

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

доктора физико-математических наук Владимира Петровича Бушланова

на диссертационную работу Олеси Вадимовны Усенко

«Взаимодействие молекул и атомов газовых компонент с углеродными структурами», представленную на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Актуальность избранной темы. В диссертационной работе О.В. Усенко, численными методами исследованы взаимодействия молекул и атомов газовых компонент и неподвижных углеродных структур (наночастиц, слоев наночастиц, фуллеренов и графенов) с использованием известных потенциалов межмолекулярного взаимодействия в формах В. Я. Рудяка - С.Л. Краснолуцкого и модифицированного континуального Леннарда - Джонса (LJ). Определены проницаемости указанных нанообъектов, актуальные для мембранных технологий разделения газов на примере выделения гелия из природного газа.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций. Научные результаты диссертационной работы основаны на классическом численном методе Рунге-Кутты для решения обыкновенных дифференциальных уравнений и общепринятых в молекулярной динамике потенциалах межмолекулярного взаимодействия. Приблизленно согласуются полученные в диссертации проницаемости с экспериментальными данными по степени разделения метан - гелиевой смеси мембраной из полиэтилена пониженной плотности. Все указанное позволяет утверждать об обоснованности положений и выводов диссертации.

Основные результаты, автора диссертации, опубликованы в рецензируемых научных изданиях. В Роспатенте получены свидетельства на программы для ЭВМ.

Научная новизна положений, выводов и рекомендаций.

Автором диссертации разработана методика решения плоских и пространственных задач молекулярной динамики в пространстве с множеством стационарных (неподвижных) частиц на основе потенциала В. Я. Рудяка–С. Л. Краснолуцкого. Впервые решены задачи о дифференциальной проницаемости наноструктур из сферических стационарных наночастиц и установлена принципиальная возможность их применения в качестве мембран для выделения гелия из природного газа.

Впервые, используя интегрируемую модификацию потенциала Леннарда-Джонса, численно определены энергии взаимодействия пробных молекул со стационарным фуллереном и сморщенным графеном; данные по проницаемости неподвижного волнистого графена в случае наличия в нем дырок.

Впервые методом эквивалентного однородного слоя найдена предельная минимальная скорость прохождения молекул и коэффициент прохождения слоя параллельно уложенных графеновых чешуек, что позволило сделать вывод о селективной проницаемости указанных структур в смеси метан-гелий.

Основное содержание диссертационной работы. Работа состоит из введения, четырех разделов, заключения, списка использованной литературы. Объем диссертации составляет 151 страницу машинописного текста, включая 66 рисунков, 11 таблиц. Список литературы состоит из 221 наименования.

Во введение показана актуальность и степень разработанности темы исследования путем систематизации и анализа научных источников по различным технологиям выделения газообразного гелия. Сформулированы цели и задачи исследования, указаны новизна исследуемых постановок задач, теоретическая и практическая ценность диссертационной работы, основные положения, выносимые на защиту, достоверность полученных результатов. Приведены сведения об апробации работы, личном вкладе и публикациях автора, дано краткое изложение по разделам.

В первом разделе сформулирована математическая модель динамического взаимодействия молекул газовых компонент со сферическими неподвижными наночастицами различных размеров на основе потенциала В.Я. Рудяка и С.Л. Краснолуцкого. Численно решены задачи о рассеянии молекул наночастицей, и об определении зазора между двумя рядами неподвижных наночастиц. Проведено тестирование предложенной модели с применением численных технологий различных порядков точности, графически показано незначительное расхождение полученных результатов. На основе модификаций потенциала Леннарда-Джонса, изучены плоские движения молекул около идеализированной фуллереновой сферы и найдено расстояние, на котором наиболее сильно проявляется барьерное действие поля потенциальных сил.

Во втором разделе исследована проницаемость пространственных неподвижных структур из наночастиц, а также структур, составленных двойными и тройными слоями плотно уложенных наночастиц. Найдены диапазоны диаметра алмазных шаров плотной упаковки, с целью использования шаров в качестве фильтра для выделения гелия из природного газа. В результате исследования проницаемости сверхтонких слоев наночастиц найден коэффициент прохождения для гелия, подтвержденный данными экспериментов по нанопористой керамике из диоксида циркония, проведенными в лаборатории молекулярной динамики Томского государственного университета.

В третьем разделе исследованы взаимодействия молекул и стационарных наноструктур на основе интегрируемой модификации потенциала Леннарда-Джонса и континуального подхода при записи энергии взаимодействия с поверхностью двумерного кристалла. Исследование взаимодействия графенов различных поверхностных форм, взаимодействующих с гелием, выявило отсутствие явных зон сорбции и позволило установить, что размер пор не зависит от формы исследуемых двумерных структур и что перфорированные графеновые листы могут быть использованы в качестве мембран для выделения

гелия. В качестве обоснования используемой модели проведены расчеты энергии взаимодействия двух фуллеренов как функции расстояния между ними, которые согласуются с литературными данными. Предложенные в данном разделе потенциалы взаимодействия молекулярных структур, позволяют решать задачи как о прохождении молекул через наноструктуры, так и об их сорбции.

В четвертом разделе изучены фильтрующие свойства неподвижных двух и четырех параллельных графеновых пластин. Для случая двух пластин был использован потенциал взаимодействия Леннарда-Джонса в классической форме и определен поперечный размер окна проницаемости для гелия и для метана. В случае четырех пластин графена использована континуальная модель энергии взаимодействия эквивалентного однородного слоя. Установлено, что слой регулярной укладки одинаково ориентированных графеновых чешуек, работает как сепаратор во всем исследованном диапазоне сближения чешуек. Полученные результаты сопоставлены с литературными экспериментальными данными по значению степени разделения бинарной смеси газов.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы.

Замечания.

1. Запишем уравнения (1.14) в следующих безразмерных переменных со штрихом: $\rho = \rho' \rho_p$, $\bar{v} = \bar{v}' v_0$, $t = t' \left(\frac{\rho_p}{v_0} \right)$. Опуская штрихи, имеем

$$\varepsilon \frac{d\bar{v}}{dt} = \xi^3 \frac{\bar{x} - \bar{x}_0}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left[\frac{\xi^6}{15} \left(\left(\frac{1}{(\rho-1)^9} - \frac{1}{(\rho+1)^9} \right) - \frac{9}{8\rho} \left(\frac{1}{(\rho-1)^8} - \frac{1}{(\rho+1)^8} \right) \right) - \left[\left(\left(\frac{1}{(\rho-1)^3} - \frac{1}{(\rho+1)^3} \right) - \frac{3}{2\rho} \left(\frac{1}{(\rho-1)^2} - \frac{1}{(\rho+1)^2} \right) \right) \right] \right], \quad \frac{d\bar{x}}{dt} = \bar{v},$$

где $|\bar{v}(0)| = \left| \frac{d\bar{x}(0)}{dt} \right| = 1$ и где безразмерные параметры могут быть вычислены из

приведенных в тексте диссертации размерных величин и являются величинами

$$\text{порядка } \xi = \frac{\sigma_{12}}{\rho_p} \square 10^{-2}, \quad \varepsilon = 2 \frac{V}{\frac{4\pi}{3} (\sigma_{12})^3} \frac{m v_0^2}{2 \varepsilon_{12}} \square 10^{21}.$$

Поэтому система дифференциальных уравнений относится к классу «жестких» и методом Рунге-Кутты не решается. *Как автор диссертации усовершенствовала указанный метод для получения приемлемого численного решения из текста диссертации непонятно.*

2. При решении задачи о рассеянии молекулы сферической нано частицей решаются уравнения (1.13)-(1.16) в трехмерном случае. Указанная задача может быть решена в двухмерной постановке, так как движение молекулы происходит в плоскости векторов начальной скорости молекулы и начального радиуса вектора молекулы, отсчитываемого от центра сферы.

3. В задаче, указанной в замечании 2 (а также в п.1.5 и в задачах для сморщенного графена; о движении молекул около идеализированной фуллереновой сферы и в др., в которых применены потенциалы (3.1) , (3.20), (3.29), (4.1)), кроме интеграла энергии см. стр.47 выполняется и закон сохранения момента импульса в интегральной форме: $\vec{x} \times m\vec{v} = \vec{x}_0 \times m\vec{v}_0$. Поэтому из указанных двух интегралов энергии и момента импульса может быть получена в аналитической форме формула для вектора скорости как функция $\vec{x}$ и использована, в том числе при обосновании численной методики, также как использованный автором для указанной цели интеграл энергии.

4. Во всех рассмотренных в диссертации задачах взаимодействия рассчитываются со стационарными неподвижными объектами, неподвижность в реальности реализовать невозможно, особенно это относится к задаче о проницаемости туннеля из сферических нано частиц как на рис.1.8. К тому же когда при взаимодействии указанные объекты неподвижны, не выполняется закон сохранения момента количества движения для потенциала В.Я. Рудяка и С.Л. Краснолуцкого. Используя континуальный подход, автор диссертации выполняет указанный закон во взаимодействиях с неподвижными нано объектами.

Отметим также тот факт, что в фуллеренах атомы углерода расположены на сфере в узлах сетки, состоящей из правильных сферических пяти и шести угольников (как на футбольном мяче) и поэтому реальное

взаимодействие двух фуллеренов трехмерно и не описывается только функцией расстояния между ними.

Отмеченные замечания не влияют на общую положительную оценку проведенных в диссертации исследований. Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации.

Заключение.

Диссертационная работа Усенко О.В. является законченной научной квалификационной работой, в которой содержатся важные теоретические результаты для решения проблемы выделения гелия из природного газа, на основе нано мембран. По уровню решаемых задач, теоретической значимости, актуальности, важности и новизне полученных результатов, работа удовлетворяет требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы, а ее автор Олеся Вадимовна Усенко заслуживает присуждения искомой степени.

Официальный оппонент –

профессор кафедры «Ремонт судовых машин и механизмов»

Федерального государственного образовательного учреждения высшего образования «Государственный морской университет имени адмирала Ф.Ф. Ушакова»,

доктор физико-математических наук,

старший научный сотрудник

Владимир Петрович Бушланов

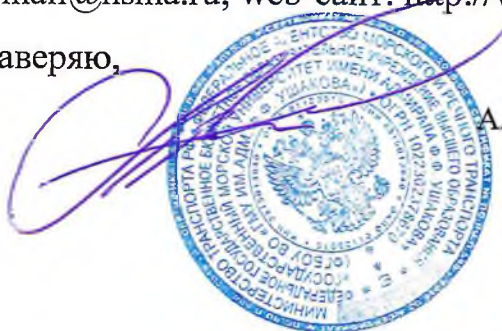
Сведения об организации: 353918, г. Новороссийск, пр. Ленина, 93;

тел. (8617) 71-75-25; e-mail: mail@nsma.ru; web-сайт: <http://www.aumsu.ru>.

Подпись В. П. Бушланова заверяю,

ВРИО проректора, к.т.н.

29 мая 2017 г.



А.В. Строганов