

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 10 июля 2020 года публичной защиты диссертации Бубенчикова Михаила Алексеевича «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.

Присутствовали 20 из 26 членов диссертационного совета, из них 5 докторов наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы:

- | | |
|--|----------|
| 1. Шрагер Г. Р., доктор физико-математических наук, профессор, председатель диссертационного совета, | 01.02.05 |
| 2. Христенко Ю. Ф., доктор технических наук, старший научный сотрудник, заместитель председателя диссертационного совета, | 01.02.04 |
| 3. Пикушак Е. В., кандидат физико-математических наук, ученый секретарь диссертационного совета, | 01.02.05 |
| 4. Архипов В. А., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.02.05 |
| 5. Биматов В. И., доктор физико-математических наук, доцент, | 01.02.05 |
| 6. Бубенчиков А. М., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.14 |
| 7. Бутов В. Г., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.14 |
| 8. Глазунов А. А., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.02.05 |
| 9. Глазырин В. П., доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник | 01.02.04 |
| 10. Зелепугин С. А., доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, | 01.02.04 |
| 11. Крайнов А. Ю., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.14 |
| 12. Лапшин О. В., доктор физико-математических наук, | 01.04.14 |
| 13. Люкшин Б. А., доктор технических наук, профессор, | 01.02.04 |
| 14. Макаров П. В., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.02.04 |
| 15. Миньков Л. Л., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.14 |
| 16. Пономарев С. В., доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, | 01.02.04 |
| 17. Скрипняк В. А., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.02.04 |
| 18. Старченко А. В., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.14 |
| 19. Тимченко С. В., доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, | 01.02.05 |
| 20. Шрагер Э. Р., доктор физико-математических наук, доцент, | 01.04.14 |

Заседание провел председатель диссертационного совета доктор физико-математических наук, профессор Шрагер Геннадий Рафаилович.

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 20, против – нет, недействительных бюллетеней – нет) диссертационный совет принял решение присудить М. А. Бубенчикову ученую степень доктора физико-математических наук.

**Заключение диссертационного совета Д 212.267.13,
созданного на базе федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации,
по диссертации на соискание ученой степени доктора наук**

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 10.07.2020 № 436

О присуждении **Бубенчикову Михаилу Алексеевичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация **«Математические модели взаимодействия молекул газовых компонент с наночастицами и нанопористыми структурами»** по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы принята к защите 17.01.2020 (протокол заседания № 411) диссертационным советом **Д 212.267.13**, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 105/нк от 11.04.2012).

Соискатель **Бубенчиков Михаил Алексеевич**, 1984 года рождения.

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук **«Динамика наноразмерных частиц в газе»** по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы защитил в 2011 году в диссертационном совете при федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Работает в должности ведущего специалиста отдела инновационного развития и интеллектуальной собственности в Обществе с ограниченной ответственностью «Газпром трансгаз Томск» Публичного акционерного общества «Газпром»; по совместительству – в должности доцента кафедры теоретической

механики в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

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

Работа выполнена без назначения научного консультанта.

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, профессор

Пышнограй Григорий Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова», кафедра высшей математики, профессор

Поляков Сергей Владимирович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук», сектор № 4 Отдела № 16, ведущий научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «**Национальный исследовательский Томский политехнический университет**», г. Томск, в своем положительном отзыве, подписанном **Лидером Андреем Марковичем** (доктор технических наук, отделение экспериментальной физики, профессор)

и **Степановой Екатериной Николаевной** (кандидат технических наук, отделение экспериментальной физики, доцент), указала, что актуальность темы диссертационного исследования обусловлена проблемами выработки экологически чистой энергии и реализацией задач развития водородной энергетики. Индустрия наносистем относится к приоритетным направлениям развития науки, технологий и техники в Российской Федерации. М. А. Бубенчиковым впервые: получено аналитическое решение задачи о разделении изотопов гелия с помощью составных моноатомных барьеров; получено аналитическое распределение энергии взаимодействия бесконечного наноцилиндра со свободными частицами; созданы эффективные математические модели прохождения пучков молекул через нановолокнистые и наносетчатые материалы; представлены формулы для коэффициентов среднего сопротивления и термофореза; представлены новые данные о существовании кинетических режимов прохождения молекул через туннельные нанопористые структуры; дано расчетное объяснение характера вращательного движения фуллеренов в молекулярном кристалле фуллерита; представлены эффективные математические модели взаимодействия пучков молекул с капсулами и полыми нанонитями. Теоретическая значимость исследования заключается в разработке математического аппарата для анализа гравитационного, центробежного и мембранного переноса массы в виде частиц и волн материи. Разработанные автором аналитические и вычислительные методики могут быть использованы в прикладных исследованиях по созданию новых туннельных материалов и составных мембран.

Соискатель имеет 55 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 55 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 25 работ (в том числе в зарубежном научном журнале, входящем в Web of Science, опубликована 1 работа; в российском научном журнале, переводная версия которого входит в Web of Science, опубликовано 8 работ, в российском научном журнале, входящем в Web of Science, опубликовано 6 работ); в сборниках материалов конференций, представленных в зарубежных изданиях, входящих в Web of Science (из них 6 электронных сборников), опубликовано

11 работ; в зарубежном научном журнале опубликовано 2 работы; в сборнике материалов международных и всероссийских с международным участием научных конференций опубликовано 7 работ; получено 10 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ. Общий объем публикаций 19,52 а.л., авторский вклад – 5,2 а.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. Антипов В. Б. Исследование процесса пиролиза природного газа в СВЧ разряде и его конверсии в углеродные наноматериалы / В. Б. Антипов, **М. А. Бубенчиков**, Ю. В. Медведев, Д. Ю. Медведев, С. А. Фирсов, Ю. И. Цыганок // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2010. – Т. 53, № 9/2. – С. 149–150. – 0,25 / 0,04 а.л.

2. **Бубенчиков М. А.** Способ минимизации схемной диффузии в численной модели аэродинамики / М. А. Бубенчиков // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2011. – № 2 (14). – С. 79–84. – 0,34 а.л.

3. **Бубенчиков М. А.** Движение частиц ксенона в циклонной камере / М. А. Бубенчиков // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2012. – № 1 (17). – С. 61–67. – 0,38 а.л.

4. Потехаев А. И. Новые физические представления и метод описания и расчета сопротивления движению малых частиц в газообразной среде / А. И. Потехаев, А. М. Бубенчиков, **М. А. Бубенчиков** // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т. 55, № 12. – С. 54–61. – 0,93 / 0,31 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Potekaev A. I. New Physical Ideas and Method of Description and Calculation of Resistance to Motion of Small Particles in a Gaseous Medium / A. I. Potekaev,

A. M. Bubenchikov, **M. A. Bubenchikov** // Russian Physics Journal. – 2013. – Vol. 55, is. 12. – P. 1434–1443. – DOI: 10.1007/s11182-013-9977-8.

5. Бубенчиков А. М. Прохождение микрочастиц через сложные составные потенциальные барьеры / А. М. Бубенчиков, **М. А. Бубенчиков**, А. И. Потекаев, Э. Е. Либин, Ю. П. Худобина, В. В. Кулагина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60, № 1. – С. 119–126. – 0,88 / 0,15 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Bubenchikov A. M. Penetration of Microparticles Through Composite Potential Barriers / A. M. Bubenchikov, **M. A. Bubenchikov**, A. I. Potekaev, E. Ye. Libin, Yu. P. Khudobina, V. V. Kulagina // Russian Physics Journal. – 2017. – Vol. 60, is. 1. – P. 140–148. – DOI: 10.1007/s11182-017-1052-4.

6. **Bubenchikov M. A.** Calculating permeability of the low-temperature phase of a fullerite / M. A. Bubenchikov, A. M. Bubenchikov, E. A. Tarasov, O. V. Usenko, A. S. Chelnokova // Diamond and Related Materials. – 2018. – Vol. 86. – P. 146–158. – DOI: 10.1016/j.diamond.2018.04.017. – 0,76 / 0,15 а.л.

На автореферат поступило 3 положительных отзыва. Отзывы представили:
1. **О. Б. Кудряшова**, д-р физ.-мат. наук, доц., старший научный сотрудник лаборатории физики преобразования энергии высокоэнергетических материалов Института проблем химико-энергетических технологий СО РАН, г. Бийск, *без замечаний*. 2. **Ю. А. Алтухов**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры теоретических основ информатики Алтайского государственного педагогического университета, г. Барнаул, *без замечаний*. 3. **В. А. Перминов**, д-р физ.-мат. наук, профессор отделения контроля и диагностики Национального исследовательского Томского политехнического университета, *без замечаний*.

В отзывах отмечается, что традиционные технологии получения чистых газовых компонент, как правило, неэкономичны и отличаются грубым воздействием на окружающую среду. Поэтому в настоящее время большое внимание уделяется альтернативным мембранным технологиям разделения газовых смесей. В связи с этим исследование взаимодействия молекулярных компонент газовых смесей с наночастицами является актуальной задачей.

М. А. Бубенчиковым выделен класс туннельных мембран, для которых характерен кинетический режим прохождения молекул; предложены приближенные способы расчета проницаемости и селективности таких мембран; разработан комплекс эффективных математических моделей взаимодействия молекул газовой фазы с сетчатыми волокнистыми материалами, которые могут широко использоваться в практике исследовательских работ; получены критериальные зависимости, определяющие среднее сопротивление наночастиц различной формы, а также термофорез сферических наночастиц; с помощью квазианалитических построений найдены узлы выпадения частиц различной структуры на подложку в электрогравитационном способе разделения смесей углеродных частиц; построена и реализована математическая модель центрифугирования наночастиц; найдена аналитическая формула энергии взаимодействия молекул с бесконечным наноцилиндром и на ее основе построены эффективные модели движения молекул через волокнистые материалы и нанополотно; исследованы случаи прохождения молекул через слои пористого графена и пористого нитрида бора; построено аналитическое решение задачи о прохождении газовых компонент. Результаты исследования в своей совокупности решают проблему мембранного разделения газовых смесей. Разработанные соискателем средства математического моделирования решают проблему расчета проницаемости туннельных структур, а также проблему динамического взаимодействия наночастиц с газовой средой. Это содействует развитию практических нанотехнологий и их внедрению в лабораторную и производственную практику.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **В. Я. Рудяк** является известным специалистом в области решения различных задач молекулярной динамики, в том числе исследования взвесей наночастиц и нанокапель в газообразной и жидкой среде; **Г. В. Пышноград** является известным специалистом в области построения реологических моделей растворов и расплавов с помощью методов молекулярной физики, а также решения задач механики жидкости и газа для реологической сложных сред; **С. В. Поляков** является известным специалистом в области математического

моделирования задач молекулярной динамики, исследования взаимодействия наночастиц с газообразной средой, вычислительных схем для решения сопряженных задач молекулярной динамики и механики жидкости и газа; **Национальный исследовательский Томский политехнический университет** известен своими достижениями в области атомной и молекулярной физики, а также вычислительной молекулярной динамики.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан подход, позволяющий, не решая множество отдельных задач динамики молекул, подсчитать все обмены импульсом, используя лишь простые геометрические средства, и на основе этого определить среднее сопротивление наночастиц различной формы, а также их термофорез;

предложены аэродинамический и электро-гравитационный способы разделения наночастиц;

получено аналитическое распределение энергии воздействия от бесконечной нанонити на отдельные молекулы газовых компонент, и на его основе построены эффективные математические модели взаимодействия пучков молекул с нановолокнистыми материалами и нанотканями;

выявлен кинетический режим прохождения молекул через туннельные структуры;

построено аналитическое решение задачи о квантовом просеивании изотопов через составную мембрану из двух слоев пористого 2D-материала.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

изложены результаты, обладающие фундаментальным характером; разработан подход расчета обмена импульсов молекул, находящихся в λ -слое наночастицы на максвелловском интервале времени при специальной организации газового окружения допустимого эргодичностью процедуры нахождения средних величин;

получены критериальные зависимости для определения среднего сопротивления и термофореза наночастиц различной формы;

получено аналитическое распределение потенциала от бесконечного наноцилиндра;

выявлены туннельные структуры, для которых характерным является кинетический режим прохождения молекул;

найденны условия резонансного прохождения компонентов смеси через составные барьеры из моноатомных слоев.

Значение полученных соискателем результатов исследований для практики подтверждается:

получены формулы по взаимодействию наночастиц с газовым окружением, которые можно использовать в практике инженерных расчетов;

представлены способы аэродинамического и электро-гравитационного разделения наночастиц, а также способ резонансного разделения изотопов.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования

Полученные результаты могут быть использованы при проведении научно-исследовательских работ в следующих организациях: Национальный исследовательский Томский государственный университет, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, АО «Федеральный научно-производственный центр «Алтай» (г. Бийск), Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН (г. Бийск), Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН (г. Новосибирск), Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (г. Москва), а также в других научно-исследовательских институтах и высших учебных заведениях, в которых занимаются механикой наносистем и изучением свойств нанопористых структур.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:

использованы хорошо апробированные модели ньютоновской механики и волновой динамики;

установлено качественное и количественное согласие полученных автором результатов с данными теоретических и экспериментальных исследований из независимых источников по данной тематике;

использованы эффективные и теоретически обоснованные вычислительные алгоритмы, апробированные на многих тестовых задачах.

Научная новизна результатов диссертационного исследования заключается в:

операторном способе построения аналитического решения интегрального уравнения Шредингера;

нахождении резонансных режимов прохождения изотопов гелия через составные мембраны;

аналитическом определении потенциала воздействия от бесконечного наноцилиндра;

формулировке математических моделей взаимодействия пучков молекул с нанонитями и нанополотном;

нахождении кинетических режимов прохождения молекул через туннельные нанопористые структуры

разработке подхода, позволяющего с помощью квазианалитических построений и численной реализации простейших задач молекулярной статистики найти формулы для среднего сопротивления и скорости термодиффузионного переноса наночастиц различной формы;

разработке способа минимизации схемной вязкости для определения вторичных течений в циклонных камерах.

Личный вклад соискателя состоит в: получении всех теоретических зависимостей и аналитических распределений; модификаций LJ- и РТ-потенциалов; получении данных, позволяющих ввести в рассмотрение два подхода по расчету относительной проницаемости нанопористых мембран; теоретическом обосновании наличия различных режимов мембранного транспорта молекул; обосновании существования сорбционных зон в сплошных телах; получении данных о потенциалах полых частиц; обосновании существования туннельного характера движения молекул через мембраны; получении уравнения для пучков молекул, проходящих через волокнистые и наносетчатые структуры; применении подхода Эйлера к теоретическому определению частоты вращения фуллеренов.

Диссертация отвечает критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней для диссертаций на соискание ученой степени доктора наук, и, в соответствии с пунктом 9 Положения, является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, связанные с динамикой наночастиц и физическими свойствами нанопористых структур, используемых для разделения газов, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области механики жидкости, газа и дисперсных систем.

На заседании 10.07.2020 диссертационный совет принял решение присудить **Бубенчикову М. А.** ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 5 докторов наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы, участвовавших в заседании, из 26 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 20, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета



Шрагер Геннадий Рафаилович

Ученый секретарь

диссертационного совета

Пикущак Елизавета Владимировна

10.07.2020