ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Типеева Азата Олеговича

«Кристаллизация переохлажденной жидкости в молекулярно-динамических моделях»,

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника

Проблема существования вещества в метастабильных состояниях и зародышеобразования при переходе одной фазы в другую является классической и в то же время далекой от окончательного решения. Для управления процессом кристаллизации и получения материалов, структурированных определенным образом, оказывается необходимым изучение свойств границы раздела фаз в различных термодинамических состояниях, а также механизмов перехода жидкость - кристалл. Существующая термодинамическая теория основана на формализме Гиббса, однако ее применение для реальных задач наталкивается на неудовлетворительное описание свойств критического зародыша. Особенно отчетливо это проявляется при изучении гомогенной нуклеации в случае перехода жидкость - кристалл, т.к. в данном случае зародыш новой фазы близок к материнской фазе по структуре и свойствам. В связи с этим работа Типеева А.О., направленная на изучение кристаллизации, имеет несомненную актуальность.

В первой главе диссертант анализирует имеющиеся на сегодняшний день подходы к изучению кристаллизации в однокомпонентной системе и фазового равновесия жидкость - кристалл для стабильных и метастабильных состояний. Основное внимание уделено определению поверхностного натяжения, как ключевого фактора, определяющего свойства границы раздела фаз. Описаны результаты экспериментальных работ по изучению спонтанной кристаллизации переохлажденной жидкости, отмечены принципиальные трудности использования экспериментальных методик для получения полноценной информации о веществе, находящемся в метастабильном состоянии. Сделан вывод, что компьютерное моделирование является мощным инструментом для предсказания основных закономерностей поведения систем на молекулярном уровне, поэтому автором проведен анализ имеющихся результатов, полученных данным методом.

Вторая глава посвящена описанию молекулярной модели и методикам определения с ее помощью свойств межфазной границы кристалл-жидкость и частоты гомогенной нуклеации. Автор использовал атомистические модели с потенциалом Леннард-Джонса и модифицированным потенциалом Леннард-Джонса, которые не смотря на свою простоту, воспроизводят полную фазовую диаграмму однокомпонентных систем и широко применяются для отработки методик расчета различных свойств. В данной главе изложены основы методов нахождения поверхностной энергии межфазной границы и поиска частоты нуклеации. Отмечено, что частота нуклеации является одним из важнейших характеристик равновесной метастабильной системы, получаемой при моделировании, т.к. с одной стороны

она может быть сопоставлена с экспериментом, а с другой стороны ее можно использовать для косвенного определения с свойств границы раздела двух фаз.

В третьей главе обсуждается зависимость поверхностной свободной энергии и механического поверхностного натяжения для границы раздела кристалл - жидкость от ориентации кристалла и глубины захода в метастабильную область на фазовой диаграмме. Произведено изучение поверхностной свободной энергии вдоль линии сосуществования кристалл - жидкость в области стабильных и метастабильных состояний. Предложено уточнение аналитической формулы для нахождения поверхностной свободной энергии в широком диапазоне температур. Дополнительно исследовано асимптотическое поведение поверхностного натяжения вблизи конечной точки линии сосуществования кристалл - жидкость в метастабильной области.

В четвертой главе изучается процесс гомогенной нуклеации при кристаллизации жидкости, атомы которой взаимодействуют с классическим потенциалом Леннард-Джонса. Найдены зависимости частоты нуклеации, фактора Зельдовича, размера критического зародыша для большого диапазона давлений, температур и плотностей. Проведено сравнение данных моделирования с результатами расчета по классической теории нуклеации, данными моделирования другими авторами. Отмечена слабая зависимость кинетического множителя от температуры и давления. Показано, что искривленная поверхность зародыша имеет эффективную поверхностную свободную энергию отличающуюся от свободной границы плоской поверхности не более 15%.

В пятой главе обсуждается гомогенная нуклеация при кристаллизации жидкости, атомы которой взаимодействуют с модифицированным потенциалом Леннард-Джонса. Найдены частота нуклеации, фактор Зельдовича, эффективная поверхностная энергия для критического зародыша. Результаты сопоставлены с предсказаниями классической (термодинамической) теории нуклеации и результатами моделирования других авторов.

В заключении сформулированы выводы по диссертации. Список литературы содержит 130 наименований и охватывает ключевые работы по выбранному направлению. Автореферат включает необходимые сведения о диссертации и соответствует её содержанию. Сама диссертационная работа структурирована по правилам ВАК, содержит требуемые формальные разделы, в достаточной степени иллюстрирована и дает полное представление о проведенных исследованиях и их результатах.

Результаты, представленные А.О. Типеевым в своей работе, обладают научной новизной. Впервые проведено систематическое описание свойств поверхности раздела кристалл - жидкость для однокомпонентной системы, в том числе для метастабильных состояний в области отрицательных давлений. Изучена зависимость скорости гомогенной кристаллизации жидкости при положительных и отрицательных давлениях и разных температурах. Проведено сравнение различных методик определения параметров границы жидкость кристалл и показана согласованность полученных результатов. Достоверность

полученных результатов обоснована использованием проверенных методик моделирования, обработкой достаточного количества статистической информации, и непротиворечивостью их данным различных источников. Следует отметить, что личный вклад автора диссертации в проделанную работу не вызывает сомнения.

В процессе чтения работы у меня возникли некоторые вопросы, часть которых можно отнести к замечаниям.

1. Почему часть расчетов была выполнена для модифицированного потенциал Леннард-Джонса, который с одной стороны не позволяет сделать обобщение результатов, на разные формы потенциалов, а с другой стороны затрудняет сравнение результатов глав 4 и 5?
2. Стр. 53 (рис. 8). Ширина переходного слоя, получающаяся из первоначальной пилообразной функции составляет около 20 единиц, а после фильтрации около10 единиц. В связи с этим возникает вопрос, на сколько методика определения ширины переходного слоя влияет на окончательное значение избыточной поверхностной энергии?
3. Стр. 36. «Частицы стенки не должны взаимодействовать друг с другом – это обеспечивается приданием им бесконечно большой массы относительно массы частиц среды.» По видимому речь идет о том, что частицы не должны двигаться.
4. Стр. 64–65. Процедуру захода в метастабильную область и методику выбора промежуточного состояния (p', T') желательно описать подробнее.
5. Стр. 66. При кристаллизации растянутой переохлажденной жидкости (рис. 19) после образования кавитационных полостей в системе, давление остается отрицательным, а не обращается в ноль. С чем это связано?

Так же есть ряд опечаток и неточностей.

1. Стр. 53. «По мере понижения температуры величина σ(100) убывает, в то время как значения σ(110), σ(111) растут, демонстрируя выход на максимум в окрестности тройной точки. Такое поведение σ(110) и σ(111) связано с тем, что разность p_N - p_T в точке *минимума этой функции* при положительных давлениях возрастает с понижением температуры и уменьшается с заходом в область отрицательных давлений.» Не понятно о какой функции идет речь.
2. Стр. 13. Внизу страницы указана ссылка на Кана [16]. В списке литературы [16] это работа Русанова.
3. Часть текста страницы 95 повторяет текст страницы 93.

Отмеченные замечания не снижают общего положительного впечатления о работе Типеева А.О., представленные материалы исследований имеют достаточно хороший уровень верификации и апробации. Труды Типеева А.О. представлены в виде статей в рецензируемых научных журналах, имеющих высокий импакт-фактор и включенных в список ВАК (7 работ), материалы докладывались на международных конференциях самого высокого уровня.

Заключение: Типеев Азат Олегович представил к защите законченную научно-квалификационную работу, в которой решена важная задача согласованного описания кинетики процесса кристаллизации простых одноатомных систем, на основе результатов компьютерного моделирования, которая имеет значение для развития теории фазовых переходов. На основании изложенного можно заключить, что диссертационная работа «Кристаллизация переохлажденной жидкости в молекулярно-динамических моделях» удовлетворяет требованиям к кандидатским диссертациям, установленным в п. 9 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. N 842, а её автор, Типеев Азат Олегович, заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника.

Профессор кафедры "Компьютерное моделирование
и нанотехнологии" ФГАОУ ВО "Южно-Уральский
государственный университет (национальный
исследовательский университет)",
доктор физико-математических наук

Воронцов
Александр Геннадьевич
25.11.2016

454080, г. Челябинск, пр. Ленина 76
e-mail: vorontsovag@susu.ru

Верно
Ведущий документовед
О.В. Гришина

Подпись Воронцова А.Г. заверяю.