

ОТЗЫВ

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

Преобразования, идущие в современных условиях в сфере мирового высокотехнологичного производства, характеризуются широким внедрением нанотехнологий. Эти преобразования затрагивают проблемы очистки и опреснения воды, извлечения чистых веществ из природных материалов с уникальными свойствами. Кроме того, изменение экологической обстановки и связанное с этим повышение экологических требований приводят к необходимости разработки новых альтернативных источников энергии. Радикальное решение этих проблем возможно лишь с применением нанотехнологий.

Автор диссертационного исследования направил свои усилия на решение проблем разделения смесей наночастиц высокомолекулярного углерода, смесей наночастиц с воздухом, а также газовых смесей, включая компоненты гелия и гелиона, находящиеся в природном газе. При разделении газов можно исходить из экономичных мембранных технологий, опирающихся на применение современных пористых 2D-материалов. Однако вопросы применения таких технологий требуют глубокого теоретического изучения механизмов переноса массы через нанопористые мембраны, а также разработки и оптимизации конструкций самих мембран, которые могут быть выполнены лишь теоретическим методом.

Во введении говорится об актуальности исследования: о переработке газа и о добыче гелия из природной смеси, сформулирована цель исследования, отражены научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, сформулированы положения, выносимые на защиту.

В первой главе представлены общие сведения из классической механики, являющиеся теоретической основой построений по разработке моделей сопротивления наночастиц. Рассмотрены также вопросы определения главных частот колебаний в упругих сетях с сосредоточенными массами. Обозначена связь формализма Гамильтона–Якоби с волновой динамикой Шредингера.

Во второй главе теорема о количестве движения системы сформулирована для случая двустороннего воздействия молекул на перемещающуюся частицу и на ее основе найден импульс, переданный частице каждой столкнувшейся с ней молекулой. Далее произведен учет

распределения по скоростям молекул и показано, что при определении доли столкнувшихся с частицей молекул вполне подходящим является моноскоростное приближение для газового окружения. После чего построены критериальные зависимости безразмерного коэффициента сопротивления то чисел Кнудсена для графеновых чешуек, сферических частиц и цилиндрических фрагментов.

Рассмотрен также термофорез наноразмерных частиц, и для сферических частиц получено хорошее согласование с экспериментальными данными Е. А. Черновой, А. Е. Турецкого, Г. Н. Липатова. Кроме этого, показано, что графеновые чешуйки подвержены большему влиянию термофоретического действия, нежели сферические частицы.

Третья глава посвящена обсуждению метода электрогравитационного осаждения углеродных наночастиц и вопросам центрифугирования ксенона во вращающихся замкнутой и слабопроточной камерах. Найдены углы выпадения частиц в электрогравитационном методе и определены частоты вращения барабанов, позволяющие выделить ксенон из воздушной смеси за реальное время работы центрифуги.

В четвертой главе рассмотрены условия перемещения наночастиц, в частности колебания магнитовосприимчивых трубок и их апериодические повороты в воздушной среде. Решена задача о движении молекул C_{60} около их собственных центров масс в материале фуллерита. Показано, что в рассматриваемом молекулярном кристалле реализуются угловые колебания узлов ГЦК решетки с последующей переориентацией оси колебаний этих узлов в пространстве. Причем по времени переориентации получено хорошее согласование с экспериментальными данными по ЯМР-методу.

В пятой главе рассмотрены наиболее часто употребляемые потенциалы межмолекулярных взаимодействий, которые в дальнейшем могут быть использованы для получения интегральной энергии воздействия от интересующих автора фрагментов углеродной структуры. Рассмотрены полуэмпирические LJ -потенциал, потенциалы Букингема, Морзе, Пёшля–Теллера и теоретический потенциал Смирнова. Здесь же на базе первичного LJ -потенциала рассмотрено интегральное воздействие от бесконечных многоатомных нити и плоскости, а также потенциал от многоатомной сферы и сферической наночастицы. В заключение главы дан вывод интегрального воздействия от бесконечного наноцилиндра, которое рекомендовано для использования в практических расчетах.

Шестая глава посвящена проницаемости некоторых идеальных нанопористых структур, под которыми автор понимает структуры, содержащие открытые или закрытые прямолинейные туннели. Роль таких

материалов выполняет низкотемпературная фаза фуллерита, имеющая простую кубическую решетку и различные укладки открытых нанотрубок, а также «сэндвич»-структуры, например фуллерен–графен. В случае фуллерита и фуллереновой «сэндвич»-структуры расчет проницаемости производится на основе закона площадей. Для мембраны из открытых нанотрубок предложено использовать барьерную теорию прохождения молекул и атомов газовой смеси.

Седьмая глава посвящена исследованию взаимодействия молекул с полыми сферами и полыми нанонитями. Материалы, составленные такими наночастицами, могут успешно использоваться в технологиях сорбционного разделения газовых смесей. Автором на основе простейшего потенциала атом-атомных взаимодействий найдено интегральное воздействие от нанокапсулы, а также от полый нанонити. Выполненные расчеты показали, что проникновение во внутреннюю полость капсулы реализуется лишь в отношении гелия. Полые нанонити не способны пропускать внутрь себя даже подвижный гелий, зато обладают выраженной внешней сорбцией.

Восьмая глава посвящена исследованиям проницаемости пористого графена. Здесь представлен краткий обзор современного состояния этой проблемы и в рамках формализма Гамильтона выписаны уравнения движения пучка молекул, взаимодействующего с пористой графеновой пленкой и сорбционными молекулами, находящимися около этой структуры. Выписана также интегрируемая модификация потенциала Пёшля–Теллера. Проведено обезразмеривание уравнений движения и выполнены расчеты проницаемости гелия и метана через рассматриваемую пленку. Показано, что пленка с порами в виде двенадцати удаленных атомов углерода является высокоселективной в отношении разделения метан-гелиевой смеси.

Далее рассмотрен двойной слой соосно по порам расположенных листов графена. Показано, что даже в рамках ньютоновской модели двойной слой может иметь большую проницаемость по гелию в сравнении с монослоем. Здесь же рассмотрено движение карбиновых фрагментов через поры в углеродных структурах. В заключение главы анализируется проницаемость одного, двух и трех слоев пористого нитрида бора. Расчетами показано, что из-за высокой энергии взаимодействия атомов бора с молекулярными и атомными компонентами газовой фазы эти структуры даже при соосном расположении пор не обладают необходимой селективностью.

В девятой главе на основа потенциалов «сферическая частица – молекула» и «нанонить – молекула» строятся математические модели взаимодействия пучков молекул с нановолокнистыми и наносетчатыми

структурами. Рассмотрена проницаемость простейших мембран, составленных параллельно уложенными нанонитями или углеродными трубками. Для решения задач использован метод свободных зон прохождения. В зависимости от величины шага укладки определены зоны высокоселективного разделения метан-гелиевой смеси. Даны оценки по проницаемости двухслойной укладки нанотрубок.

Десятая глава представляет аналитическое решение, определяющее прохождение массы через составной барьер, полученный в рамках волновой динамики Шредингера. Сначала автор провел операторные выкладки и получил явное выражение для волновой функции, после чего по анализу асимптотического поведения волновой функции был найден коэффициент отражения проходящих волн, представляющих атомы разделяемой смеси. Составной барьер обязательно имеет нули по коэффициенту отражения, что отвечает единицам по коэффициенту прохождения. Полное прохождение через составной барьер при слабом прохождении через аналогичный одиночный возможно лишь при наличии резонанса в системе. Полученные резонансные режимы позволяют разделять смеси частиц, одинаковых по свойствам и различающихся лишь массой, к таким смесям относятся гелий и гелион, водород и дейтерий и т.д.

Новыми в работе являются следующие результаты:

1. Полученные автором критериальные зависимости для коэффициентов сопротивления и термофореза.
2. Найденные углы выпадения частиц высокомолекулярного углерода в электрогравитационном способе из разделения.
3. Обоснованная возможность выделения атомов ксенона из воздушной смеси способом центрифугирования.
4. Полученное автором распределение энергии воздействия молекулы газовой фазы от бесконечного наноцилиндра.
5. Найденный автором кинетический режим прохождения молекул и атомов через нанопористые структуры, содержащие прямолинейные туннели.
6. Исследование сорбционных механизмов в системах, содержащих нанокапсулы и полые нанонити.
7. Эффективные математические модели для описания взаимодействия молекул газовой фазы с волокнистыми и наносетчатыми структурами.
8. Полученное автором точное аналитическое решение задачи о квантовом просеивании изотопов через составные барьеры из пористых 2D-материалов.

Достоверность и обоснованность результатов обеспечивалась использованием строгих математических постановок задач, корректным использованием методов молекулярной динамики и базовых положений классической механики, гидродинамики и квантовой механики, верификацией численных алгоритмов и сопоставлением полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными.

По теме диссертации опубликовано 55 научных работ, в том числе 25 статей в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора наук, 11 статей в сборниках материалов конференций, представленных в изданиях, входящих в Web of Science, 2 статьи в зарубежных научных журналах, 7 сообщений в сборниках материалов конференций, 10 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Теоретическая значимость заключается в обосновании возможности использования электрических полей для разделения частиц высокомолекулярного углерода, в оценках параметров центрифуг, позволяющих выделять ксенон из воздуха, в доказательстве существования кинетических режимов прохождения молекул через некоторые туннельные структуры, в разработке методов расчета проницаемости в этих случаях, в нахождении условий резонансного прохождения изотопов через составные мембраны из сверхтонких нанопористых слоев.

Практическая значимость состоит в выраженной прикладной направленности этой теоретической работы, в применении полученных автором формул и распределений в практике прикладных исследований и инженерной практике по конструированию новых эффективных мембран для разделения газов.

По диссертации имеются следующие замечания:

1. На с. 43 диссертации понятие склерономной энергии лучше определить через привычные понятия как энергии, не зависящей от времени.
2. На с. 44 и 271 при получении безразмерной формы волнового уравнения не конкретизирован масштаб длины.
3. На с. 77 диссертации делается ссылка на критерий (3.28), хотя на самом деле этот критерий определен формулой (3.26).
4. При решении задачи о центрифугировании ксенона в закрытой камере не указано начальное количество частиц, а также шаг интегрирования по времени для уравнений динамики частиц.

5. Не совсем уместным кажется обсуждение результатов о движении карбиновых фрагментов через углеродные нанотрубки в главе о модели проницаемости пористого графена.

Однако сделанные замечания не являются принципиальными и не изменяют общего хорошего впечатления от работы, которая выглядит глубоким и законченным исследованием, содержащим новые данные теории о переносе вещества в газовой среде и через нанопористые структуры. Все материалы опубликованы в отечественной и зарубежной печати. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Диссертация «Математические модели взаимодействия молекул газовых компонент с наночастицами и нанопористыми структурами» соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор Бубенчиков Михаил Алексеевич достоин присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы.

Официальный оппонент
профессор кафедры высшей математики
федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения
высшего образования
«Алтайский государственный технический
университет им. И. И. Ползунова»
(656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46;
+7 3852 29-07-06, altgtu@list.ru,
<https://www.altstu.ru>)
доктор физико-математических наук
(01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника),
профессор

Григорий Владимирович Пышнограй

24.03.2020

Подпись Г. В. Пышнограя удостоверяю

Учёный секретарь учёного совета АлтГТУ



Т. А. Головина