

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по экономике
федерального государственного
бюджетного образовательного
учреждения высшего образования
«Тверской государственный
университет»



Н.А. Заривной

27.10. 2025 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» о диссертационной работе 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

Актуальность темы данной диссертации обусловливается тем, что наночастицы, благодаря своим уникальным свойствам, находят разнообразное практическое применение, включая катализ, сенсорику, электронику и энергетику. Особое внимание уделяется металлическим наночастицам, которые обладают высокой поверхностной активностью и специфическими физико-химическими характеристиками. Как известно, уменьшение размеров таких частиц ниже определённого порога приводит к кардинальному изменению их свойств, что открывает новые возможности для их широкого применения в новых технологиях. При этом развитие методов расчета свойств наночастиц, включая теплофизические

характеристики, необходимо как для разработки нанотехнологий, так и для обеспечения стабильности наночастиц и наноструктурированных материалов в процессе их дальнейшего применения.

Актуальность развития теоретических подходов обусловливается в частности тем, что экспериментальное изучение наночастиц затруднительно из-за их малых размеров и высокой стоимости экспериментов. Поэтому огромное значение приобретают теоретические методы и компьютерное моделирование, включая методы молекулярной динамики и Монте-Карло. В представленной диссертации применялся теоретический метод исследования, а именно – термодинамический, который базируется на применении метода двух разделяющихся поверхностей: поверхности натяжения и эквимолекулярной разделяющей поверхности, проведенных внутри межфазного слоя. При выборе такой методологии для рассмотрения искривленных границ раздела между дисперсной частицей и дисперсионной средой диссертант достаточно успешно переходит от классической термодинамики поверхностей Гиббса к наноразмерным объектам с учетом возникающих специфических физических эффектов.

При этом, из полученных выражений для размерных зависимостей поверхностного натяжения и температуры плавления однокомпонентных наночастиц, находящихся в жидкой материнской фазе, как частные случаи получаются классические уравнения – формулы Толмена и Русанова, а также известное уравнение Гиббса-Томсона, что говорит о надежности и достоверности результатов, представленных в диссертационной работе. Исходя из вышеизложенного, тема диссертационной работы Кузамишева А.Г. актуальна как с научной точки зрения, так и с точки зрения практической значимости полученных результатов

Перейдем к краткому анализу содержания диссертации, которая состоит из введения, пяти глав с выводами, заключения, общих выводов, а

также списка цитируемой литературы, включающего 205 наименований. Объем работы составляет 149 страниц, включая 33 рисунка и 8 таблиц.

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, кратко описано современное состояние исследований в данной области науки, сформулированы цели и задачи диссертации, перечислены полученные результаты, обоснована их новизна, теоретическая и практическая значимость, а также их достоверность. Также в этом разделе приведены положения, выносимые на защиту.

В первой главе соискатель представил литературный обзор научных работ, посвященных изучению существующих теоретических и экспериментальных методов исследования размерных зависимостей теплофизических свойств наночастиц. Проведенный обзор подтвердил актуальность и перспективность применения термодинамического подхода для изучения теплофизических характеристик искривленных границ раздела. В обзорной главе делается вывод, что экспериментальные данные по изучению размерных зависимостей поверхностного натяжения, температуры, теплоты и энтропии плавления, а также коэффициента термического расширения в основном посвящены плоским границам раздела, в то время как, аналогичное изучение систем с искривленными границами раздела достаточно затруднено из-за специфики проведения эксперимента в условиях тонкого межфазного слоя. Также автор диссертационной работы отметил существование качественных различий в литературных данных по размерной зависимости поверхностного натяжения и отметил, что большинство уравнений для нахождения этой зависимости являются разновидностями известной формулы Толмена. Соискатель также отмечает недостаток работ, посвященных исследованиям размерной зависимости теплоты и энтропии плавления.

Таким образом, в первой главе Кузамишев А.Г. обосновывает необходимость и целесообразность изучения зависимостей теплофизических

свойств однокомпонентных частиц от их размера с использованием термодинамического подхода.

Во второй главе на основе термодинамического подхода было получено уравнение, описывающее зависимость поверхностного натяжения от размера сферических наночастиц при их взаимодействии с массивной фазой при условии постоянства давления в ней. При этом учитывался эффект влияния температуры на фазовое равновесие в рассматриваемой системе. Автором диссертационной работы было установлено, что максимум поверхностного натяжения смещается в сторону меньших радиусов кривизны поверхности натяжения, а значения этой величины понижаются при учете размерных зависимостей молярных объемов и скачков энтропий плавления. В этой же главе с использованием полученного уравнения были проведены численные расчеты для жидких нанокapель 14-ти металлов.

Третья глава посвящена изучению зависимости температуры плавления наночастиц от их размера на основе гиббсовского подхода с использованием представлений о разделяющих поверхностях. В результате такого детального рассмотрения было выведено уравнение, описывающее зависимость температуры плавления сферических наночастиц, находящихся на границе с макроскопической жидкой фазой. Из него, как частные случаи, вытекают соотношения, которые связывают температуру плавления с размером частицы, а также классическое уравнение Гиббса-Томсона. Также в этой главе было получено новое соотношение для размерной зависимости температуры плавления в однокомпонентной трехфазной системе: твердая наночастица – жидкий расплав – насыщенный пар.

С использованием выражений, полученных в третьей главе, соискатель провел численные расчеты размерной зависимости температуры плавления для наночастиц Sn, Au, Pt и Al, которые показали хорошее согласие с экспериментальными данными, имеющимися в научной литературе.

В четвертой и пятой главах диссертации приведены результаты

изучения размерных зависимостей энтропии и теплоты плавления, а также коэффициента теплового расширения однокомпонентных металлических наночастиц. Были получены выражения для зависимостей данных теплофизических свойств дисперсных частиц сферической формы, для которых были проведены численные расчеты. Так, по результатам этих расчетов были сделаны выводы, что энтропия и теплота плавления монометаллических наночастиц олова и натрия уменьшаются с уменьшением поверхности натяжения этих частиц. Расчеты, проведенные для размерной зависимости коэффициента теплового расширения для металлических наночастиц Pb и Sn, имеющих сферическую форму, продемонстрировали рост этого коэффициента с уменьшением радиуса поверхности натяжения, что совпадает с качественными выводами, имеющимися в соответствующей литературе.

В заключении диссертационной работы приводятся **основные результаты и выводы.**

Научная новизна результатов диссертационной работы заключается в том, что в ней получены новые уравнения и соотношения для расчета теплофизических свойств однокомпонентных металлических наночастиц, среди которых:

- уравнение, отвечающее зависимости поверхностного натяжения монодисперсной частицы от радиуса кривизны поверхности разрыва, находящейся в макроскопической дисперсионной фазе, из которого следуют два основных типа зависимости (монотонная и немонотонная с максимумом);
- выражения для размерных зависимостей температуры плавления и температуры тройной точки дисперсных частиц сферической формы в однокомпонентной системе: твердая наночастица – жидкий расплав – насыщенный пар;
- новые соотношения для размерных зависимостей энтропии и теплоты

плавления, а также коэффициента термического расширения монодисперсных наночастиц сферической формы, находящихся в макроскопической фазе в изобарических условиях.

Также автором диссертационной работы по полученным соотношениям были проведены численные расчеты важнейших теплофизических свойств однокомпонентных металлических наночастиц в зависимости от их размера, а именно: поверхностного натяжения, температуры, теплоты и энтропии плавления, а также коэффициента теплового расширения, которые находят широкое применение в материаловедении, нанотехнологиях и ядерной энергетике.

Следует отметить теоретическую и практическую значимость работы. Новые выражения, полученные Кузамишевым А.Г. в диссертационной работе, для нахождения размерных зависимостей теплофизических свойств наночастиц в однокомпонентных системах (поверхностного натяжения, температуры, теплоты и энтропии плавления, а также коэффициента теплового расширения), могут быть использованы для решения прикладных задач в области нанотехнологий, в частности для разработки новых материалов и технологий, включая солнечные элементы, хранилища водорода и сенсоры. Теоретическая значимость изучения размерных зависимостей теплофизических свойств связана с возможностью глубже понять процессы фазового равновесия и межфазных явлений, протекающих на искривленных границах раздела.

Значительный интерес представляют численные расчеты, проведенные с использованием полученных соотношений для металлических наночастиц, которые могут быть полезны при разработке новых технологий получения наночастиц и наноструктурированных материалов, а также оптимизации процессов синтеза и применения наночастиц.

Достоверность полученных соискателем результатов, обоснованность положений, выносимых на защиту и сформулированных выводов работы,

обеспечены:

- использованием в качестве входных данных фундаментальных положений термодинамики поверхностных и межфазных явлений в гетерогенных системах;
- анализом всех полученных в работе соотношений по нахождению термодинамических свойств плоской и искривленной границ раздела конденсированных фаз, предельных случаев этих соотношений; этот анализ показал их совпадение с известными формулами и уравнениями классической термодинамики поверхности;
- совпадением построенных фазовых диаграмм состояния в макроскопическом случае и результатов по расчету нанодиаграмм с имеющимися в литературе теоретическими и экспериментальными данными.

Таким образом, диссертационная работа **Кузамишева А. Г.** производит благоприятное впечатление. Вместе с тем, имеются некоторые отмеченные ниже замечания:

1. Во введении, отмечая новизну, автор неоднократно упоминает новые выражения, новые соотношения. Следовало бы при этом кратко отметить преимущества, значение новых соотношений по сравнению с формулами, результатами, полученными ранее другими авторами.

2. При использовании гиббсовского подхода возникает проблема определения параметра Толмена, который вводится разными способами. Знак и численные значения этого параметра до сих пор остаются предметом дискуссий. Насколько успешно эта проблема была решена в данной работе, остается не вполне ясным.

3. Параметр Толмена крайне редко оценивается авторами. Именно поэтому любые новые результаты заслуживают внимания. Было бы крайне уместным в данной работе провести сравнение с оценками других авторов, например, с результатами кандидатской диссертации Соколова Д.Н.

«Изучение термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: теория и компьютерное моделирование» (2016) или иностранными источниками (DOI: 10.1063/1.2140268), а также хотя бы кратко описать зависимость результатов при применении альтернативных оценок параметра Толмена (DOI: 10.1103/PhysRevE.105.015301).

4. Последняя глава диссертации посвящена изучению размерной зависимости коэффициента теплового расширения металлических наночастиц. В связи с этим, целесообразно было бы обсудить, хотя бы на понятийном уровне, различия между механическим поверхностным натяжением и термодинамическим поверхностным натяжением в твёрдых телах. Кроме того, в разделе 5.3 диссертационной работы представлены оценки коэффициента объёмного расширения, результаты в частности сравниваются с результатами работы [203]. Было бы полезным провести сравнение и с результатами молекулярно-динамического моделирования [146], поскольку автор диссертации знаком с данным исследованием.

5. В уравнениях, полученных в диссертации, как правило, в качестве характеристики размера наночастицы используется радиус поверхности натяжения. Следовало бы пояснить, как он соотносится с геометрическим размером малой частицы?

6. Не ясно, зачем в подписи к рис. 2.1 упоминается число компонентов: ведь диссертация посвящена только однокомпонентным системам.

Сделанные замечания не умаляют общее положительное впечатление от данной работы. Диссертационная работа «Размерные зависимости теплофизических свойств однокомпонентных металлических наночастиц» является законченной научно-квалификационной работой, посвященной актуальной теме, характеризуется научной новизной, теоретической и практической ценностью. Она выполнена на достаточно высоком научном уровне и вносит существенный вклад в дальнейшее развитие исследований,

связанных с изучением теплофизических свойств однокомпонентных наночастиц. Работа Кузамишева А.Г. создает надежную базу для решения многих актуальных задач фундаментального и прикладного характера в различных отраслях знания, в том числе в области материаловедения, разработки нанотехнологий, ядерной энергетики и некоторых других перспективных направлениях развития техники и технологии.

Результаты диссертации Кузамишева А.Г. могут быть использованы в научных и учебных учреждениях, проводящих исследования в области синтеза металлических наночастиц, а также могут быть полезны для научных групп, ведущих практические исследования по изучению теплофизических свойств металлических наночастиц, среди которых ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», ФГБУН «Институт физики твердого тела Российской академии наук», ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет» и ряде других учреждений, в которых проводятся исследования по близкой тематике.

Содержание диссертации полностью отражено в опубликованных научных работах, а автореферат соответствует содержанию диссертационной работы и дает достаточно полное представление о полученных результатах.

Диссертационная работа А.Г. Кузамишева отвечает требованиям Положения «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 (в актуальной редакции), 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.

Диссертационная работа Кузамишева А.Г. «Размерные зависимости теплофизических свойств однокомпонентных металлических наночастиц» и отзыв на нее рассмотрены и утверждены на заседании кафедры общей

физики физико-технического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» (протокол № 2 от 21» октября 2025 года).
Присутствовало: 12 человек. Результаты голосования: За – единогласно.

Профессор кафедры общей физики физико-технического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет», доктор физико-математических наук, профессор, Заслуженный работник высшей школы РФ

Самсонов Владимир Михайлович Самсонов

Адрес: 170002, Тверская область, г. Тверь, ул. Садовый пер., 35

Тел.: +79520681298

E-mail: samsonoff@inbox.ru



Профессор кафедры общей физики физико-технического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет», доктор физико-математических наук, доцент

Сдобняков Николай Юрьевич Сдобняков

Адрес: 170002, Тверская область, г. Тверь, ул. Садовый пер., 35

Тел.: +79038005050

E-mail: nsdobnyakov@mail.ru

