

ОТЗЫВ

официального оппонента 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

Диссертационная работа Проценко К.Р. посвящена исследованию фазовых переходов в переохлажденной и растянутой жидкости методом молекулярно-динамического моделирования.

Актуальность и научная значимость. Тема диссертации, несомненно, является актуальной с точки зрения исследования фундаментальных физических эффектов, связанных с зародышеобразованием в метастабильной жидкости. В работе в рамках молекулярно-динамического моделирования используются подходы, позволяющие изучать зародышеобразование при крайне низкой степени метастабильности. Наблюдение фазовых переходов в области таких состояний прямым молекулярно-динамическим моделированием требует чрезвычайно больших вычислительных затрат и на сегодняшний день ограничено снизу значением частоты зародышеобразования $\sim 10^{23} \text{ м}^{-3} \text{ с}^{-1}$, что выше значений частоты зародышеобразования, доступных большей части экспериментов. Методы, применяемые в диссертационной работе, позволяют существенно снизить эти затраты. Кроме того, применение указанных подходов позволило независимым образом определить, как кинетические (частота нуклеации), так и термодинамические (размер и поверхностная свободная энергия критического зародыша) параметры процессов кристаллизации и кавитации. Исследование проведено в широкой области температур, давлений и частот зародышеобразования.

Приведенные результаты обладают несомненной научной значимостью, позволяя глубже понять особенности и условия протекания процесса фазового перехода в метастабильной жидкости. В частности, данные по размерной зависимости поверхностной свободной энергии критических кристаллических зародышей и кавитационных полостей позволяют установить границы применимости макроскопического приближения классической теории зародышеобразования.

Обоснованность и достоверность полученных результатов подтверждается их сравнением с результатами независимых методик

молекулярно-динамического моделирования, в том числе сравнением с литературными данными.

Общая характеристика. Объем диссертационной работы составил 108 страниц, структурно она разделена на Введение, три главы, Заключение и Список литературы.

Во Введении приводится анализ актуальности и текущего состояния проблемы исследования, определены цели и задачи диссертационного исследования, отмечена его новизна, научная и практическая значимость.

Глава 1 также носит преимущественно вводный характер, здесь приведены базовые положения классической теории зародышеобразования. Сделан обзор работ, посвящённых исследованию зародышеобразования в жидкости как экспериментально, так и методами компьютерного моделирования.

Глава 2 посвящена техническим деталям моделирования и описанию методов, используемых в диссертационной работе. Модель представляет собой систему частиц, взаимодействие между которыми задается потенциалом Леннард-Джонса. Используются два метода, один из них позволяет рассчитать частоту зародышеобразования, а второй состоит во введении в метастабильную систему затравки новой фазы с целью оценить размер критического зародыша.

Глава 3 содержит результаты применения описанных во 2-ой главе методов к исследованию кристаллизации леннард-джонсовской жидкости. На нескольких изобарах/изотермах определены частота зародышеобразования, число частиц в критическом зародыше, коэффициент диффузии зародышей в пространстве их размеров. Результаты расчетов сопоставлены с классической теорией зародышеобразования в макроскопическом приближении. Отмечено, что наибольшие расхождения теории и моделирования по частоте нуклеации наблюдаются при высоких температурах и давлениях. Рассчитана эффективная поверхностная свободная энергия критических зародышей и показано, что эта величина – квадратичная функция кривизны разделяющей поверхности.

В Главе 4 представлены результаты исследования кавитации в растянутой леннард-джонсовской жидкости на пяти изотермах с помощью тех же подходов, что применялись при изучении кристаллизации в главе 3. Получено, что, в отличие от случая переохлажденной жидкости, теория дает более низкие значения частоты зародышеобразования, чем моделирование, при этом рассогласование данных растёт с уменьшением температуры изотермы. Еще одно существенное отличие от случая кристаллизации – во всем исследованном диапазоне размеров кавитационных полостей величина

их поверхностной свободной энергии в первом приближении является линейной функцией кривизны межфазной границы.

В заключении сформулированы основные результаты работы и выводы. Обсуждаются перспективы дальнейшей разработки темы исследования.

Замечания и вопросы.

1. В тексте диссертации недостаточно ясно описаны детали использованных протоколов молекулярно-динамических расчетов. Так при описании протоколов на страницах 42 и 69 не приводятся данных о значениях временных констант термостата и баростата. Не обсуждается выбор этих параметров, хотя он может оказывать влияние на результаты расчетов нуклеационных явлений. На странице 42 используется не вполне традиционный термин «баростат Нозе-Хувера».
2. В диссертации не обсуждается вопрос выбора молекулярно-динамического ансамбля (NVT или NpT) при расчетах методом выборки прямого потока или методом внедрения зародыша новой фазы. В условиях формирования двухфазной системы в процессе молекулярно-динамического расчета условия, налагаемые на размер расчетной ячейки, могут влиять на характер протекания моделируемого нуклеационного процесса, поэтому этот методический вопрос заслуживает рассмотрения.

Заключение

Поставленные в диссертации задачи выполнены в полной мере. Работа написано хорошим литературным языком, материал излагается доступно и последовательно. Результаты, полученные в диссертации К.Р.Проценко, вносят значимый вклад в развитие теоретико-вычислительных подходов описания нуклеационных явлений. Несомненным достоинством работы является последовательное применение трех независимых методов молекулярно-динамического моделирования гомогенной нуклеации и сравнение их результатов для двух типов нуклеации (для кристаллизации и для кавитации).

Автореферат правильно передает содержание диссертации.

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.

На основании вышеизложенного 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.

Официальный оппонент

Доктор физико-математических наук по специальности 1.3.8. (01.04.07.) – физика конденсированного состояния, доцент, заведующий отделом 14 многомасштабного суперкомпьютерного моделирования Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН).

Контактная информация:

Почтовый адрес: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2.

Телефон: +7 (495) 485-85-45

E-mail: stegailov.vv@mipt.ru

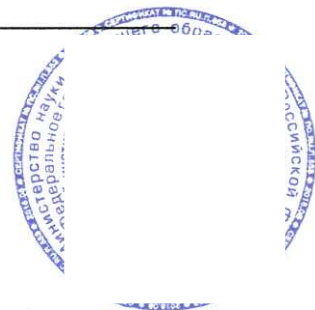
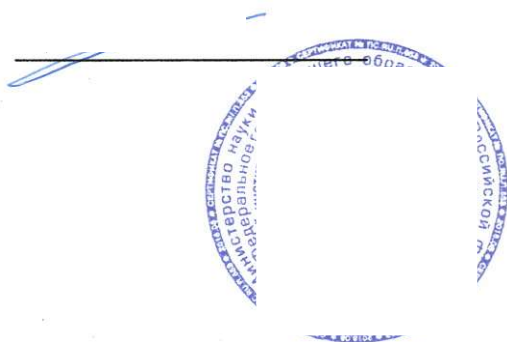


Стегайлов Владимир Владимирович

«16» января 2023 г.

Подпись В.В. Стегайлова заверяю

Ученый секретарь ОИВТ РАН, д.ф.-м.н.



Амиров Равиль Хабибулович