

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.285.02
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ПЕРВОГО ПРЕЗИДЕНТА РОССИИ Б. Н. ЕЛЬЦИНА»,
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело №
решение диссертационного совета от 23.12.2016 г. № 33

О присуждении Типееву Азату Олеговичу, гражданство Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Кристаллизация переохлажденной жидкости в молекулярно-динамических моделях» по специальности 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника принята к защите 20 октября 2016 г., протокол № 27, диссертационным советом Д 212.285.02 на базе ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России; 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19; созданным приказом Минобрнауки России № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель, Типеев Азат Олегович, 1985 года рождения.

В 2008 г. окончил ГОУ ВПО «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» по специальности «Физика»; в 2011 г. окончил очную аспирантуру ФГБУН Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук по специальности 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника; работает в должности младшего научного сотрудника лаборатории криогеники и энергетики ФГБУН Институт теплофи-

зики Уральского отделения Российской академии наук (г. Екатеринбург), Федеральное агентство научных организаций.

Диссертация выполнена в лаборатории криогеники и энергетики ФГБУН Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук (г. Екатеринбург), Федеральное агентство научных организаций.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор, Байдаков Владимир Георгиевич, ФГБУН Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук, лаборатория криогеники и энергетики, заведующий лабораторией.

Официальные оппоненты:

Галашев Александр Евгеньевич – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, лаборатория электродных процессов, главный научный сотрудник;

Воронцов Александр Геннадьевич – доктор физико-математических наук, ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», г. Челябинск, кафедра «Компьютерное моделирование и нанотехнологии», профессор;

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург – в своем положительном заключении, подписанном Гельчинским Борисом Рафаиловичем, доктором физико-математических наук, профессором, заведующим лабораторией порошковых, композиционных и наноматериалов, и Юрьевым Анатолием Аркадьевичем, кандидатом физико-математических наук, старшим научным сотрудником лаборатории порошковых, композиционных и наноматериалов, указала, что диссертационная работа Типеева Азата Олеговича выполнена на высоком научном уровне и является научно-квалификационной работой, посвященной исследованию гомогенной кристаллизации переохлажденной жидкости. Диссертационное исследование направлено на более глупо

бокое понимание явлений, протекающих при агрегатных изменениях в физических системах. Диссертационная работа полностью удовлетворяет требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника.

Соискатель имеет 16 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 16 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 7. Другие публикации представлены в виде 9 тезисов докладов, опубликованных в сборниках научных трудов международных (7) и российских (2) научных конференций. Общий объем опубликованных работ – 6,95 п.л., авторский вклад – 2,73 п.л.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации:

1. Tipeev A.O. Metastable extension of the melting line and the critical endpoint / V.G. Baidakov, S.P. Protsenko, A.O. Tipeev // Journal of Non-Cryst. Solids. – 2010. – V. 356. – N. 52-54. – P. 2923-2927. (0,53 п.л./0,17 п.л.).

2. Tipeev A.O. Crystal nucleation rate isotherms in Lennard-Jones liquids / V.G. Baidakov, A.O. Tipeev, K.S. Bobrov, G.V. Ionov // J. Chem. Phys. – 2010. – V. 132. – N. 23. – P. 234505. (0,98 п.л./0,33 п.л.).

3. Tipeev A.O. On two approaches to determination of the nucleation rate of a new phase in computer experiments / V.G. Baidakov, A.O. Tipeev // Thermochim. Acta. – 2011. – V. 522. – N. 1-2. – P. 14-19. (0,69 п.л./0,34 п.л.).

4. Tipeev A.O. Crystal nucleation and the solid–liquid interfacial free energy / V.G. Baidakov, A.O. Tipeev // J. Chem. Phys. – 2012. – V. 136. – N. 7. – P. 074510. (0,94 п.л./0,47 п.л.).

5. Типеев А.О. Линия плавления, спинодаль и конечная точка линии плавления в системе с модифицированным леннард-джонсовским потенциалом / С.П. Проценко, В.Г. Байдаков, А.О. Типеев // Теплофизика и аэромеханика. – 2013. – Т. 20. – N. 1. – С. 95-106. (1,35 п.л./0,45 п.л.).

6. Tipeev A.O. Temperature dependence of the crystal-liquid interfacial free energy and the endpoint of the melting line / V.G. Baidakov, S.P. Protsenko, A.O. Tipeev // J. Chem. Phys. – 2013. – V. 139. – N. 22. – P. 224703. (1,2 п.л./0,4 п.л.).

7. Типеев А.О. Поверхностная свободная энергия кристалл-жидкость на метастабильном продолжении линии плавления / В.Г. Байдаков, С.П. Проценко, А.О. Типеев // Письма в ЖЭТФ. – 2013. – Т. 98. – N. 12. – С. 903-906. (0,44 п.л./0,14 п.л.).

На диссертацию и автореферат поступили положительные отзывы от:

1. **Юри В.П. Шмельцера**, доктора естественных наук, Институт физики, Университет Ростока, Германия. Содержит вопросы: 1) какой физический смысл имеют равновесные распределения зародышей для метастабильных состояний и для каких целей они применяются в теории зародышеобразования? 2) корректно ли отождествление энергии активации диффузии с энергией активации вязкого течения? 3) что является причиной имеющих в литературе анализов, утверждающих, что классическая теория зародышеобразования не способна описать нуклеацию количественно правильно? 4) возможно ли количественно сравнить полученные результаты с расчетами по уравнению (36) работы The Journal of Chemical Physics 145, 064512 (2016)?

2. **Щёкина Александра Кимовича**, доктора физико-математических наук, член-корреспондента РАН, профессора, заведующего кафедрой статистической физики, и **Волкова Николая Александровича**, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника кафедры статистической физики, ФГБОУ «ВО Санкт-Петербургский государственный университет», г. Санкт-Петербург. Без замечаний.

3. **Стегайлова Владимира Владимировича**, доктора физико-математических наук, заведующего отделом 1.2.2, **Нормана Генри Эдгаровича**, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника лаборатории 1.2.2.1, и **Писарева Василия Вячеславовича**, кандидата физико-математических наук, заведующего лабораторией 1.2.2.2, ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва. Без замечаний.

4. **Чернова Андрея Александровича**, доктора физико-математических наук, профессора РАН, старшего научного сотрудника лаборатории 1.1 «Процессы переноса» ФГБУН Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск. Содержит вопросы и замечания: 1) как соотносятся используемые модельные жидкости с реальными веществами? Откуда берутся значения выбранных параметров потенциала ЛД? 2) почему используются эти потенциалы межчастичного взаимодействия, а не какие-либо другие? 3) чем обусловлен достаточно узкий интервал значений частоты нуклеации? 4) как рассчитывался предэкспоненциальный множитель в зависимости для частоты нуклеации? 5) в автореферате не следовало приводить рисунки 1 и 2. б) в списке опубликованных работ не присутствуют труды ряда международных конференций, о которых говорится в апробации.

5. **Мокшина Анатолия Васильевича**, доктора физико-математических наук, заведующего кафедрой вычислительной физики, и **Галимзянова Булата Наиловича**, кандидата физико-математических наук, ассистента кафедры вычислительной физики, Институт физики ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», г. Казань. Без замечаний.

6. **Бродской Елены Николаевны**, доктора физико-математических наук, профессора, ведущего научного сотрудника Института химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», г. Санкт-Петербург. Без замечаний.

7. **Волкова Николая Борисовича**, доктора физико-математических наук, заведующего лабораторией нелинейной динамики, и **Болтачева Грзя Шамилевича**, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории нелинейной динамики ФГБУН Институт электрофизики Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург. Содержит вопросы: 1) с чем связано несовпадение поверхностной свободной энергии и механического поверхностного натяжения для межфазной границы «кристалл–жидкость»? 2) насколько близка форма критического кристаллика к сфере?

8. **Фахретдинова Идриса Акрамовича**, доктора физико-математических наук, профессора кафедры инженерной физики и физики материалов ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет», г. Уфа. Без замечаний.

9. **Жуховицкого Дмитрия Игоревича**, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника лаборатории 1.2.1.1 Научно-исследовательского центра теплофизики экстремальных состояний ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва. Без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их широкой известностью своими достижениями и высокой научной компетентностью в области исследования кристаллизации переохлажденных жидкостей, в том числе современными методами компьютерного моделирования и теоретического анализа, а также наличием публикаций в высокорейтинговых научных журналах.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– **усовершенствованы** физические модели и **разработаны** новые программные модули для компьютерного расчета поверхностной свободной энергии жидкость-кристалл на линии плавления и анализе параметров зародышей кристаллической фазы;

– впервые **рассчитана** эффективная поверхностная свободная энергия критических кристаллических зародышей при изобарическом и изотермическом заходах в метастабильную область и **установлена** ее слабая зависимость от размера критического зародыша;

– **показано**, что в точке встречи кривой плавления со спинодалью растянутой жидкости избыточные величины – поверхностная свободная энергия, поверхностное напряжение, поверхностная энергия имеют конечное значение, а поверхностная энтропия равна нулю.

Теоретическая значимость исследований обоснована тем, что:

- при исследовании гомогенной кристаллизации существенно **расширены представления** о процессе зародышеобразования в широком интервале термодинамических параметров состояния, в том числе при отрицательных давлениях;
- результаты диссертационного исследования **вносят существенный вклад** в теорию фазовых переходов жидкость-кристалл;
- применительно к проблематике диссертации **эффективно использовано** численное моделирование на современных суперкомпьютерах с использованием параллельных вычислений.

Значение полученных соискателем результатов исследований для практики подтверждается тем, что их необходимо учитывать в описании кристаллизации при больших переохлаждениях жидкой фазы, в процессах ударного адиабатического сжатия жидкости, а также при получении новых материалов с заранее заданными свойствами.

Оценка достоверности выявила, что полученные в компьютерном моделировании результаты обеспечиваются использованием апробированной программы молекулярно-динамических расчетов, подтверждаются согласием результатов, полученных разными методами и подходами и непротиворечивостью известным физическим моделям и литературным данным.

Личный вклад соискателя состоит в его активном участии в получении всех основных результатов работы, разработке компьютерных методик, обработке и интерпретации полученных данных, а также подготовке публикаций по теме диссертации.

Диссертация Типеева Азата Олеговича соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней и является научно-квалификационной работой, которая содержит решение научной задачи по исследованию фазового перехода жидкость-кристалл на молекулярном уровне, имеющей существенное значение для развития теплофизики и более глубокого понимания явлений, протекающих при агрегатных изменениях в физических системах.

На заседании 23 декабря 2016 г. диссертационный совет принял решение присудить Типееву А.О. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 20, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета

Кортов Всеволод Семенович

Ученый секретарь

диссертационного совета

Ищенко Алексей Владимирович

23 декабря 2016 г.



Протокол заседания диссертационного совета от 23.12.2016 г. № 27

Копия выдана в количестве 20 экз.