

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы 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

Автор отзыва

ФИО: Галашев Александр Евгеньевич

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук» (ИВТЭ УрО РАН), лаборатория электродных процессов

Должность: главный научный сотрудник

Контактная информация: 620990 г. Екатеринбург, улица Академическая, дом 20, +7 343 362-31-43, galashev@ihte.uran.ru

Актуальность темы диссертационной работы К.Р. Проценко связана с проблемами фазовых переходов и устойчивости состояний с флуктуациями, проходящими в простой однокомпонентной системе. Тема диссертационной работы соответствует заявленной научной специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника. Молекулярно-динамическое моделирование проводилось на примере леннард-джонсовской (ЛД) системы с привлечением методов выборки прямого потока и внедрения зародыша новой фазы. Исследованы процессы гомогенного зарождения новой фазы в метастабильной простой жидкости. Результаты моделирования сопоставлены с данными теоретических подходов.

Диссертационная работа К.Р. Проценко направлена на глубокое понимание процессов зародышеобразования при умеренных перегревах и переохлаждениях жидкости и сочетает в себе динамические и стохастические способы моделирования. Частота зародышеобразования, коэффициент диффузии новообразований и размер критического зародыша определены в широком интервале температур и давлений для метастабильной ЛД жидкости. Изучено изменение морфологии критических зародышей в зависимости от степени метастабильности системы. Установлена размерная зависимость поверхностной свободной энергии зародышей новой фазы.

Замечание. В диссертационной работе Проценко К.Р. Критерием принадлежности частицы к кристаллическому кластеру принято условие существования у нее более 11 связей. Видимо, автор имеет ввиду то, что в идеальной ГЦК упаковке, в которую должна кристаллизоваться леннарджонсовская (Л-Д) жидкость число ближайших соседей $n = 12$. Однако Берналом было показано, что наиболее вероятное число ближайших геометрических соседей в простой Л-Д жидкости равно 14. Кроме того, работы по МД моделированию переохлажденной простой жидкости показали, что структура кристаллического зародыша, как правило, отличается от структуры соответствующего ей макрокристалла, а, конкретно, ближний порядок простой жидкости скорее всего перестраивается в ОЦК, а не ГЦК структуру. ГЦК же структура, как незначительно энергетически более выгодная, образуется уже на стадии роста критического зародыша, а не в период его формирования. В связи с этим возникает вопрос, проводились ли поиски параметров критического зародыша при других критериях его определения для выявления достоверности полученных результатов?

Указанное замечание не подвергают сомнению результаты, полученные автором и не снижает ценность работы.

По объему и уровню выполненных исследований, научной и практической значимости полученных результатов диссертационная работа К.Р. Проценко соответствует требованиям п.9 Положения о присуждении учёных степеней в УрФУ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор Проценко Ксения Романовна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 — Теплофизика и теоретическая теплотехника.

29.12.2022

главный научный сотрудник Лаборатории электродных процессов
Галашев А.Е.

Я, Галашев Александр Евгеньевич, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

Подпись гл. научн. сотр. Галашева А.Е. заверя

Ученый секретарь ИВТЭ УрО РАН




Кодинцева А.О.