

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу **Михаила Алексеевича Бубенчикова**  
**«Математические модели взаимодействия молекул газовых компонент  
с наночастицами и нанопористыми структурами»**, представленную  
на соискание ученой степени доктора физико-математических наук  
по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Активное исследование различных микро- и наносистем является одним из главных направлений развития современной науки. Связано это в первую очередь с многочисленными практическими приложениями. Сегодня общим местом является применение наночастиц, углеродных нанотрубок, наножидкостей, мембран и т.п. в самых разных отраслях промышленности. С другой стороны, оказалось, что указанные мезообъекты имеют нестандартные физические свойства, которые, как правило, не описываются классическими теориями. В силу малости наносистем их экспериментальное исследование в ряде случаев затруднено, а нередко и невозможно. По этой причине моделирование свойств таких объектов часто является единственным средством получения необходимой информации. Одним из главных методов получения такой информации является метод молекулярной динамики. Целью диссертационной работы Бубенчикова М.А. и является применение этого метода для решения различных задач о молекулярно-динамическом моделировании взаимодействия молекул газа с фуллеренами, нанопористыми мембранами различного формата, в том числе из углеродных нанотрубок. Таким образом, тематика данной диссертационной работы вполне актуальна. Она имеет и важную прикладную составляющую, поскольку в качестве приложения разрабатываемых методов решаются задачи о разделении смесей газов, дифференциации углеродных материалов, анализе конструкций наномембран, обладающих высокой производительностью и селективностью.

Молекулярно-динамическое моделирование столь сложных объектов требует и разработки адекватного инструментария. Его разработка, в частности, ряда потенциалов взаимодействия молекул с различными наносистемами делает диссертационную работу и теоретически важной.

Диссертационная работа Бубенчикова М.А. состоит из введения, десяти глав, заключения, списка литературы и приложения. Работа содержит 335 страниц. **Во введении** сформулированы цель и задачи диссертации, основные положения, выносимые на защиту, обсуждается личный вклад автора.

**Первая глава** является вводной, в ней обсуждаются преимущественно хорошо известные вещи, а предлагаемые простые модели для определения колебаний димеров и некоторых более сложных систем в общем тривиальны и с точки зрения дальнейшего содержания диссертации фактически не нужны. Так что эту главу вполне стоило бы опустить тем более, что диссертация явно перегружена главами.

**Во второй главе** предлагается некоторая аналитическая модель определения средней силы, действующей в газе на наночастицу, графеновую чешуйку,

нанотрубку. Основой нахождения этой силы является простая модель вычисления импульса передаваемого бесконечной плоской двигающейся с заданной скоростью стенке при зеркальном отражении от нее молекул равновесного газа. Такая задача вполне может быть решена точно, но автор вводит некоторые модельные представления (формулы (2.10), (2.12) и (2.13)), которые затем использует для интерпретации полученного выражения для силы, действующей на наночастицу, графеновую чешуйку. К полученным так результатам следует относиться очень осторожно. В частности, из формулы (2.15) нельзя получить (2.22), безосновательной выглядит и оценка (2.23). Стоит заметить, что последняя получена в результате свободномолекулярного моделирования взаимодействия наночастицы с молекулами газа. Соответствующий результат в кинетической теории хорошо известен. При такой постановке задачи, вообще говоря, нельзя ввести конечное число Кнудсена. С этой точки зрения сопоставление с данными силы сопротивления, полученной с учетом известной корреляции Каннингема–Милликена–Дэвиса выглядит неправомерной.

Говорить о термофорезе наночастиц в общем случае нельзя, это требует физически нереализуемых градиентов температуры на поверхности наночастицы. Можно вести речь лишь о термодиффузии наночастиц. Впрочем, эта ошибка в литературе достаточно распространена.

**В третьей главе** рассмотрено две задачи. Первая связана с электрогравитационным разделением смеси частиц высокомолекулярного углерода (фуллеренов, нанотрубок и т.д.). Задача решается в скрещенных электрическом и гравитационном полях. Формулируемые здесь выводы основаны на чрезвычайных упрощениях, когда уравнения движения частиц вообще не решаются. Не ясно, зачем было это делать, поскольку и в общем случае задача решалась достаточно просто. А в постановке, использованной автором, сделанные им выводы в общем случае неправомерны.

Вторая задача связана с разделением наногазовзвеси при центрифугировании. В принципе достаточно интересная задача, в общем сравнительно легко решаемая и в рамках одножидкостного, и в рамках двухжидкостного подходов. Можно движение частиц рассматривать и лагранжевым методом. Автор делает попытку решить задачу в модельной постановке. Динамика наночастицы описывается просто уравнением Ньютона, в котором естественным образом появляется сила сопротивления со стороны газа, сила Кориолиса. Однако недоумение вызывает еще одна сила, которую автор называет переносной силой инерции. Появление переносной силы инерции вполне понятно, однако ее введение в виде, предложенном автором, должно мотивироваться.

По-видимому, самым интересным результатом этой главы является моделирование сепарация ксенона при его центрифугировании из смеси с воздухом. Любопытны также устойчивые слаботочные течения в циклонной камере и массоперенос, возникающий в этом случае.

**В четвертой главе** исследуются колебания нанотрубок в вакууме и воздушной среде. Изучается вращение магнитовосприимчивой нанотрубки в

слабых магнитных полях. Задача решается в рамках классических уравнений Эйлера. При постановке этой же задачи для газовой фазы, для момента сопротивления используется сила сопротивления, полученный в главе 2. Этого делать нельзя, что несколько снижает значимость полученного результата. Поэтому к выводу о том, что в газовой среде движения трубок становятся аperiодическими и сводятся к их повороту до направления внешнего магнитного поля, следует относиться с осторожностью.

Вторая задача связана с изучением характера вращения фуллеренов в пластической фазе фуллерита. Задача решается в модельной постановке, когда выделяется некоторый фуллерен и рассматривается его эволюция в среде окружающих его неподвижных фуллеренов, двигаться которые не могут. Показано, что причиной вращения фуллеренов является несимметричное расположение атомов углерода относительно центра любого из фуллеренов. Несмотря на столь простую формулировку задачи, найденная частота вращения фуллеренов соответствует экспериментальным данным, полученным с использованием ЯМР.

**Пятая глава** небольшая, фактически вспомогательная, ее вполне можно было объединить либо со второй, либо с шестой. Тем не менее здесь получен интересный результат. В развитие подхода, предложенного при выводе потенциала взаимодействия Рудяка–Краснолуцкого молекул газа с наночастицей, построен потенциал взаимодействия молекул газа с бесконечной цилиндрической трубкой и бесконечной нитью.

**Шестая глава** посвящена исследованию газовой проницаемости нанопористых структур. Установлено, что если материал имеет систему туннельных пор, то движение молекул через эти поры реализуется в кинетическом режиме со средней скоростью, превышающей скорость молекул на входе в структуру. В связи с этим многие материалы, имеющие прямолинейные нанопоры, не содержат внутри себя сорбционных молекул.

Для фуллерита при оценке величины проницаемости предложено использовать величину площади окна проницаемости, отвечающую локальной скорости прохождения молекулярных компонент. Для укладок нанотрубок при определении относительной проницаемости удобной оказалась барьерная теория прохождения молекул.

**В седьмой главе** предлагается некоторая модификация потенциала Леннарда–Джонса. Модификация спорная. Действительно автор на стр. 192 указывает, что «соотношение (7.1) можно переписать в виде (7.2)». Это, конечно, не так. Эти две формулы не эквивалентны. Фактически (7.2), меняя несколько притягивающую часть потенциала, обрезает его отталкивание. Это в свою очередь приводит к тому, что при молекулярно-динамическом моделировании соответствующих процессов могут получаться нефизические эффекты.

**В восьмой главе** представлена модель прохождения пучка молекул через пористый графен с учетом сорбционных молекул, существующих в окрестности многоатомной пленки. Рассчитан характер взаимодействия пучков атомов гелия и молекул метана с графеновым барьером. Рассмотрены также составные

барьеры из двух сверхтонких слоев. Показано, что молекулы метана практически не проходят сквозь симметричную пору, полученную наиболее симметричным исключением двенадцати узлов кристаллической структуры графена. В то же время узкие перпендикулярно направленные пучки гелия проходят полностью.

**В девятой главе** изучаются процессы фильтрации молекул газа через различные нановолокнистые материалы и их проницаемость. В частности, рассмотрены и наномембраны созданные укладкой углеродных нанотрубок. Определяется коэффициент прохождения молекул.

Построенный потенциал взаимодействия нанонить–молекула позволил для нитей определенного поперечного размера найти эффективные минимальные радиусы сближения свободных молекул и нитей и аппроксимировать эти распределения аналитическими зависимостями. На основе этих распределений, а также с использованием распределения Максвелла по скоростям найдена доля молекул конкретной компоненты прошедших через регулярную плоскую укладку нитей по отношению к количеству падающих молекул этой же компоненты.

**Десятая глава** посвящена изучению криогенного прохождения изотопов гелия через мембраны, составленные двумя одинаковыми сверхтонкими слоями пористых 2D-материалов. Показано, что в зависимости от сорта изотопа такие барьеры либо отражают атом, либо позволяют ему пройти через потенциальный барьер. Установлено, что коэффициент прохождения компоненты резонансным образом зависит от расстояния между барьерами. Это расстояние коррелирует с волной де Бройля фильтруемых атомов, поэтому удается найти расстояния, при которых селективность просеивания достигает максимальных значений. Полученный эффект является квантово-механическим.

**В заключении** сформулированы основные полученные в диссертации результаты, а приложение содержит отпечатки свидетельств о регистрации программ диссертанта.

В целом диссертационная работа Бубенчикова М.А. написана неплохим языком. Вместе с тем она не свободна от недостатков как принципиального свойства, так и редакционных. Большинство принципиальных выше уже отмечались. Есть еще одно, упоминание которого необходимо для выработки правильного отношения к ряду полученных данных.

Стоит понимать, что молекулярно-динамическое моделирование проницаемости различных пористых структур фактически проводилось в свободномолекулярном режиме и без учета адсорбции. Поэтому к полученным значениям коэффициентов проницаемости нужно относиться с достаточной осторожностью, хотя многие полученные результаты качественно вполне разумны.

Далее, выведенные коэффициенты сопротивления получались лишь при учете зеркального отражения молекул от поверхности, что на практике обычно не реализуется. Необходимо было рассмотреть диффузный и зеркально-диффузный закон отражения с вариацией соответствующих коэффициентов аккомодации.

Наконец, необходимо отметить имеющиеся многочисленные стилистические и семантические ошибки, часто не позволяющие понять, что хотел сказать автор. Например, одна из задач диссертационной работы сформулирована так: «Исследовать возможности выделения ксенона из смеси азота с кислородом способом центрифугирования» (стр. 15). Или другая – «построить аналитические и расчетные распределения энергии воздействия от нанонити и полый капсулы». Также невнятно формулируется и ряд положений, выносимых на защиту. Например, «результаты решения задач молекулярной статистики, обобщенные в виде критериальных зависимостей для вероятности столкновений молекул с частицами различной формы» (стр. 18). К сожалению, этот перечень можно продолжить.

Тем не менее в работе получен ряд интересных новых результаты, среди которых в первую очередь следует отметить такие.

- Вывод потенциала взаимодействия изолированной молекулы газа с бесконечной нанотрубкой и нанонитью.
- Изящное решение задачи о криогенном прохождении изотопов гелия через составной энергетический барьер, формируемый двухслойной мембраной.
- Результаты моделирования прохождения пучков молекул газа через различные нановолокнистые и графеновые материалы.
- Результаты изучения вторичных течений в замкнутых циклонных камерах и данные по выделению ксенона из смеси с воздухом.

**Достоверность и обоснованность большинства результатов и выводов** подтверждается использованием проверенных технологий математического моделирования, систематической верификацией используемых для моделирования алгоритмов, сопоставлением данных моделирования с известными аналитическими решениями, сравнением с экспериментальными результатами других авторов. Полученные результаты вполне достаточно опубликованы и докладывались на ряде всероссийских конференциях. Правда стоит отметить, что абсолютное большинство статей опубликовано в двух журналах ТГУ и докладывались на конференциях, которые проходили лишь в Томске.

Оценивая работу в целом, необходимо отметить, что она является достаточно объемным и законченным научным исследованием. Автореферат соответствует содержанию диссертации. Тема диссертационной работы **Бубенчикова Михаила Алексеевича «Математические модели взаимодействия молекул газовых компонент с наночастицами и нанопористыми структурами»** соответствует специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы по областям исследования: «Динамика разреженных газов и молекулярная газодинамика» (п. 5 паспорта специальности), «Течения многофазных сред (газожидкостные потоки, пузырьковые среды, газовзвеси, суспензии, эмульсии)» (п. 6 паспорта специальности), «Фильтрация жидкостей и газов в пористых средах» (п. 7 паспорта специальности), «Аналитические, асимптотические и численные методы исследования уравнений кинетических и континуальных моделей однородных и

многофазных сред (конечно-разностные, спектральные, методы конечного объема и др.)» (п. 18 паспорта специальности).

Таким образом, данная диссертация полностью соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемых ВАК РФ к докторским диссертациям, а ее автор **Бубенчиков Михаил Алексеевич** заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы.

Официальный оппонент

профессор кафедры теоретической механики  
федерального государственного бюджетного  
образовательного учреждения высшего образования  
«Новосибирский государственный архитектурно-  
строительный университет (Сибстрин)»  
(630008, Новосибирск, ул. Ленинградская, 113;  
(383) 266-41-25, [rector@sibstrin.ru](mailto:rector@sibstrin.ru),  
[https:// http://www.sibstrin.ru](https://http://www.sibstrin.ru)),  
доктор физико-математических наук  
(01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы),  
профессор

Валерий Яковлевич Рудяк



Дата: 02 июня 2020 г.

