

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 22 сентября 2017 года публичной защиты диссертации Тарасова Егора Александровича «Взаимодействие нанообъектов на основе углерода с компонентами природного газа» по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

На заседании присутствовали 19 из 26 членов диссертационного совета, из них 7 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.	Ворожцов Александр Борисович	д-р физ.-мат. наук	01.02.05
9.	Глазунов Анатолий Алексеевич	д-р физ.-мат. наук	01.02.05
10.	Глазырин Виктор Парфирьевич	д-р физ.-мат. наук	01.02.04
11.	Зелепугин Сергей Алексеевич	д-р физ.-мат. наук	01.02.04
12.	Крайнов Алексей Юрьевич	д-р физ.-мат. наук	01.04.14
13.	Люкшин Борис Александрович	д-р техн. наук	01.02.04
14.	Прокофьев Вадим Геннадьевич	д-р физ.-мат. наук	01.04.14
15.	Скрипняк Владимир Альбертович	д-р физ.-мат. наук	01.02.04
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 его письменному поручению заседание ведет 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 Е.А. Тарасову 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 22.09.2017, № 323

О присуждении **Тарасову Егору Александровичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Взаимодействие нанообъектов на основе углерода с компонентами природного газа»** по специальности **01.02.05** – Механика жидкости, газа и плазмы принята к защите 04.07.2017, протокол № 318, 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 **Тарасов Егор Александрович**, 1987 года рождения.

В 2012 году соискатель окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

В 2017 году соискатель очно окончил аспирантуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Работает в должности ассистента кафедры теоретической механики 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:

Алтухов Юрий Александрович, доктор физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный педагогический университет», кафедра теоретических основ информатики, профессор

Смовж Дмитрий Владимирович, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория разреженных газов, старший научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки **Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук**, г. Новосибирск, в своем положительном отзыве, подписанном **Федоровым Александром Владимировичем** (доктор физико-математических наук, лаборатория волновых процессов в ультрадисперсных средах, заведующий лабораторией), указала, что актуальность темы исследования обусловлена научным интересом к различным нанообъектам и материалам на их основе, а также перспективностью применения подобных материалов в различных отраслях производства. Перспективной представляется проблематика выделения гелия из природного газа с помощью углеродных наноструктур. Наряду с листами пористого графена при

конструировании нанопористых мембран могут быть использованы открытые нанотрубки и фуллерены. Е.А. Тарасовым создана новая математическая модель взаимодействия молекул и атомов с фуллереновыми частицами; предложен новый способ определения положений атомов углерода на фуллереновой сфере, заключающийся в построении и применении математической модели расстановки узлов на фуллереновой сфере; впервые коллективом с участием автора создана и реализована методика расчета относительной и абсолютной проницаемости укладок открытых одностенных и двухстенных нанотрубок; получены результаты по схеме подсчета количества сорбционных молекул около нанотрубок и фуллеренов; впервые получены численные данные по дифференциальной проницаемости фуллерита; расчетами найден размер пор материала, обеспечивающий прохождение атомов гелия и непрохождения более крупных молекул метана, азота и других газов; представлена математическая модель взаимодействия перемещающейся молекулы с множеством фуллереновых частиц; рассмотрена континуальная модель фуллереновой частицы C_{60} ; описан процесс прохождения молекул через пористую сферическую графеноподобную структуру; представлена механическая модель расстановки узлов по фуллереновой сфере; рассмотрено сорбционное движение молекул и атомов при псевдооднородном заселении фуллереновой сферы; определены доля частиц, попавших в сорбционную зону фуллерена, и количество сорбционных молекул.

Соискатель имеет 18 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 13 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 3, в зарубежных научных изданиях, индексируемых Web of Science и / или Scopus – 4, свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ – 1, публикаций в сборниках материалов научного семинара, международных и всероссийских (в том числе с международным участием) научных и научно-практических конференций – 5. Общий объем публикаций – 3,93 п.л., авторский вклад – 1,34 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. Разделение метано-гелиевой смеси с помощью пористого графена / А. М. Бубенчиков, М. А. Бубенчиков, **Е. А. Тарасов**, О. В. Усенко, А. С. Челнокова // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2017. – № 45. – С. 80–87. – DOI: 10.17223/19988621/45/7. – 0,4 / 0,08 п.л.

2. Бубенчиков М. А. Режимы взаимодействия низкоэнергетических молекул с открытой нанотрубкой / М. А. Бубенчиков, А. М. Бубенчиков, О. В. Усенко, **Е. А. Тарасов** // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2016. – № 3 (41). – С. 58–64. – DOI: 10.17223/19988621/41/6. – 0,44 / 0,09 п.л.

3. Жаровцев В. В. Проницаемость системы из двух наночастиц / В. В. Жаровцев, А. С. Маслов, В. В. Овчаренко, **Е. А. Тарасов**, А. В. Ямкин // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2014. – Т. 57, № 8/2. – С. 138–141. – 0,34 / 0,09 п.л.

На автореферат поступило 2 положительных отзыва. Отзывы представили:

1. **М. И. Шиляев**, д-р техн. наук, профессор кафедры охраны труда и окружающей среды Томского государственного архитектурно-строительного университета, *с замечанием*: В разделе автореферата, определяющем актуальность темы диссертации, подчеркивается производственная потребность углубленного теоретического исследования выделения гелия из природного газа с помощью углеродных наноструктур, однако ни в практической значимости полученных в диссертации результатов, ни в ее выводах не просматриваются конкретные предложения способов их практической реализации в промышленных условиях.
2. **П. Н. Зятиков**, д-р техн. наук, профессор кафедры разработки и эксплуатации нефтяных и газовых месторождений Национального исследовательского Томского политехнического университета, *с замечанием*: В работе рассмотрены лишь

углеродные материалы, в то же время для задач газоразделения большой интерес представляют полимерные материалы (углеводородные, фтор-углеродные), металлы, их оксиды (диоксид циркония), композитные материалы и биологические ткани.

В отзывах отмечается, что актуальность диссертационного исследования Е.А. Тарасова связана с решением задачи о симметричном распределении энергии взаимодействия от фуллереновой частицы, известным с 2000 г., но не позволявшим получить зоны сорбционного движения молекул из-за гипертрофированного действия сил отталкивания, обусловленного слишком большой особенностью исходного потенциала при нулевых значениях сближения частиц. Эта особенность усиливается за счет интегрирования по поверхности, в результате сорбционная зона практически исчезает. Е.А. Тарасовым выполнена (в составе исследовательской группы) модификация потенциала Леннарда-Джонса, что позволило наряду с дискретной моделью фуллерена использовать континуальную модель для описания сорбционного движения молекул вокруг фуллереновой наночастицы; исследовано взаимодействие различных типов углеродных нанотрубок с компонентами смеси газов; смоделированы различные укладки нанотрубок, что позволяет продвинуться в вопросе создания макроскопических фильтрующих материалов, в которых подобные укладки нанотрубок будут выступать в качестве элементарных элементов фильтрации; для большинства конкретных расчетов представлена величина погрешности проводимых вычислений по величине полной энергии. Полученные Е.А. Тарасовым решения, использующие энергетическую информацию лишь в отношении параметров межмолекулярного потенциала, являются математически замкнутыми и составляют результат теории, которая для своего существования не требует постановки сопутствующих дорогостоящих экспериментов по получению и применению в технологиях разделения газов нанопористыми материалами определенной структуры. Результаты диссертационного исследования Е.А. Тарасова могут послужить теоретической базой для проведения опытов по проницаемости углеродных слоев макроскопического размера.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается

тем, что **Ю.А. Алтухов** является известным специалистом в вопросах использования параллельных вычислений в моделировании гидродинамических процессов и динамики линейных макромолекул, моделирования процессов получения углеродных нановолокон, пленок, полимеров и углеволокнистых композитов, а также в использовании вероятностных методов при решении задач математической физики; **Д.В. Смовж** является известным специалистом в вопросах получения и исследования углеродных нанопористых структур, исследования неравновесных процессов в разреженном газе и плазме, синергетике молекулярных систем; **Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН** известен своими достижениями в области решения современных проблем механики, аэрогидродинамики сверх- и гиперзвуковых течений, гидродинамической устойчивости, пограничного слоя, теории смешения и горения топлив в сверхзвуковых потоках, механики многофазных сред с учётом физико-химических превращений, плазмодинамики и прочности.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

реализован континуальный поход в определении энергии взаимодействия молекул с элементами структуры слоя, и на его основе *найден* двумерное распределение энергии всего слоя, которое используется в дальнейшем для решения одномерной задачи прохождения молекул через энергетический барьер;

приведена постановка задачи о расстановке узлов кристаллической сети на сферической поверхности фуллерена. Данная постановка приводит к модели динамических систем, реализация которой дает численное решение задачи с заданной точностью;

найден значения предельных скоростей сорбционного движения для всех основных компонент природного газа;

предложена схема подсчета количества сорбционных молекул для каждой из компонент природной смеси в окрестности отдельно взятой фуллереновой частицы;

предложена технология расчета селективности слоев, составленных двустенными и одностенными открытыми нанотрубками;

установлено, что селективность разделения метаново-гелиевых смесей

посредством слоев с двустенными открытыми нанотрубками может быть выше пятидесяти единиц;

установлено, что для рассмотренных в работе укладок трубок слой, составленный из этих трубок, работает как сепаратор при величинах сближения трубок h от 0,3 до 1 нм, но наибольший эффект по степени разделения дают укладки двустенных трубок.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

решена задача об энергетическом барьере, составленном из двух молекул фуллерена, для компонент природной смеси газов, что позволяет утверждать, что подход молекулярной газодинамики является пригодным для изучения задач о прохождении молекул через нанопористые структуры, составленные подобными частицами;

приведена постановка задачи (в рамках классической механики) о расстановке узлов кристаллической сети на сферической поверхности фуллерена, позволяющая построить модели динамических систем, реализация которых дает численное решение задачи с наперед заданной точностью;

разработана математическая модель взаимодействия молекул с множеством фуллереновых частиц или углеродных нанотрубок, расширяющая возможности применения методов математического моделирования в задачах прохождения молекул через нанопористые структуры.

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

получены результаты по взаимодействию атомов и молекул газов с наноструктурными элементами, которые могут использоваться в учебном процессе при подготовке специалистов по молекулярной физике и наномеханике;

результаты численных расчётов диссертационного исследования применяются в работе лаборатории молекулярной динамики Научно-исследовательского института прикладной математики и механики Национального исследовательского Томского государственного университета, что подтверждается актом о внедрении методики расчёта проницаемости ультратонких квазиоднородных нанопористых слоев.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования. Разработанные в диссертации математические модели и подходы могут использоваться при решении широкого круга задач, связанных с моделированием прохождения молекул и атомов различных газов через углеродные наноразмерные структуры. 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:

достоверность результатов исследования обеспечена оценкой погрешности расчетов полной энергии исследуемой системы, тестированием вычислительных алгоритмов на тестовых задачах, а также контролем накопившихся ошибок вычислений практически при каждом выполненном расчете;

математическая модель построена на основе фундаментальных законов молекулярной газодинамики, таких как законы Ньютона в случае движения в Гамильтоновой системе, закон распределения молекул по скоростям (закон Максвелла), а вычислительная модель 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, а также контролем накопившихся ошибок вычислений практически при каждом выполненном расчете.

Научная новизна результатов исследования заключается в том, что автором создана новая математическая модель взаимодействия молекул и атомов с фуллереновыми частицами, а также с нанотрубками; в работе предложен новый способ, позволяющий определить положение атомов углерода на фуллереновой сфере, который заключается во впервые предложенной математической модели расстановки узлов на фуллереновой сфере; впервые коллективом с участием автора была создана и реализована методика расчета относительной и абсолютной проницаемости укладок открытых одностенных и двухстенных нанотрубок; получены результаты по схеме подсчета количества сорбционных молекул около нанотрубок и фуллеренов.

Личный вклад соискателя состоит в: модификации численных моделей, проведении расчетов, обработке и анализе результатов, подготовке основных статей и докладов на конференциях. Совместно с научным руководителем были сформулированы цель, задачи и основные положения диссертационной работы, проведены обсуждения полученных результатов.

Диссертация отвечает критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней 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, имеющей значение для развития наномеханики, нанофильтрации, механики жидкости и газа.

На заседании 22.09.2017 диссертационный совет принял решение присудить **Тарасову Е. А.** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 7 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

22.09.2017



Христенко Юрий Федорович

Пикушак Елизавета Владимировна