

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертации
Проценко Ксении Романовны
«Зародышеобразование в жидкости при умеренных
переохлаждениях и перегревах
(молекулярно-динамическое моделирование)»,
представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
1.3.14. Теплофизика и теоретическая теплотехника

Метод молекулярной динамики все шире применяется в исследовании физики конденсированной материи и, в частности, жидкости. По мере своего развития и возрастания возможностей вычислительной техники он переходит от простейших задач, связанных с расчетом макроскопических свойств на основе решения систем уравнений движения нескольких десятков частиц ко все более сложным задачам. Оппоненту посчастливилось в течение более полувека наблюдать, как этот процесс происходил в исследовательской группе, руководимой профессором В.Г.Байдаковым. Долгое время существовало убеждение, что молекулярно-динамическое моделирование процесса спонтанного зародышеобразования при фазовых переходах 1-го рода не осуществимо вследствие ограниченных возможностей современных компьютеров. Однако в течение последних 15-20 лет появилось несколько подходов, позволяющих обойти указанное ограничение и рассчитать высоту активационного барьера и частоту зародышеобразования. На сегодняшний день эти расчеты ограничены частотами порядка 10^{31} - 10^{35} $\text{м}^{-3}\text{с}^{-1}$, что на 10 порядков превышает верхнюю границу натуральных экспериментов. Отмеченный разрыв делает невозможным прямое сопоставление результатов компьютерных экспериментов с натурными. Однако исследования С.П.Проценко, А.О.Типеева, Е.О.Розанова и Г.С.Болтачева подготовили появление защищаемой сегодня диссертации. Работа К.Р.Проценко ставит своей целью исследование кинетики зарождения и свойств зародышей новой фазы при кристаллизации и кавитации жидкости методом молекулярно-динамического моделирования в области умеренных переохлаждений и перегревов. Полагаю, что эта задача весьма *актуальна* и ее решение может существенно продвинуть как теорию гомогенной нуклеации, так и методы молекулярно-динамического моделирования двухфазных систем.

Судя по тексту диссертации, для проведения требуемых расчетов К.Р.Проценко пришлось «адаптировать известное программное обеспечение с открытым исходным кодом SSAGES к исследованию процесса зарождения новой фазы в переохлажденной и перегретой жидкости методом выборки прямого потока (ВПП)» и разработать программное обеспечение для применения метода внедрения зародыша новой фазы (ВЗНФ) на основе имеющегося пакета LAMMPS для молекулярно-динамического моделирования кристаллизации жидкости в области умеренных

переохлаждений. Однако единственное указание на суть данной адаптации и разработки программного обеспечения, найденное оппонентом на с.43, состоит в том, что «Добавлена возможность использования метода ВПП в многопроцессорном режиме и определения числа частиц в наибольшем кристаллическом кластере. Для ускорения расчета одновременно выполнялось моделирование 64 независимых систем. Параллельные вычисления реализованы с применением программного интерфейса MPI». Полагаю, что стоило более подробно описать эту часть ее работы и конкретизировать свой личный вклад. Это позволило бы более объективно судить о **достоверности результатов** ее молекулярно-динамических расчетов. О тщательности проведенных вычислений свидетельствует, в частности, то, что при моделировании кавитации автор использует 2 способа создания паровой полости, сравнивает их результаты и убеждается, что с точностью 5% они согласуются. Обилие совпадений или фактов близости полученных в работе результатов имеющимся данным натуральных и компьютерных экспериментов позволяет заключить, что принятый алгоритм расчетов в целом адекватен решаемым задачам и полученные К.Р.Проценко величины в большинстве случаев достоверны.

В рецензируемой диссертации реализованы весьма продуктивные алгоритмы исследования гомогенной нуклеации и получены многочисленные и зачастую нетривиальные выводы об особенностях этого процесса. Расчеты проводились для аргона, поскольку именно для него параметры потенциала межчастичного взаимодействия известны с наибольшей точностью и есть возможность сопоставить полученные результаты с некоторыми данными других исследований.

Отмечу те из них, которые показались мне наиболее интересными:

- с использованием метода ВПП получены температурные и барические зависимости частоты зародышеобразования в интервале от 10^{21} до $10^{31} \text{ м}^{-3}\text{с}^{-1}$ при отрицательных и положительных давлениях и при температурах выше и ниже температуры тройной точки.
- исследована форма спонтанно возникающих кристаллических зародышей и выявлено ее отклонение от идеальной сферы; с использованием сферической аппроксимации установлен эффективный радиус таких зародышей. Показано, что ростом степени метастабильности отклонения формы зародышей от сферической нарастают.
- обнаружено, что описание зависимости эффективной поверхностной свободной энергии критических зародышей кристаллической фазы от кривизны межфазной границы $1/R$ (R - радиус зародыша) требует учета квадратичного слагаемого по $1/R$.

В качестве замечания по работе К.Р.Проценко обращаю внимание на ограничения метода ВЗНФ, который в диссертации использовался для получения наиболее полной информации о зародыше новой фазы. Одно из главных касается определения разделяющей поверхности при расчете натяжения на его искривленной границе. Другое связано с формой внедренного зародыша, которая в случае кавитации постулируется

сферической, а при кристаллизации – гранецентрированной кубической, что принципиально отличается от результатов моделирования. Эти ограничения, по мнению оппонента, требуют более детального анализа результатов работы.

И еще одно замечание. На с.25 диссертант утверждает, что потенциал Леннард-Джонса, используемый в ее работе, «хорошо описывает поведение...например, инертных газов и металлов». По мнению оппонента, применительно к металлам этот тезис далеко не очевиден.

Кроме того, при чтении диссертации К.Р.Проценко у меня возникло несколько вопросов, ответ на которые хотелось бы услышать в ходе защиты. В частности,

- откуда у диссертанта появились программные пакеты LAMMPS и SSAGES, на какой вычислительной технике производилось моделирование;

- какова была характерная для ее компьютерных экспериментов продолжительность расчетов и чем определялось количество частиц в моделируемой системе (между 5000 и 300000, согласно тексту работы);

- на стр.38 указывается, что «в качестве параметра порядка использовался размер наибольшего кластера связанных частиц, относящихся к зарождающейся фазе...Если у частицы i было более 11 связей, то она рассматривалась как кристаллоподобная». *С чем связан такой критерий?*

- на стр.55 сказано, что «постоянная решетки в кластере определялась плотностью кристаллической фазы при заданных температуре и давлении»; *имеется в виду внешнее давление или давление под искривленной поверхностью?*

Отмеченные недостатки не существенно снижают общее положительное впечатление о диссертационной работе К.Р.Проценко на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. В этой научно-квалификационной работе смоделированы процессы гомогенной нуклеации при кристаллизации и кавитации в метастабильной жидкости и рассчитаны важные количественные характеристики этого явления. Диссертация соответствует **паспорту специальности 1.3.14. Теплофизика и теоретическая теплотехника**, в частности **пункту 1 «Фундаментальные, теоретические и экспериментальные исследования молекулярных и макросвойств веществ в твердом, жидком и газообразном состоянии для более глубокого понимания явлений, протекающих при тепловых процессах и агрегатных изменениях в физических системах», и отрасли наук – физико-математические**. Практическая ценность данного исследования связана с возможностью использования его результатов при описании капиллярных явлений в нано- и мезопористых системах, а также процессов кристаллизации и кавитации в наножидкостях.

Считаю, что диссертационная работа «Зародышеобразование в жидкости при умеренных переохлаждениях и перегревах (молекулярно-динамическое моделирование)» соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении

ученых степеней УрФУ, а ее автор К.Р.Проценко заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14. Теплофизика и теоретическая теплотехника.

Автореферат отражает основное содержание диссертации.

Официальный оппонент

Доктор физико-математических наук по специальности 01.04.14 Теплофизика и теоретическая теплотехника, профессор, профессор кафедры физики, технологии и методики обучения физике и технологии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уральский государственный педагогический университет»

Контактная информация:

Почтовый адрес: 620017, г.Екатеринбург, пр.Космонавтов, 26, УрГПУ.

Факс: (353) 336-12-42.

Сайт: www.uspu.ru.

Телефон: (343) 218-06-41.

E-mail: pspopel@mail.ru.


15 декабря 2022 г.

Попель Петр Станиславович



