

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу Усенко Олеси Вадимовны  
«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

Мембранное разделение жидких, газообразных и дисперсных флюидов является не только важнейшим природным элементом функционирования различных живых и неживых объектов, но уже давно и с успехом лежит в основе создания соответствующих технологий – мембранных технологий. Эти технологии используются во многих традиционных областях, включая очистку воды и воздуха. Один из способов обогащения урана, газодиффузионный, также использует эти технологии. В последние годы мембранные технологии применяются при создании новых устройств для медицинской диагностики, для разделения газов. Характерный размер пор в мембранах, применяющихся в этих приложениях обычно нанометрового масштаба, от нескольких нанометров, до сотен нанометров. Однако взаимодействие атомов и молекул исследуемых флюидов с такими мембранами практически не изучен, а проведение соответствующих экспериментов по понятным причинам затруднено, а в ряде случаев не возможно. Данная диссертационная работа и посвящена разработке моделей явлений прохождения молекул и атомов газовых смесей через нанопористые структуры, что делает ее тематику **актуальной и практически важной**. Рассмотрены следующие основные задачи:

- о рассеянии молекул наночастицей;
- об исследовании движения молекул в нанопорах, сформированных плотно упакованными слоями наночастиц, и определении их проницаемости;

- об изучении закономерностей движения молекул газовых компонент через дефекты в графеновых пластинках, через нанотрубки и простейшие пористые элементы, составленные сферами различных радиусов.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех разделов, которые обычно принято называть главами, и заключения. Список литературы содержит 221 источник. Во введении дается подробный анализ работ, посвященных существующим методам извлечения гелия из природного газа. На основе их анализа формулируются цель работы и решаемые в ней задачи, затем перечисляются положения, выносимые на защиту, и дается краткое изложение диссертации по разделам.

В первом разделе дана формулировка математической модели динамического взаимодействия молекул газовых компонент со сферическими наночастицами различных размеров, решена задача о рассеянии молекул наночастицей, определен зазор между двумя рядами наночастиц, обеспечивающий селективное прохождение атомов гелия и молекул метана. В пункте 1.1 подробно описываются классические потенциалы межмолекулярного взаимодействия Леннард-Джонса, Морзе, Борна-Майера, Стиллэнгера-Вебера, Кихары. В следующем пункте рассматривается задача о рассеянии молекул сферической твердой наночастицей, взаимодействие с которой налетающих молекул описывается потенциалом Рудяка-Краснолуцкого. Здесь делается вполне справедливый вывод о том, характер рассеяния может быть качественно описан моделью твердых сфер большего радиуса. Затем изучается проницаемость простейшей модели пористой среды – нанопоры, построенной из десяти наночастиц заданного размера, при этом расстояние между цепочками частиц варьировалось. Установлен размер пор, проницаемых для молекул гелия и непроницаемых для более крупных молекул метана, азота и других газов.

Последний пункт этого раздела посвящен изучению движение молекулы около фуллерена. Их взаимодействие описывается некоторой модификацией потенциала Леннард-Джонса (потенциал (1.28), имеющего «мягкое» отталкива-

ние на малых расстояниях. Это делает рассматриваемый фуллерен фактически проницаемым для достаточно быстрых молекул.

Второй раздел посвящен исследованию проницаемости пространственных структур из наночастиц, а также двойных и тройных слоев плотно уложенных наночастиц. Получен интересный результат: компактированный углеродный материал может использоваться для сепарации бинарной смеси  $\text{CH}_4/\text{He}$ .

В третьем разделе изучено взаимодействие молекул с графеновыми поверхностями различной геометрии и углеродными нанотрубками и проницаемость тонких однородных пленок. Использовался континуальный подход с применением модифицированного потенциала Леннарда-Джонса. Здесь показано, что в графеновых листах поры с радиусом 0.17–0.27 нм оказываются проницаемыми для гелия и непроницаемыми для метана. Показано также, что проницаемость однородного слоя не зависит от его толщины, а определяется лишь материалом слоя и сортом падающих молекул.

Четвертый раздел посвящен разработке схемы расчета проницаемости мембран с регулярной структурой пор. Использовался метод эквивалентного однородного слоя, в основе которого лежит применение модифицированного потенциала Леннарда-Джонса. Здесь изучена проницаемость системы параллельных графеновых пластин, определены минимальные скорости молекул, необходимые для этого. Установлено, что изученные структуры имеют достаточно высокий коэффициент прохождения молекул гелия и низкий (в разы или даже на порядок ниже, чем для гелия) для метана. Это указывает на то, что данная нанопористая мембрана вполне может использоваться в качестве сепаратора гелия из природного газа.

В заключении формулируются основные выводы.

Таким образом, можно констатировать, что в данной диссертационной работе **решен цикл задач, имеющих существенное значение для создания технологий наномембранного извлечения гелия из природного газа.**

Наиболее интересным представляется

- определение зоны сорбции, характерной для фуллерена;
- определение энергии взаимодействия пары  $C_{60}-C_{60}$ ;
- полученные данные молекулярно-динамического моделирования коэффициента прохождения молекул через регулярную укладку графеновых пластин;
- найденные зависимости, определяющие потенциальное взаимодействие фуллеренов, графенов, нанотрубок с молекулами, позволяющие решить задачу о прохождении молекул через наноструктуры, составленные этими объектами.

Полученные О.В. Усенко результаты являются оригинальными и содержат новые данные о движении молекул через нанопористые слои. **Научная новизна** состоит в получении данных молекулярно-динамического моделирования, построении парного потенциала взаимодействия фуллеренов, применении континуального подхода для моделирования взаимодействия молекул газа с различными нанопористыми структурами.

**Достоверность** полученных результатов обоснована адекватностью применяемых математических моделей реальным физическим процессам, согласием результатов моделирования с имеющимися аналитическими решениями и экспериментальными данными.

**Практическая значимость** работы заключается, прежде всего, в том, что полученные в диссертации результаты можно использовать при создании новых технологий наномембранного разделения газовых смесей. Помимо этого разработанные методики расчета и комплекс программ можно применять в учебном процессе, в частности, в курсах молекулярной физики, наномеханики и наночистоты, и для создания различных лабораторных практикумов.

Вместе с тем диссертация не свободна от недостатков.

- Основным является то, что модифицированный потенциал Леннарда-Джонса, используемый автором (потенциал (1.28)), является модельным и не был строго получен. Радиус обрезания отталкивательной части потенциала дос-



таточно произволен. Параметры потенциала, вообще говоря, не будут соответствовать константам потенциала Леннард-Джонса. Поэтому к конкретным численным значениям, полученным в решенных задачах, где этот потенциал применялся, следует относиться с осторожностью.

- В пункте 2.1. рассматривается взаимодействие пробной молекулы с упаковкой четырех наночастиц, однако из текста диссертации не ясно, каким потенциалом описывалось взаимодействие молекула-наночастицы. На стр. 59 указывается, что это потенциал РК, а на следующей – потенциал взят из работы [39]. Не ясно поэтому и какие параметры потенциалов использовались, хотя полученный вывод интересен.

- Потенциалы в разделе 1 описаны излишне подробно, тем более, что далее в работе они не используются.

- В качестве индексов в ряде случаев используются буквы и латинского, и русского алфавитов, что не принято и вызывает путаницу.

- В работе встречаются неописанные обозначения, что затрудняет ее чтение и анализ.

- В диссертации встречаются явно жаргонные определения, например, «сморщенный графен», «волнистый материал», «графеновая чешуйка» и т.п.

Несмотря на указанные замечания, диссертационная работа О.В. Усенко является законченным, цельным и современным научным исследованием. Большинство содержательных результатов, представляемых в данной диссертации, являются новыми, они полно и хорошо опубликованы в журналах из перечня ВАК и известны специалистам как у нас в стране, так и за рубежом. Текст автореферата соответствует содержанию диссертации. Тема и содержание диссертации соответствуют специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы по областям исследования «Динамика разреженных газов и молекулярная газодинамика» (п. 5 паспорта специальности), «Фильтрация жидкостей и газов в пористых средах» (п. 7 паспорта специальности).

Таким образом, данная диссертация удовлетворяет критериям, установленным п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней (постановление Правительства РФ от 24.09.13 г. № 842)», а ее автор Усенко Олеся Вадимовна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы.

Официальный оппонент Рудяк Валерий Яковлевич  
Заведующий кафедрой теоретической механики  
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения  
высшего образования «Новосибирский государственный архитектурно-  
строительный университет (Сибстрин)»  
докт. физ.-мат. наук, профессор

Рудяк В.Я.

630008, Новосибирск-8, ул. Ленинградская, 113;  
Тел. раб. 8 (383) 266-80-14,  
E-mail: valery.rudyak@mail.ru,



*Рудяк В.Я.*  
**ЗАВЕРЯЮ**  
Заведующий кафедрой теоретической механики  
ИИПЦ  
ЯКОВЫХ Н.И.  
*02.06.2017*