

ВІДГУК
офіційного опонента на дисертаційну роботу
Абизова Олександра Сергійовича
«Узагальнений підхід Гіббса у теорії нуклеації»,
яка представлена на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук
(спеціальність 01.04.02 – «теоретична фізика»)

У дисертації О. С. Абизова розроблена нова модель теорії нуклеації, яка займає проміжне положення між класичною теорією нуклеації в капілярному наближенні і теорією Кана-Хіллларда, а також, певною мірою, об'єднує можливості цих теорій.

Актуальність описаних у дисертації досліджень підтверджується тим, що вона є складовою частиною трьох базових програм відділу теорії конденсованих середовищ і ядерної матерії Інституту теоретичної фізики імені О. І. Ахієзера Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України за номерами державної реєстрації 080906UP0010 (2006-2010), 0111U009545 (2011-2015), 0116U007068 (2016-2020), чотирьох цільових комплексних програм НАН України за номерами державної реєстрації 0111U009547 (2011-2012), 0113U003968 (2013-2015), 0116U007071 (2016-2018), 0119U101826 (2019-2021), спільного проекту фундаментальних досліджень “ДФФД – БРФФД – 2009” (номер державної реєстрації Ф29/377 – 2009, 2009 – 2010 рр.), проєктів німецького науково-дослідницького співтовариства (DFG, University of Rostock, Germany, 2002, 2003, 2005 – 2009) у яких здобувач був виконавцем, та двох персональних проєктів німецької служби академічних обмінів (DAAD, 2005, 2011).

Обґрунтованість і достовірність наукових положень і висновків дисертаційної роботи зумовлюються використанням добре апробованих методів теоретичної фізики та чисельного моделювання процесу формування кластерів нової фази. Нові методи й підходи, запропоновані в дисертації, перевіряються порівнянням з загальноприйнятими – класичною теорією нуклеації та моделлю Кана-Хіллларда. Крім того, про достовірність результатів свідчить те, що вони опубліковані у відомих наукових виданнях першого та другого кварталів, а також доповідалися на вітчизняних та міжнародних конференціях і симпозіумах.

Дисертаційна робота повною мірою відповідає спеціальності 01.04.02 – «теоретична фізика». Публікації результатів дисертації відповідають вимогам наказу Міністерства освіти і науки України № 1220 від 23.09.2019 «Про опублікування результатів дисертацій на здобуття наукових ступенів доктора і кандидата наук» для захисту в формі наукової доповіді. Загальний обсяг дисертаційної роботи складає 369 сторінок, який складається зі вступу, десяти основних розділів, висновків, додатку, робота містить 363 найменування

використаних джерел. У вступі обґрунтовано вибір теми досліджень, сформульовано основні завдання, зазначено актуальність теми та вказано наукову новизну отриманих результатів, їх наукове та практичне значення, особистий внесок здобувача, апробацію результатів на вітчизняних та міжнародних конференціях і симпозиумах.

У першому розділі розвинуто узагальнений метод Гіббса для нуклеації нової фази у простій моделі регулярного бінарного розчину з урахуванням термодинамічних та кінетичних факторів. Показано, що нуклеація, тобто перша стадія формування кластера, починаючи з метастабільних початкових станів, виявляє властивості, що нагадують спінодальний розпад: Так спочатку розмір кластера залишається майже постійним, а його склад змінюється, хоча наявність активаційного бар'єра відрізняє процес нуклеації від справжнього спінодального розпаду. Головним результатом, що має практичне значення, є те, що робота утворення кластера критичного розміру в узагальненому методі Гіббса менша, ніж у класичній теорії нуклеації.

У другому розділі проаналізовано особливості спінодального розпаду та нуклеації, та перехід між обома механізмами у рамках термодинамічної кластерної моделі на основі узагальненого методу Гіббса. Розглянуто модель регулярного бінарного розчину з урахуванням зміни параметрів стану навколишнього середовища. Показано, що у нестабільній системі малого розміру еволюція починається за механізмом спінодального розпаду, але через зростання кластерів пересичення зменшується, система стає спочатку метастабільною, а потім починається стадія коалесценції.

У третьому розділі, за допомогою чисельного моделювання на основі кінетичної теорії нуклеації, проведено детальний аналіз термодинаміки формування кластерів на основі узагальненого методу Гіббса для моделі регулярного бінарного розчину. Розраховано еволюцію функції розподілу кластерів за розміром та складом для метастабільних і нестабільних початкових станів. Показано, що максимум потоку кластерів нової фази в просторі розмірів може проходити не тільки через сідлову точку, але також і через гребінь гіперповерхні термодинамічного потенціалу.

У четвертому розділі за допомогою чисельного моделювання на основі кінетичної теорії нуклеації у бінарному регулярному розчині визначається найбільш вірогідний потік кластерів нової фази в просторі розмірів. Показано, що залежно від ступеня нестабільності системи можна виділити три області. У першій області, при малому значенні пересичення, результати класичної теорії нуклеації та узагальненого методу Гіббса майже ідентичні. В другій області, при більшому значенні пересичення, робота створення кластера нової фази помітно менша, ніж в класичній теорії нуклеації, що призводить до істотно більш високого значення швидкості нуклеації. Максимум потоку в просторі розмірів у першій і другій

областях проходить переважно через сідло. В таких випадках для розрахунку швидкості нуклеації можна використовувати прості аналітичні вирази. У третій області, поблизу спінодалі, нуклеація відбуватиметься не через сідлову точку, а траєкторією, що проходить через гребінь гіперповерхні термодинамічного потенціалу. Розрахунок швидкості нуклеації у третій області можливий тільки на основі чисельного моделювання.

У п'ятому та шостому розділах досліджена гетерогенна нуклеація кластерів нової фази на плоских твердих поверхнях в однокомпонентній рідині ван дер Ваальса та регулярному бінарному розчині, відповідно. Показано, що контактний кут та каталітичний фактор гетерогенної нуклеації стають залежними від ступеня метастабільності (пересичення) розчину. При визначених умовах нуклеація значно посилюється, та область нестабільності розширюється за рахунок зменшення області метастабільності.

У сьомому та восьмому розділах досліджена гетерогенна нуклеація кластерів нової фази на дефектах твердої поверхні в однокомпонентній рідині ван дер Ваальса та регулярному бінарному розчині. В якості дефекту поверхні обрана конічна пора. Показано, що зі зменшенням кута конуса пори гетерогенна спінодаль наближається до бінодалі, і область нестабільності розширюється, показано також, що існує граничний кут конуса пори, менше якого формування нової фази проходить безбар'єрно. Розрахована швидкість нуклеації кластера нової фази у залежності від кута конуса пори.

У дев'ятому розділі теоретично досліджено процес закипання ртуті у імпульсних джерелах нейтронів, що працюють на реакції сколювання (Spallation Neutron Source), при адсорбуванні протонного пучка; обчислена робота формування критичних кластерів (мікробульбашок пари ртуті). Показано, що швидкість гомогенного зародження дуже низька при розглянутих умовах процесу навіть після адсорбції декількох імпульсів протонів, тому ймовірність кавітаційних процесів незначна.

У десятому розділі проведено теоретичний аналіз процесу зародження пори у малих зразках переохолодженої діюксидної рідини у процесі кристалізації поверхневого шару зразка. Обчислена робота формування пори критичного розміру в залежності від негативного тиску та час очікування першого критичного зародка (пори) в процесі зростання кристалічного шару на поверхні зразка. Отримані результати добре узгоджуються з експериментом.

Наукові результати і теоретичні розробки дисертаційної роботи О.С. Абизова можуть бути використані при проведенні теоретичних та прикладних робіт у Національному науковому центрі «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України, Харківському національному університеті імені В.Н. Каразіна МОН України, Інституті теоретичної фізики імені М.М. Боголюбова НАН України, Інституті прикладної фізики

НАН України, в Ростоцькому університеті (Німеччина) та в інших наукових центрах в Україні і за її межами.

При ознайомленні з дисертаційною роботою виникло декілька зауважень здебільш рекомендаційного характеру:

1. У розділах 5-8 досліджена гетерогенна нуклеація на плоских та дефектних твердих поверхнях і показано, що при певних умовах контактний кут зменшується до нуля. Але відомо, що коли контактний кут менше 10° , на його величину впливають інші фактори, наприклад, лінійний натяг периметра змочування. Вважаю, що в якості продовження цієї актуальної тематики доцільно провести більш детальні теоретичні дослідження у цьому випадку.

2. У дев'ятому розділі теоретично досліджено гомогенний процес закипання ртуті у імпульсних джерелах нейтронів, але у розділах 5-8 показано, що гетерогенна нуклеація, особливо на дефектах поверхні, може відбуватися набагато швидше. Не завадило б узагальнити даний розділ з урахуванням ефектів гетерогенності.

3. Розвинений в дисертаційній роботі узагальнений підхід Гіббса вимагає більш детального, на відміну від класичної теорії нуклеації, використання рівняння стану речовини, однак автор обмежився лише рівняннями стану для регулярного бінарного розчину, газу ван дер Ваальса і його модифікацією для ртуті. Було б доцільно розглянути також, наприклад, сучасні рівняння стану води, що має велике значення для фізики атмосфери, або інші рівняння стану важких металів, які використовуються у енергетиці.

Вказані зауваження не зменшують високого наукового рівня дисертаційної роботи О.С. Абизова та значення одержаних результатів. Наукові результати, положення та висновки, сформульовані в дисертації, опубліковані в 10 статтях у міжнародних реферованих журналах першого й другого кuartилів і пройшли апробацію на вітчизняних і міжнародних конференціях. Новизна та наукове значення здобутих результатів не викликають сумнівів, а опубліковані роботи й автореферат повністю відображають зміст, висновки і особистий внесок автора дисертації. Дослідження, проведені в дисертації, є актуальними і можуть бути використані як у фундаментальних, так і в прикладних дослідженнях (фізика, астрономія, хімія, біологія, метеорологія, медицина, матеріалознавство) та технології – конденсація та кипіння, сегрегація у твердих та рідких розчинах, або кристалізація та плавлення.

Враховуючи високу актуальність теми, наукову значимість і новизну отриманих результатів, достовірність та обґрунтованість висновків, вважаю, що дисертація «Узагальнений підхід Гіббса у теорії нуклеації» повністю задовольняє вимогам до докторських дисертацій, зокрема, п.п. 9, 10, 12, 13 «Порядку присудження наукових

ступенів», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України № 576 від 24.07.2013 р. (зі змінами, внесеними згідно з Постановами КМУ № 656 від 19.08.2015 р., № 1159 від 30.12.2015 р., № 567 від 27.07.2016 р.), а її автор, Абизов Олександр Сергійович, повною мірою заслугоує присудження наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика.

Офіційний опонент

доктор фізико-математичних наук,
професор, завідувач відділу
теорії конденсованого стану речовини
Інституту монокристалів НАН України

В.В. Яновський

Підпис засвідчую:

Учений секретар
Інституту монокристалів НАН України,
канд. фіз.-мат. наук



К.М. Кулик