

ОТЗЫВ

официального оппонента

Рыльцева Романа Евгеньевича

на диссертацию 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

Актуальность работы. Развитие методов атомистического моделирования конденсированных систем является важнейшей задачей теории конденсированного состояния и наук о материалах. Данная задача особенно актуальна для описания таких явлений, которые с трудом поддаются экспериментальному изучению. Исследование процессов зародышеобразования в перегретых/переохлажденных жидкостях является ярким примером таких задач. Действительно, прямое экспериментальное изучение нуклеации на атомном уровне разрешения практически невозможно при текущем уровне развития экспериментальных методик. Естественным выбором в такой ситуации является изучение данных процессов исходя из результатов атомистического моделирования, поскольку молекулярная динамика позволяет получать траектории отдельных частиц и, в принципе, дает исчерпывающее описание любых микроскопических процессов. История изучения зародышеобразования методами молекулярной динамики насчитывает десятки лет. Однако большинство результатов в данной области получено при рассмотрении сильных перегревов/переохлаждений, когда частоты нуклеации сопоставимы с временными масштабами, доступными атомистическому моделированию. Процессы зародышеобразования при умеренных степенях метастабильности исследованы значительно хуже и в этой области имеется масса методических трудностей и спорных вопросов. В связи с этим тема диссертационного исследования К.Р. Проценко, безусловно, является актуальной. Основная цель работы – молекулярно-динамическое моделирование зародышеобразования в Леннард-Джонсовской жидкости при умеренных перегревах и переохлаждениях. Результаты, полученные в работе, обладают несомненной новизной и соответствуют мировому уровню исследований в данной области.

Структура и содержание работы. Работа Проценко К.Р. имеет типичную для кандидатских диссертаций структуру и объем. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Полный объем диссертации составляет 108 страниц с 44 рисунками и 10 таблицами. Список литературы содержит 165 наименований.

Во введении диссертации представлены актуальность исследования, цели и задачи, научная новизна, степень разработанности проблемы. Также здесь отражены теоретическая и практическая значимость работы, защищаемые положения. Первая глава представляет собой обзор литературы, в которой обсуждаются основные положения классической теории зародышеобразования и термодинамики поверхностных явлений. Сделан обзор работ, посвященных экспериментальному и теоретическому исследованию нуклеации в жидкостях. Во второй главе рассмотрены методические аспекты атомистического моделирования нуклеации, а также приводится обзор результатов, полученных для используемой в работе модели жидкости – модели Леннарда-Джонса. Оригинальные результаты, полученные автором, изложены в третьей и четвертой главах. Третья глава

посвящена моделированию кристаллизации в переохлажденной леннард-джонсовской жидкости, а четвертая – исследованию спонтанной кавитации в данной системе.

Наиболее значимые результаты. С использованием метода выборки прямого потока (ВПП) рассчитаны температурные и барические зависимости частоты зародышеобразования в жидкости системы Леннарда-Джонса в широких интервалах температур и давлений. Анализ результатов позволяет заключить, что метод ВПП может быть использован для расчета частоты зародышеобразования в интервале от 10^{21} до 10^{31} $\text{м}^{-3}\text{с}^{-1}$. Полученные результаты расширяют доступные интервалы частот зародышеобразования на многие порядки по сравнению с методами прямого моделирования нуклеации. Это позволяет получить новую информацию о механизмах зародышеобразования в области трудной как для экспериментальных, так и для теоретических методов, а также дает оценку возможностей используемого метода, важную для дальнейшего его применения к более сложным системам.

Еще одним важнейшим результатом является вывод о возможности существенного рассогласования между данными молекулярно-динамического моделирования и классической теории зародышеобразования при расчете частот зародышеобразования. При этом отличие данных моделирования и теории увеличивается с уменьшением температуры и достигает 5 порядков в случае кристаллизации и 18 порядков в случае кавитации. Анализ границ применимости общепринятой теории и причин обнаруженных отличий является важнейшим фундаментальным результатом.

Научная новизна. Диссертационная работа демонстрирует высокий уровень научной новизны. В частности, в работе впервые проведено молекулярно-динамическое исследование зародышеобразования в леннард-джонсовской жидкости при умеренных переохлаждениях и перегревах. Также впервые установлена размерная зависимость эффективной поверхностной свободной энергии критических кристаллических зародышей и установлены границы применимости приближений, традиционно используемых для ее описания.

Теоретическая значимость. Основным результатом, имеющим высокую теоретическую значимость, является обнаруженное автором рассогласование данных молекулярной динамики и классической теории нуклеации по частоте зародышеобразования. Анализ полученных результатов позволяет определить границы применимости классической теории к описанию процессов при умеренных перегревах и переохлаждениях.

Практическая значимость работы заключается в возможности использования полученных результатов и развитых методов при исследовании процессов зародышеобразования в практически важных материалах, описываемых более сложными межчастичными потенциалами. Примером может служить изучение процессов аморфизации в металлических сплавах и разработка критериев предсказания их стеклообразующей способности. При таких исследованиях оценка частот зародышеобразования является важнейшей задачей.

Достоверность результатов подтверждается использованием проверенных методов атомистического моделирования, в частности, пакета для молекулярно-динамических расчетов LAMMPS. В работе производится сравнение полученных результатов, с данными, полученными другими методами. Также немаловажную роль в достоверности результатов играет многолетний опыт исследования леннард-джонсовских систем, накопленный в научной школе Владимира Георгиевича Байдакова, являющегося научным руководителем работы.

Апробация работы. Работа прошла достаточную апробацию. Основные результаты диссертации докладывались, обсуждались и получили положительную оценку на 14 научных конференциях по тематике исследования, в том числе на 4 международных.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 4 статьи в рецензируемых научных журналах, включенных в перечень ВАК и индексируемых в базах WoS и Scopus. Хочется отметить достаточно высокий уровень журналов, в которых опубликованы основные результаты работы, среди которых журналы, входящие в Q1 и Q2.

Замечания и вопросы:

1. Можно ли использовать метод ВПП для оценки критического размера зародыша, например, определив его как $P(\lambda_{c+1}|\lambda_c) = 0.5$? Если да, то делались ли подобные оценки и как результат согласуется с результатами других методов?
2. В работе не обсуждается симметрия образующихся в жидкости зародышей. Всегда ли образующиеся зародыши имеют ГЦК структуру? Известно, что в системе Леннарда-Джонса ГЦК и ГПУ фазы имеют очень близкие энергии [см. например A.N. Jackson, A.D. Bruce, G.J. Ackland, Phys. Rev. E, 65, 036710 (2002)], что приводит к возможности конкуренции данных фаз при кристаллизации жидкости. Наблюдались ли последствия такой конкуренции при рассмотрении зародышеобразования?
3. В работе получено существенное отличие значений коэффициента диффузии зародышей, рассчитанных методом молекулярной динамики и оцененных по формуле Тарнбалла-Фишера (Таблица 3.4.). Можно ли сказать какое из приближений теории Тарнбалла-Фишера наиболее существенно нарушается при низких температурах?
4. Как можно объяснить систематическое отличие радиусов критических зародышей, полученных при различных способах получения затравочной кавитационной полости?

Заключение. Диссертационная работа Проценко К.Р. «Зародышеобразование в жидкости при умеренных переохлаждениях и перегревах (молекулярно-динамическое моделирование)» соответствует паспорту специальности 1.3.14. Теплофизика и теоретическая теплотехника и представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, выполненную на актуальную тему. Считаю, что диссертационная работа соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, а её автор Проценко Ксения Романовна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14. – «Теплофизика и теоретическая теплотехника».

Официальный оппонент, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела физической химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института металлургии Уральского отделения Российской академии наук

13.01.2023

Рыльцев Роман Евгеньевич

Адрес: 620016, Россия, Свердловская область, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101.
E-mail: rrylcev@mail.ru; Тел.: +7(343) 232-91-04.

Подпись Р.Е. Рыльцева зав
бюджетного учреждения науки И
академии наук, кандидат химичес

рь Федерального государственного
и Уральского отделения Российской

Долматов Алексей Владимирович