

СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Диссертационный совет Д 212.267.13, созданный на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», извещает о результатах состоявшейся 23 июня 2017 года публичной защиты диссертации Усенко Олеси Вадимовны «Взаимодействие молекул и атомов газовых компонент с углеродными структурами» по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Присутствовали 19 из 26 членов диссертационного совета, из них 6 докторов наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы:

1. Христенко Юрий Федорович, заместитель председателя диссертационного совета	д-р техн. наук	01.02.04
2. Васенин Игорь Михайлович, заместитель председателя диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.02.05
3. Пикущак Елизавета Владимировна, ученый секретарь диссертационного совета	канд. физ.-мат. наук	01.02.05
4. Архипов Владимир Афанасьевич	д-р физ.-мат. наук	01.02.05
5. Биматов Владимир Исмагилович	д-р физ.-мат. наук	01.02.05
6. Бубенчиков Алексей Михайлович	д-р физ.-мат. наук	01.04.14
7. Бутов Владимир Григорьевич	д-р физ.-мат. наук	01.04.14
8. Глазунов Анатолий Алексеевич	д-р физ.-мат. наук	01.02.05
9. Глазырин Виктор Парфирьевич	д-р физ.-мат. наук	01.02.04
10. Крайнов Алексей Юрьевич	д-р физ.-мат. наук	01.04.14
11. Кульков Сергей Николаевич	д-р физ.-мат. наук	01.02.04
12. Люкшин Борис Александрович	д-р техн. наук	01.02.04
13. Прокофьев Вадим Геннадьевич	д-р физ.-мат. наук	01.04.14
14. Скрипняк Владимир Альбертович	д-р физ.-мат. наук	01.02.04
15. Смоляков Виктор Кузьмич	д-р физ.-мат. наук	01.04.14
16. Тимченко Сергей Викторович	д-р физ.-мат. наук	01.02.05
17. Черепанов Олег Иванович	д-р физ.-мат. наук	01.02.04
18. Шрагер Геннадий Рафаилович	д-р физ.-мат. наук	01.02.05
19. Шрагер Эрнст Рафаилович	д-р физ.-мат. наук	01.04.14

В связи с невозможностью присутствия на заседании председателя диссертационного совета доктора физико-математических наук, профессора Гришина Анатолия Михайловича (по состоянию здоровья), по его письменному поручению заседание провёл заместитель председателя диссертационного совета доктор технических наук, старший научный сотрудник Христенко Юрий Федорович.

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 19, против – нет, недействительных бюллетеней – нет) диссертационный совет принял решение присудить О.В. Усенко учёную степень кандидата физико-математических наук.

**Заключение диссертационного совета Д 212.267.13
на базе федерального государственного автономного образовательного
учреждения высшего образования**

**«Национальный исследовательский Томский государственный университет»
Министерства образования и науки Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук**

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 23.06.2017, № 313

О присуждении **Усенко Олеся Вадимовне**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Взаимодействие молекул и атомов газовых компонент с углеродными структурами»** по специальности **01.02.05** – Механика жидкости, газа и плазмы принята к защите 18.04.2017, протокол № 308, диссертационным советом **Д 212.267.13** на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 105/нк от 11.04.2012).

Соискатель **Усенко Олеся Вадимовна**, 1984 года рождения.

В 2010 году соискатель окончила государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Томский государственный университет».

В 2016 году соискатель заочно окончила аспирантуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Работает в должности заместителя начальника отдела интеллектуальной собственности в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре теоретической механики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, **Бубенчиков Алексей Михайлович**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», кафедра теоретической механики, заведующий кафедрой.

Официальные оппоненты:

Рудяк Валерий Яковлевич, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (Сибстрин)», кафедра теоретической механики, заведующий кафедрой

Бушланов Владимир Петрович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Государственный морской университет имени адмирала Ф.Ф. Ушакова», кафедра «Ремонт судовых машин и механизмов», профессор

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки **Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук**, г. Новосибирск, в своем положительном отзыве, подписанном **Новопашиным Сергеем Андреевичем** (доктор физико-математических наук, лаборатория № 4.1 «Лаборатория разреженных газов», заведующий лабораторией) и **Смовжем Дмитрием Владимировичем** (кандидат физико-математических наук, лаборатория № 4.1 «Лаборатория разреженных газов», старший научный сотрудник), указала, что диссертационная работа О.В. Усенко является актуальной в связи с тем, что проблема газоразделения в целом, и выделения гелия из природного газа в частности, является одной из актуальнейших

проблем газовой отрасли, особенно в свете концепции повышения стоимости экспортируемого сырья. Стратегическое значение гелия объясняется его уникальными физико-химическими свойствами – инертностью и высокой энергией первой степени ионизации, самой низкой температурой кипения, которая обеспечивает у многих веществ проявление таких свойств, как сверхпроводимость и сверхтекучесть. Он используется в криогенных, сварочных, электротехнических, авиационных, космических технологиях и даже технологиях производства жидкокристаллических экранов. Поэтому изучение и математическое моделирование процессов молекулярной и атомарной фильтрации имеет большое значение. Полученные в ходе диссертационного исследования результаты могут быть использованы для разработки отечественной технологии выделения легких компонент (водород, гелий, изотоп гелий-3) из природного газа. В рамках проведенного исследования соискателем сформулирована математическая модель динамического взаимодействия молекул газовых компонент со сферическими наночастицами различных размеров и найденных характеристиках взаимодействия; получены результаты по взаимодействию He-C₆₀, CH₄-C₆₀, C₆₀-C₆₀; получен результат, подтвержденный экспериментально, заключающийся в том, что для слоев, составленных сферическими наночастицами, гелий имеет коэффициент прохождения в два раза превышающий соответствующую величину для многих двухатомных и трехатомных газов; определена проницаемость параллельно уложенных графеновых чешуек в отношении молекул метана и атомов гелия. Результаты, полученные в ходе выполнения диссертационного исследования, являются частью работы по разработке фундаментальных основ по созданию устройств для технологии мембранного разделения газовых смесей на основе математической модели эффективной мембраны, обладающей высокой селективностью по отношению к легким компонентам (гелию, водороду) природных и попутных нефтяных газов, а также для использования в установках для выделения водорода из синтез-газа. Разработанные методики расчета и комплекс программ для ЭВМ могут найти применение при подготовке научно-обоснованных рекомендаций по молекулярной физике, наномеханике и нанофильтрации.

Соискатель имеет 30 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 27 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 9 (из них 2 статьи в российском научном журнале, переводная версия которого индексируется Web of Science), в научных изданиях, индексируемых Web of Science и Scopus – 6, свидетельств о регистрации программы для ЭВМ – 9, публикаций в сборниках материалов международных научных конференций – 3. Общий объем публикаций – 7,0 п.л., авторский вклад – 1,63 п.л.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Наиболее значительные работы по теме диссертации, опубликованные в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук:

1. Бубенчиков А. М. Проницаемость туннеля из сферических наночастиц / А. М. Бубенчиков, М. А. Бубенчиков, А. И. Потехаев, **О. В. Усенко**, А. А. Шерстобитов // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2014. – № 5. – С. 69–75. – 0,38 / 0,08 п.л.

2. Потеряева В. А. Дифференциальная проницаемость ультратонкого пористого слоя монодисперсных наночастиц / В. А. Потеряева, **О. В. Усенко**, А. А. Шерстобитов // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2015. – № 2. – С. 96–102. – 0,38 / 0,13 п.л.

3. Бубенчиков А. М. Влияние формы графена на его способность сепарации газов / А. М. Бубенчиков, М. А. Бубенчиков, А. И. Потехаев, **О. В. Усенко**, С. Жамбаа, В. В. Кулагина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2015. – Т. 58, № 12. – С. 39–45. – 0,81 / 0,14 п.л.

в переводной версии журнала:

Bubenchikov A. M. The Effect of Graphene Shape on its Ability to Separate Gases / A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, A. I. Potekaev, **O. V. Usenko**, S. Zhambaa, V. V. Kulagina // Russian Physics Journal. – 2016. – Vol. 58, is. 12. – P. 1711–1719. – DOI: 10.1007/s11182-016-0706-y.

На автореферат поступило 7 положительных отзывов. Отзывы представили:

1. **С.В. Стовбун**, д-р физ.-мат. наук, заведующий лабораторией химической физики биосистем № 0152 Института химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, г. Москва, *с замечаниями*: Научная новизна работы неверно стилистически оформлена; в автореферате на рис. 10 и 11 графики для различных радиусов пор не различаются, поскольку имеют один цвет, стиль и толщину линии.
2. **В.А. Демин**, д-р физ.-мат. наук, заведующий кафедрой теоретической физики Пермского государственного национального исследовательского университета, *с замечаниями* о применении термина «сморщенный графен» и об оправданности предположения об абсолютной жесткости конструкции нанотрубки, принятой в ходе расчетов.
3. **А.М. Моисеенко**, д-р техн. наук, доц., профессор кафедры информационных технологий и математики Орловского государственного аграрного университета имени Н.В. Парахина, *с замечаниями* о степени разделения каучука в отношении метано-гелиевой смеси и о некорректности обозначения потенциала в правой части формулы (2).
4. **А.М. Гудов**, д-р техн. наук, доц., директор Института фундаментальных наук Кемеровского государственного университета, *с рекомендацией*: Наряду с тем, что было сделано, можно было бы подвергнуть молекулярному анализу такой материал, как фольга из наноуглерода, имеющий перспективы в отношении разделения газов.
5. **М.И. Шиляев**, д-р техн. наук, проф., профессор кафедры «Охрана труда и окружающей среды» Томского государственного архитектурно-строительного университета, *с замечанием*: В автореферате слабо отражены способы использования полученных теоретических результатов в прикладных, практических целях.
6. **А.И. Сафронов**, д-р физ.-мат. наук, доц., профессор кафедры «Нанотехнологии, материаловедение и механика» Тольяттинского государственного университета, *с замечанием*: Из автореферата неясно, можно ли с помощью разработанного подхода рассмотреть разделение газовых смесей на листе перфорированного графена с целью увеличения выхода гелия.
7. **Ю.А. Алтухов**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры Высшей математики Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, *без замечаний*.

В отзывах отмечается, что актуальность диссертационного исследования О.В. Усенко 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. Для решения поставленных задач в диссертационной работе О.В. Усенко были использованы современные экспериментальные методы, такие как метод классической молекулярной динамики, метод молекулярной баллистики, метод эквивалентного однородного слоя для расчета проницаемости ультратонких слоев. Результаты проведенных исследований согласуются с основными результатами и выводами работы. Сформулирована математическая модель динамического взаимодействия молекул газовых компонент со сферическими наночастицами, а также обнаружены характеристики их взаимодействий. Решена задача о рассеянии молекул наночастицей. Проведены численные исследования по определению энергий взаимодействия и проницаемости пространственных структур из наночастиц, а также двойных и тройных слоев плотно уложенных наночастиц. Также было изучено взаимодействие молекул с наноструктурами и фильтрующие свойства простейшей системы, состоящей из двух графеновых пластин. Получена энергия воздействия от плоских и сморщенных графеновых листов бесконечных и конечных размеров. На их основе изучено прохождение молекул через поры в этих структурах. После чего методом эквивалентного однородного слоя найдена проницаемость слоя, составленного графеновыми чешуйками, а также селективность их разделения в отношении метаново-гелиевой смеси. По данной характеристике получено хорошее согласование с имеющимися экспериментальными данными.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **В.Я. Рудяк** является известным специалистом в вопросах кинетической теории плотных и разреженных газов, процессов переноса в газах, жидкостях и наножидкостях, неравновесной статистической механики процессов переноса,

гидро- и аэромеханики гомогенных и гетерогенных сред; **В.П. Бушланов** является известным специалистом в вопросах исследования, в том числе и численного фундаментальных закономерностей динамики аэродисперсных систем; **Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН** известен своими достижениями в области динамики разреженных газов, волновой динамики многофазных систем, теплофизических основ создания новых материалов, наноразмерных систем, топливных элементов и водородной энергетики.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана технология численного интегрирования уравнений динамики молекул в объеме, содержащем наночастицы различных размеров, на основе потенциала В.Я. Рудяка и С.Л. Краснолуцкого;

установлено с помощью применения подходов и методов классической молекулярной динамики, что при прохождении слоя, составленного крупными объемными наночастицами углерода, гелий имеет коэффициент прохождения в два раза выше, чем у других рассмотренных компонент. Этот результат подтверждается данными экспериментов по нанопористой керамике из диоксида циркония, а также для других пористых материалов, относительно которых этот уровень разделения по гелию остается тем же самым при заданной пористости;

найденны силовые характеристики взаимодействия для графенов любой формы, в частности, для волнистых графенов: линейчатого и шахматного. Эти оценки проведены с помощью интегрируемой модификации потенциала Леннарда-Джонса и континуального подхода в описании энергии воздействия от поверхности двумерного кристалла;

получены зависимости, определяющие потенциальное взаимодействие фуллеренов, графенов, нанотрубок с молекулами, позволяющие решить задачи о прохождении молекул через наноструктуры, составленные этими объектами;

найденны характерные распределения энергии взаимодействия в направлении, перпендикулярном слою, для моно- и многоатомных слоев;

рассчитаны предельная минимальная скорость прохождения молекул и коэффициент прохождения слоя параллельно уложенных графеновых чешуек.

Теоретическая значимость исследований обоснована тем, что:

построены зависимости, определяющие потенциальные воздействия на молекулы от фрагментов нанопористой структуры, которые позволяют теоретически рассматривать задачи о прохождении молекул через ультратонкие слои и делать заключения о селективных свойствах разрабатываемых мембран;

разработана математическая модель взаимодействия молекул с множеством наночастиц различного размера, расширяющая возможности применения методов математического моделирования в задачах прохождения молекул через нанопористые структуры;

получены результаты, раскрывающие механизмы фундаментального взаимодействия молекул с нанопористыми структурами и являющиеся важным вкладом в развитие молекулярной физики, наномеханики и нанофильтрации;

реализован метод эквивалентного однородного слоя, позволяющий к статистическому процессу взаимодействия молекул с мембраной применить детерминированную технологию расчета проницаемости.

Значение полученных соискателем результатов исследований для практики подтверждается тем, что:

построен комплекс математических моделей, позволяющих определить относительную проницаемость слоев из углеродных материалов и прогнозировать степень разделения бинарных газовых смесей;

получены результаты, которые могут использоваться в учебном процессе при подготовке специалистов по молекулярной физике, наномеханике и нанофильтрации.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования. Разработанные в диссертации математические модели могут использоваться при решении широкого круга задач, связанных с моделированием прохождения молекул газов через нанопористые структуры, составленные из различных материалов. Разработанные численные модели могут быть использованы при конструировании эффективных мембран для разделения бинарных и многокомпонентных газовых смесей и могут быть рекомендованы для применения в образовательных учреждениях и академических институтах, которые занимаются исследованием молекулярной динамики и физических свойств

нанопористых систем, таких как Национальный исследовательский Томский государственный университет, Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН (г. Новосибирск), Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН (г. Новосибирск), Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН (г. Новосибирск), Тольяттинский государственный университет, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул) и в других образовательных, научных, академических и проектных организациях.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

математическая модель построена на основе фундаментальных законов газовой динамики и адекватна реальным физическим процессам, что доказывается исследованием асимптотического поведения механических систем в предельных случаях, когда результат является физически убедительным;

для решения задач использованы хорошо апробированные численные методы; правильность данных численного анализа подтверждается систематическими тестовыми проверками и определяется совпадением результатов при уменьшении шага вычислений и при повышении точности расчетов с четвертого до восьмого порядка точности численной схемы;

проведено сравнение результатов вычислений с имеющимися аналитическими решениями, с утверждениями теорем классической механики и имеющимися экспериментальными данными других исследователей.

Новизна результатов диссертационного исследования заключается в формулировке математической модели динамического взаимодействия молекул газовых компонент со сферическими наночастицами различных размеров и найденных характеристиках взаимодействия. В рамках диссертационного исследования были впервые получены результаты по взаимодействию молекул фуллерена с атомами гелия, молекулами метана, а также по взаимодействию двух молекул фуллерена. С использованием разработанных моделей и алгоритмов были проведены численные исследования, в результате которых впервые был установлен характер проницаемости параллельно уложенных графеновых чешуек в отношении молекул метана и атомов гелия. Также был получен экспериментально подтвержденный результат, заключающийся в том, что для слоев, составленных

сферическими наночастицами, гелий имеет коэффициент прохождения, в два раза превышающий соответствующую величину для многих двухатомных и трехатомных газов.

Личный вклад соискателя состоит в: получении основных численных результатов, выносимых на защиту, в проведении тестирования построенных численных моделей, выполнении расчетов; осуществлении совместно с научным руководителем постановки всех задач диссертации, построении математических моделей взаимодействия молекул и атомов с нанопористыми фрагментами проницаемых структур, проведении анализа полученных физических результатов, а также обсуждения результатов исследования, формулировки выводов и заключений по материалам исследований, подготовке основных публикаций по теме диссертации.

Диссертация отвечает критериям Положения о присуждении ученых степеней, установленным для диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, и, в соответствии с пунктом 9 Положения, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи о прохождении атомов гелия через конкретные формы углеродных нанопористых структур, имеющих значение для развития наномеханики, нанофильтрации, а также механики жидкости и газа.

На заседании 23.06.2017 диссертационный совет принял решение присудить **Усенко О.В.** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 6 докторов наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы, участвовавших в заседании, из 26 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 19, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Заместитель председателя
диссертационного совета
Ученый секретарь
диссертационного совета



Христенко Юрий Федорович

Пикушак Елизавета Владимировна

23.06.2017