

**РЕШЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА УрФУ 1.3.02.06  
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ  
КАНДИДАТА НАУК**

от «27» января 2023 г. № 3

о присуждении Проценко Ксении Романовне, гражданство Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Зародышеобразование в жидкости при умеренных переохлаждениях и перегревах (молекулярно-динамическое моделирование)» по специальности 1.3.14. Термофизика и теоретическая теплотехника принята к защите диссертационным советом УрФУ 1.3.02.06 «22» ноября 2022 г., протокол № 24.

Соискатель, Проценко Ксения Романовна, 1992 года рождения, в 2016 г. окончила ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению подготовки 03.04.02 Физика;

в 2020 г. окончила очную аспирантуру ФГБУН Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук по направлению 03.06.01 Физика и астрономия (Термофизика и теоретическая теплотехника);

работает в должности младшего научного сотрудника лаборатории криогеники и энергетики ФГБУН Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук (г. Екатеринбург).

Диссертация выполнена в лаборатории криогеники и энергетики ФГБУН Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук, Минобрнауки России.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор, **Байдаков Владимир Георгиевич**, ФГБУН Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук, научный руководитель института.

Официальные оппоненты:

**ПОПЕЛЬ Петр Станиславович** – доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Уральский государственный педагогический университет», г. Екатеринбург, кафедра физики, технологии и методики обучения физике и технологии, профессор;

**РЫЛЬЦЕВ Роман Евгеньевич** – доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, отдел физической химии, старший научный сотрудник;

**СТЕГАЙЛОВ Владимир Владимирович** – доктор физико-математических наук, доцент, ФГБУН Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, г. Москва, отдел 14 многомасштабного суперкомпьютерного моделирования, заведующий отделом  
дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 18 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 18 работ, из них 4 статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ и входящие в международные реферативные базы данных Scopus и Web of Science. Общий объем опубликованных работ по теме диссертации – 3,32 п.л., авторский вклад – 1,43 п.л.

Основные публикации по теме диссертации

*статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ:*

1. Baidakov, V.G. Surface free energy and some other properties of a crystal-vapor interface: Molecular dynamics simulation of a Lennard-Jones system / V.G. Baidakov, A.O. Tipeev, **K.R. Protsenko** // Chem. Phys. Lett. – 2017. – Vol. 680 – P. 10-16. (0.45 п.л./0.22 п.л.) (Scopus, WoS).

2. Baidakov, V.G. Spontaneous crystallization of a supercooled Lennard-Jones liquid: molecular dynamics simulation / V.G. Baidakov, **K.R. Protsenko** // J. Phys. Chem. B. – 2019. – Vol. 123, № 38. – P. 8103-8112. (0.63 п.л./0.45 п.л.) (Scopus, WoS).

3. Baidakov, V.G. Effective surface free energy of crystalline phase nuclei / V.G. Baidakov, **K.R. Protsenko** // Coll. J. – 2019. – Vol. 81, N 6. – P. 634-641. (0.47 п.л./0.23 п.л.) (Scopus, WoS).

4. Baidakov, V.G. Molecular dynamics simulation of cavitation in a Lennard-Jones liquid at negative pressures / V.G. Baidakov, **K.R. Protsenko** // Chem. Phys. Lett. – 2020. – Vol. 760 – P. 138030(6). (0.37 п.л./0.25 п.л.) (Scopus, WoS).

На автореферат поступили отзывы:

1. **Болтачева Грэя Шамилевича**, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории комплексных электрофизических исследований ФГБУН Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Содержит замечание по физическому смыслу параметра Толмена в изобарических условиях.

2. **Галашева Александра Евгеньевича**, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника лаборатории электродных процессов ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Содержит замечание по критерию отнесения частицы к кристаллической фазе.

3. **Гельчинского Бориса Рафаиловича**, доктора физико-математических наук, заведующего лабораторией порошковых, композиционных и наноматериалов ФГБУН Институт metallurgii Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Без замечаний.

4. **Щёкина Александра Кимовича**, доктора физико-математических наук, чл.-корр. РАН, профессора, заведующего кафедрой статистической физики, и **Волкова Николая Александровича**, кандидата физико-математических наук, доцента кафедры статистической физики ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», г. Санкт-Петербург. Без замечаний.

5. Черняка Владимира Григорьевича, доктора физико-математических наук, профессора, профессора конденсированного состояния и наноразмерных систем кафедры физики естественных наук и математики ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург. Без замечаний.

Выбор официальных оппонентов обосновывается широкой известностью их достижений и исследований в области теплофизики и теоретической теплотехники, близостью тематики проводимых ими исследований и темы диссертационной работы. Это подтверждается соответствующими публикациями в рецензируемых российских и международных научных изданиях.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, является научно-квалификационной работой, в которой содержатся новые научно обоснованные решения и разработки, касающиеся определения кинетических и термодинамических характеристик процесса зародышеобразования в переохлажденной и перегретой жидкости, имеющие существенное значение как для развития фундаментальной науки, так и для развития ряда технологий в стране.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

- в рамках молекулярно-динамического моделирования разработаны подходы для изучения зародышеобразования при умеренных переохлаждениях и перегревах жидкости;
- проведены исследования зародышеобразования в переохлажденной и растянутой ЛД жидкости при изотермических и изобарических условиях;

- выполнено сопоставление результатов молекулярно-динамического моделирования и классической теории зародышеобразования, выявлено их рассогласование по частоте зародышеобразования;
- определены размер и коэффициент диффузии кристаллических зародышей и кавитационных полостей;
- определена размерная зависимость поверхностной свободной энергии критических зародышей кристаллической фазы и кавитационных полостей радиусом (0.8-4.4) нм.

Используемые в диссертационной работе подходы к моделированию зародышеобразования позволили изучить процессы гомогенного зарождения новой фазы в жидкости в широком диапазоне переохлаждений и перегревов. Результаты диссертационной работы могут быть использованы для установления границ применимости ряда приближений, использующихся в классической теории зародышеобразования.

На заседании 27 января 2023 г. диссертационный совет УрФУ 1.3.02.06 принял решение присудить Проценко К.Р. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет УрФУ 1.3.02.06 в количестве 18 человек, из них 5 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 18, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета

УрФУ 1.3.02.06

Ученый секретарь

диссертационного совета

УрФУ 1.3.02.06

27.01.2023 г.



Огородников Игорь Николаевич

Ищенко Алексей Владимирович