

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Маковеевой Евгении Васильевны на тему «Математическое моделирование роста кристаллов на промежуточной и заключительной стадиях фазового превращения», представленную к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 — «Теплофизика и теоретическая теплотехника»

Диссертация Маковеевой Е.В. «Математическое моделирование роста кристаллов на промежуточной и заключительной стадиях фазового превращения» посвящена развитию теории объемной кристаллизации в переохлажденных и пересыщенных жидкостях на различных стадиях фазового превращения с учетом физически важных нелинейных эффектов и внешних воздействий. К ним относятся учет нестационарности теплового и концентрационного полей при росте одиночных сферических кристаллов, учет сдвига температуры фазового перехода за счёт кинетики присоединения атомов к межфазной границе и ее кривизны, учет теплообмена жидкости с окружающей средой, притока массы и отвода кристаллов заданного размера из кристаллизатора, учет перехода метастабильной жидкости с промежуточной на финальную стадию фазового превращения, а также начальной функции распределения кристаллов по размерам на стадии оствальдова созревания.

В диссертации сформулирован единый теоретический подход к описанию промежуточной и заключительной стадий фазового превращения с учетом вышеуказанных факторов при росте кристаллов в однокомпонентных и бинарных переохлажденных расплавах и пересыщенных растворах. Сформулированы математические модели эволюции полидисперсных ансамблей сферических кристаллов на основе кинетического уравнения первого и второго порядков для функции распределения частиц по размерам, а также балансовых соотношений тепла и массы. Важной отличительной особенностью разработанной теории является учет флуктуаций в скоростях роста кристаллов, что особенно необходимо на начальном этапе эволюции

ансамбля частиц при больших переохлаждениях. Последовательный учет описанных выше нюансов устраняет значительный пробел, существовавший до недавнего времени в теории фазовых превращений.

Актуальность работы обусловлена как построением корректных математических моделей кристаллизации жидкостей, приведенных в метастабильное состояние, учитывающих ряд важных факторов, которые не были учтены ранее, так и практической применимостью полученных результатов к реальным технологическим процессам. Так, например, автор строит математические модели для описания режимов работы реальных кристаллизаторов.

Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, подтверждается общепринятыми физическими законами, лежащими в основе формулируемых математических моделей рассматриваемых процессов, хорошо апробированными математическими методами их анализа и расчета, соответствием полученных результатов экспериментальным данным, отсутствием противоречий современным научным представлениям.

Научная новизна проведенного исследования заключается в разработанном теоретическом подходе к решению интегро-дифференциальных уравнений тепло-массопереноса с подвижными (межфазными) границами, который представляет собой комбинацию ряда известных математических методов: метода интегральных преобразований, метода разделения переменных, метода седловой точки, метода малого параметра применительно к решаемым в диссертации задачам. С использованием этих методов автор находит ряд новых приближенных аналитических решений, описывающих механизмы объемной кристаллизации переохлажденных (пересыщенных) жидкостей. Предложенный в работе подход является оригинальным и имеет большой потенциал для дальнейшего использования при решении смежных задач.

Замечания по диссертационной работе:

1. В работе говорится, что для нахождения скорости роста кристаллов в метастабильной жидкости используются соответствующие кинетические уравнения. Т. е., скорость роста кристалла задается пропорциональной переохлаждению/пересыщению жидкости. При этом переохлаждение/пересыщение жидкости полагается однородными во всем ее объеме и на протяжении всего процесса. Однако, хорошо известно, что по мере роста кристалла вокруг него (в объеме жидкости) формируется температурный/диффузионный погранслои, и рост кристалла начинает обуславливаться не только кинетическими механизмами, но и тепломассообменными процессами, которые в конечном счете начинают играть определяющую роль. Насколько правомерно пренебрегать этими эффектами? Хотелось бы видеть какую-либо подтверждающую сделанному в работе допущению оценку.
2. В продолжение к предыдущему вопросу. Если же учитывать формирование вокруг растущих центров кристаллизации температурных/диффузионных погранслоев, насколько правомерно переохлаждение/пересыщение жидкости в каждый момент времени считать однородным? Ведь это является одним из ключевых факторов при описании кинетики суммарного превращения (так как частота нуклеации экспоненциально сильно зависит от степени метастабильности жидкости).
3. Хорошо известно, что одновременно с процессом остwaldова созревания могут протекать процессы коагуляции и фрагментации агрегатов. В работе учитывается только остwaldово созревание на заключительной стадии фазового превращения, что, очевидно, сужает рамки применимости разработанной модели.
4. Чем определяется выбор вида «хвоста» функции распределения кристаллов по размерам на начальном этапе остwaldова созревания?

5. При рассмотрении бинарных расплавов в работе используется линейное уравнение для ликвидуса. Насколько правомерно такое приближение? И можно ли обобщить построенную теорию, в которой бы использовались более точные зависимости?

Вместе с тем, указанные замечания не носят принципиального характера и не умаляют значимости полученных результатов.

Заключение

В целом, диссертационная работа Маковеевой Е.В. представляет собой законченное научное исследование, выполненное на высоком научном уровне, имеет научную и практическую значимость. Основное направление работы — это теоретическое моделирование фазовых превращений в переохлажденных и пересыщенных жидкостях. Таким образом, содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.3.14 — «Теплофизика и теоретическая теплотехника». Материал в диссертации изложен логически грамотно и последовательно. Представлен достаточно полный литературный обзор по тематике исследований. Выводы следуют из полученных результатов. Автореферат полностью соответствует диссертации.

Работа хорошо апробирована, в том числе на международных конференциях. По теме диссертации опубликовано 20 статей в высокорейтинговых научных журналах, индексируемых Scopus и Web of Science и включенных в список ВАК. Имеются 2 свидетельства о гос. регистрации программ для ЭВМ.

Таким образом, диссертационная работа Маковеевой Е.В. по объему выполненных исследований, их качеству, достоверности, научной значимости и новизне полученных результатов полностью соответствует требованиям пп. 9–11 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, предъявляемых к диссертационным работам, а ее автор, Маковеева Евгения Васильевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 — «Теплофизика и теоретическая теплотехника».

Официальный оппонент:

Профессор РАН, доктор физико-математических наук (01.04.14 — «Теплофизика и теоретическая теплотехника»), доцент, ведущий научный сотрудник Лаборатории синтеза новых материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск.

«15» ноября 2021 г.  Чернов Андрей Александрович

Адрес: 630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, д. 1.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук.

Сайт: <http://www.itp.nsc.ru>

E-mail: chernov@itp.nsc.ru

Тел.: 8(383)330-60-40

Подпись проф. РАН, д.ф.-м.н., доцента А.А. Чернова удостоверяю:

Ученый секретарь Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, к.ф.-м.п.

 М.С. Макаров

