

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ
на диссертационную работу Проценко Ксении Романовны
**«ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЕ В ЖИДКОСТИ ПРИ УМЕРЕННЫХ
ПЕРЕОХЛАЖДЕНИЯХ И ПЕРЕГРЕВАХ
(молекулярно-динамическое моделирование)»**,
представленную на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Как в эксперименте, так и при компьютерном моделировании, область состояний, в которой может быть проведено исследование зародышеобразования, ограничена пространственно-временными масштабами. В эксперименте эти масштабы лимитируют технические возможности метода исследования, при компьютерном моделировании – быстродействие и производительность ЭВМ. Диапазон частот зародышеобразования $10^{26} - 10^{31} \text{ м}^{-3}\text{с}^{-1}$ (область умеренных переохлаждений и перегревов жидкой фазы) пока недоступен ни натурному эксперименту, ни прямому молекулярно-динамическому моделированию. Изучению кинетики зародышеобразования в этой области параметров состояния, а также свойств зародышей кристаллической и паровой фаз при частотах зародышеобразования как ниже, так и выше отмеченных ранее посвящено диссертационное исследование Проценко К. Р. Сказанным определяются актуальность и научная значимость поставленной задачи.

Понижение частоты зародышеобразования при молекулярно-динамическом моделировании достигнуто введением в алгоритм стохастических элементов. Этот прием, метод выборки прямого потока, разработан в теории химических реакций. Здесь он используется для изучения зарождения кристаллической и паровой фаз в жидкости. Показано, что при больших растяжениях результаты такого подхода хорошо согласуются с прямым молекулярно-динамическим моделированием, а при малых – с экспериментальными данными по кавитации в оживленных инертных газах. Термодинамический аспект зародышеобразования изучен методом внедрения зародыша новой фазы. Данный подход позволил исследовать критические зародыши в той области параметров состояния, где в натурном эксперименте гомогенное зародышеобразование подавлено естественным радиационным фоном.

При сопоставлении полученных данных с классической теорией зародышеобразования выявлен «размерный эффект» и установлено, что поверхностная свободная энергия критических полостей в растянутой жидкости меньше, чем на плоской межфазной границе жидкость-пар. Ее значения для пузырьков с радиусами большими (0.3-0.7) нм могут быть описаны

асимптотической формулой Толмена. У критических кристаллических зародышей ситуация обратная. При температурах выше температуры тройной точки их эффективная поверхностная свободная энергия превышает плоский предел. Здесь в разложении поверхностной свободной энергии необходим учет квадратичного по кривизне члена.

Метод молекулярной динамики, в отличие от натурного эксперимента, позволяет проверить классическую теорию зародышеобразования не только по конечному результату – частоте зародышеобразования, но и в деталях. Прогнозы К.Р. определены размеры критических зародышей кристаллической и паровой фаз, коэффициенты их диффузии. Оценены возможности традиционно используемого для коэффициента диффузии зародышей приближения большой вязкости (уравнений Зельдовича и Тарнбалла-Фишера).

Результаты диссертационной работы Проценко К.Р. опубликованы в четырех журнальных статьях, которые входят в базы данных Scopus и Web of Science, одна из них имеет индекс Q1, две – Q2. Результаты доложены на 14 научных конференциях, 4 из которых имеют статус международных.

Работа входила в планы научно-исследовательских работ Института теплофизики Уральского отделения РАН и поддерживалась грантами РФФИ № 18-08-00403, № 18-38-00823 и РНФ № 14-19-00567, № 18-19-00276, № 18-19-00276-П.

Разработка программного обеспечения и все молекулярно-динамические расчеты выполнены Проценко К. Р. лично. Она проявила себя как активный исследователь, способный формулировать и эффективно решать научные задачи.

Диссертационная работа «Зародышеобразование в жидкости при умеренных переохлаждениях и перегревах (молекулярно-динамическое моделирование)» соответствует паспорту специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника, а Проценко Ксения Романовна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Байдаков Владимир Георгиевич
доктор физико-математических наук, профессор
научный руководитель ФГБУН Институт теплофизики
Уральского отделения РАН
21.03.2022
620016, г. Екатеринбург
ул. Амундсена 107а
+7(343)2678806
email: baidakov@itpuran.ru



Судья Байдаков В.Г. заверено
Начальник отдела кадров ФГБУН ИТФ УрО РАН - Семенов А.А.
21.03.2022

