основных типов зависимости — монотонная и немонотонная с максимумом;

2) был обнаружен эффект смещения максимума поверхностного натяжения в диапазон меньших радиусов кривизны поверхности натяжения, что объясняется фактом учета размерных зависимостей молярных объемов и

скачков энтропии в процессе плавления;

3) были получены новые соотношения для размерных зависимостей температуры плавления и температуры тройной точки дисперсных частиц в однокомпонентной системе твердая наночастица-жидкий расплав-насыщенный пар;

4) получены новые соотношения для размерных зависимостей теплофизических свойств однокомпонентных наночастиц, а именно: энтропии и теплоты плавления, а также коэффициента термического расширения.

Достоверность и надежность полученных в диссертации результатов, обеспечивается в первую очередь, лежащими в основе всего исследования фундаментальными положениями термодинамики поверхностных и межфазных явлений с плоскими и искривленными границами раздела, а также использованием классического метода двух разделяющих поверхностей: поверхности натяжения и эквимолекулярной разделяющей поверхности, проведенных внутри межфазного слоя.

В ходе проведенного исследования были получены соотношения для нахождения размерных зависимостей поверхностного натяжения и температуры плавления однокомпонентных наночастиц, находящихся в жидкой макроскопической фазе, из которых, как частные случаи получаются известные соотношения Толмена, Русанова и Гиббса-Томсона.

По всем полученным соотношениям для нахождения размерных зависимостей теплофизических характеристик однокомпонентных наночастиц, диссертантом были проведены численные расчеты для ряда металлических наночастиц сферической формы, которые показали достаточно хорошее совпадение с экспериментальными и теоретическими данными, представленными в научной литературе.

К работе имеются некоторые **замечания и вопросы**:

1) В проведенном исследовании соискатель рассматривал частицы, имеющие только сферическую форму. Можно ли применить используемый подход для получения размерных зависимостей нанообъектов других форм?

2) В диссертации используются одинаковые обозначения для радиуса частицы и радиуса поверхности натяжения, тогда как это разные параметры.

3) В третьей главе, посвященной получению соотношений для размерных зависимостей температуры плавления и температуры тройной точки в подписях к рисункам 3.1, 3.2 и 3.3 фигурирует уравнение (3.5) по которому соискатель проводил расчеты и которые сравниваются с литературными данными. Однако в этой главе отсутствует соотношение под таким номером.

4) В диссертации используются разные обозначения одних и тех же величин, например, температуры плавления: T_m и $T_{пл}$.

5) В конце диссертации соискатель приводит список сокращений некоторых величин, например, поверхностное натяжение – ПН и т.п. Обычно принято приводить такие сокращения в начале работы, а в конце давать различные приложения.

Заключение по диссертации

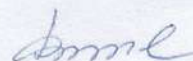
Замечания, указанные выше, не снижают в целом положительное впечатление от диссертационной работы Кузамишева А.Г. Она является законченной научно-квалификационной работой и выполнена на достаточно актуальную тему, написана грамотно, с соблюдением соответствующих рекомендаций по структуре, оформлению литературы и расшифровке обозначений. Вместе с тем, имеются отдельные ошибки и упущения по оформлению (знаки препинания, переносы, отдельные фразы, некоторые повторы в тексте и др.), которые являются несущественными и легко устранимыми.

Автореферат диссертации и опубликованные соискателем научные работы в полном объеме отражают содержание диссертации. Научные положения, выводы и рекомендации, приведенные в диссертации, вполне обоснованы. Достоверность и новизна результатов не вызывает сомнений.

Считаю, что диссертационная работа Кузамишева А.Г. «Размерные зависимости теплофизических свойств однокомпонентных металлических наночастиц» отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней и соответствует паспорту специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника по физико-математическим наукам (пункты 1, 2), а ее автор, Кузамишев Алим Гисаевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника.

Официальный оппонент

Элимханов Джабраил Зайндиевич



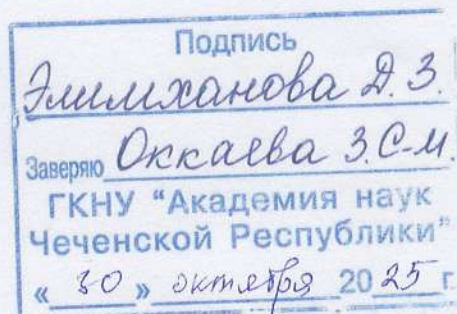
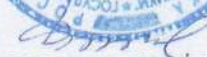
кандидат физико-математических наук, доцент, директор Центра проблем материаловедения государственного казенного научного учреждения «Академия наук Чеченской республики»

Шифр и наименование специальности, по которой официальный оппонент защитил диссертацию: 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Адрес: 364024, Чеченская республика, г. Грозный,
проспект им. М. Эсамбаева, 13
Тел.: +7 (928) 087 42 70
E-mail: edzhabrail@mail.ru



Даю свое согласие на обработку персональных данных



30 октября 2025 г.