О Т З Ы В

на автореферат диссертации **Усенко Олеси Вадимовны**
«Взаимодействие молекул и атомов газовых компонент с углеродными структурами»
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности **01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы**

В диссертационной работе Усенко Олеси Вадимовны проведено теоретическое исследование взаимодействия молекул и атомов газов с наноуглеродными структурами. Судя по автореферату, в диссертации сочетаются аналитические подходы и прямое численное моделирование молекулярной динамики.

В первой главе построена математическая модель взаимодействия молекул газа с наночастицами. Решена задача о рассеянии молекул наночастицами и определен зазор между рядами наночастиц. Рассмотрена система из десяти наночастиц, образующих туннель для движущейся молекулы. Найден размер пор нанопористого материала обеспечивающий прохождение атомов определенного типа и задержку более крупных молекул.

Во второй главе исследована проницаемость пространственной структуры системы наночастиц, в частности, двойных и тройных слоев плотно уложенных наночастиц. Численное интегрирование эволюционных уравнений движения молекул проводилось с использованием схемы интегрирования ОДУ Рунге-Кутты четвертого порядка точности.

Третья глава посвящена анализу взаимодействия молекул и наноструктур со сглаженной потенциальной энергией. Модификация LJ-потенциала и континуальный подход в описании энергии взаимодействия с поверхностью двумерного кристалла позволили определить динамику молекул в случае графеновых волнистых структур линейчатого и шахматного вида.

В четвертой главе методом эквивалентного однородного слоя определена проницаемость нанопористых структур. Проанализировано прохождение молекул через укладку графеновых пластинок. Разработана методика нахождения критического значения скорости молекулы, при превышении которого молекула пройдет через укладку графеновых пластинок. В случае распределения по скоростям Максвелла найдены коэффициенты прохождения для молекул гелия и метана.

Актуальность исследования связана с проблемой совершенствования тонких мембранных технологий, реализация которых позволит с большей эффективностью разделять сложные газовые смеси на компоненты. Предметно в автореферате речь идет о проблеме выделения гелия из природного газа, однако результаты теоретического исследования имеют фундаментальный характер и могут быть приложены для других похожих целей.

К сожалению, при прочтении автореферата возникли небольшие замечания и остались без ответа некоторые вопросы:

1) Не очень удачным представляется термин “сморщенный графен”. Форма поверхности графена в этом случае ассоциируется с крайне нерегулярной структурой. В действительности это так и есть, однако в расчетах диссертационного исследования рассматриваются гладкие волнистые поверхности, форма которых меняется по гармоническому закону. Иными словами форма поверхность графена принималась “регулярно деформированной”.

2) Насколько оправданным является предположение об абсолютной жесткости конструкции нанотрубки, принятой в ходе расчетов? Представляется, что учет эластичности нанотрубки по отношению к ударам молекул приведет к неизбежным потерям энергии и как следствие к поправкам в результаты расчетов.

Высказанные замечания не влияют на общее положительное заключение по диссертационной работе. Автореферат диссертации **Усенко Олеси Вадимовны** в достаточной мере отражает результаты, выносимые на защиту. Несомненным достоинством является высокая степень опубликованности материалов диссертации, в первую очередь в

журналах, индексируемых базами данных Web of Science и Scopus. Полагаю, что работа является законченным научным исследованием, результаты которого могут быть востребованы инженерными и научными работниками, занимающимися фундаментальными и прикладными разработками в области микрофлюидики и родственными направлениями.

Считаю, что диссертационная работа **Усенко Олеси Вадимовны «Взаимодействие молекул и атомов газовых компонент с углеродными структурами»** отвечает всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, в том числе п. 9 "Положения о присуждении ученых степеней", а ее автор заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности **01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы**.

доктор физико-математических наук,
заведующий кафедрой теоретической физики
Пермского государственного национального
исследовательского университета **Демин Виталий Анатольевич**

Пермский государственный национальный исследовательский университет
сайт организации: http://www.psu.ru
614990, РФ, г. Пермь, ул. Букирева, 15, кафедра теоретической физики.
Рабочий тел. 8 (342) 2396227, **e-mail:** demin@psu.ru

22 мая 2017 года

Я, Демин Виталий Анатольевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации **Усенко Олеси Вадимовны «Взаимодействие молекул и атомов газовых компонент с углеродными структурами»**, и их дальнейшую обработку.