

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Калашниковой Полины Андреевны «Моделирование транспортных свойств полимерных композитов с углеродными нанонаполнителями», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния».

### Актуальность темы

Разработка композитов на основе полимеров с наноуглеродными наполнителями является одним из перспективных направлений при создании новых материалов с уникальными, востребованными на практике свойствами. Безусловно, экспериментальные исследования должны сопровождаться теоретическим моделированием, и, в частности, разработкой транспортной модели для таких сред. В настоящее время отсутствует универсальная модель переноса в нанокompозитах, что связано, в первую очередь, со сложной нелинейной зависимостью свойств композита от доли и параметров углеродного нанонаполнителя в полимерной матрице. Для моделирования этих сложных явлений необходимо применять современные методы, в частности, из области описания неклассических процессов переноса. Несмотря на то, что теоретические исследования неклассического переноса ведутся достаточно активно и успешно, существует определенный барьер между теорией, экспериментом и, как следствие, практическим применением теоретических достижений. Всё сказанное выше позволяет считать тему диссертации актуальной и важной для практики.

### Научная новизна и наиболее важные результаты

Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения.

В первой главе, которую можно рассматривать как вводную, представлен подробный обзор литературы. В нем, следуя своему подходу, П.А. Калашникова подробно рассмотрела как имеющиеся экспериментальные исследования по транспорту в полимер-углеродных нанокompозитах, так и достаточно полно изложила существующие математические методы, используемые для описания переноса в сильно неоднородных средах и приводящие к неклассическим закономерностям.

Важные результаты для описания транспорта газа в полимерных мембранах с углеродными нанотрубками (УНТ) получены во второй главе. Автором была разработана новая модель для расчета транспортных свойств композита. Расчет проводился в два этапа. На первом – выполнялось прямое численное моделирование кластера из УНТ. На

втором этапе был реализован случайный процесс блуждания частицы (аналогично как в методе STRW). Полагалось, что перенос в полимере происходит по механизму диффузии, а при попадании частицы в область, относящуюся к кластеру, имеет место быстрый перенос в баллистическом режиме. В итоге было впервые показано, что наличие таких «быстрых» областей приводит к возникновению супердиффузионного режима переноса. Здесь я бы хотел отметить следующее. В существенно математическом методе STRW появление супердиффузионного режима переноса связывают с особенностями распределения вероятности отдельных прыжков по их длинам и длительностям. При этом зачастую необходимы дополнительные усилия для обоснования требуемого вида этого распределения. В работе П.А. Калашниковой данное распределение возникает естественным образом и имеет наглядный, физически прозрачный смысл, и развитая модель позволяет в явном виде учитывать изменения различных хорошо физически определенных параметров, управляющих процессом.

В рамках развитой модели были проанализированы режимы переноса с различными концентрациями нанотрубок и различными скоростями баллистического переноса вдоль трубок. Показано, что характер переноса частиц газа в композите зависит не только от концентрации УНТ, но и от скорости частиц в области УНТ. Полученные зависимости для показателя, определяющего режимы транспорта от концентрации УНТ и скорости переноса частиц внутри кластера, являются новыми и весьма интересными.

Проведенное в последней части второй главы одномерное моделирование диффузионно-баллистического переноса подтвердило выводы двухмерного моделирования и дало им наглядную интерпретацию.

В третьей главе развита модель электрического транспорта в полимерных композитах с УНТ. Принимая во внимание, что основное сопротивление при протекании тока по УНТ-кластеру определяется туннелированием электронов через области наибольшего сближения нанотрубок, был проведен тщательный расчет данных контактных сопротивлений. Был сделан важный вывод, что угол между осями УНТ сильнее всего влияет на величину контактного сопротивления. После этого, проводился статистический расчет проводимости всего образца с ансамблем УНТ в рамках перколяционной модели. В итоге получены новые интересные результаты по влиянию на проводимость композита концентрации нанотрубок, их размера, взаимного расположения, минимального расстояния между ними, возможности их кластеризации.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

Достоверность результатов обусловлена современным уровнем теоретического моделирования, физической прозрачностью постановок и там, где было возможно, сравнением с экспериментальными и расчетными литературными данными.

#### Практическая ценность

Результаты работы могут быть использованы при разработке широкого круга новых композитных материалов с нанонаполнителями при расчете их газотранспортных и электропроводных свойств, и, в частности, полимерных композитов с углеродными нанотрубками.

#### Замечания к работе:

1. При моделировании диффузии газа через мембрану автор принимает, что перенос по полимерной матрице обусловлен диффузией, в то время как в области вблизи нанотрубок перенос баллистический. В то же время в представленном перед этим обзором показано, что режим переноса вблизи нанотрубок может быть как баллистическим, так и диффузионным. Требуется конкретизировать условия, когда справедливо данное приближение модели.

Кроме того, имеется ряд редакционных замечаний:

2. При расшифровке названия метода CTRW автор в одном случае называет этот метод «случайные блуждания в непрерывном времени» (стр. 37), а в другом «непрерывные блуждания в случайном времени» (стр. 50). Должна быть определенность в этом вопросе.
3. Также на странице 120 при сравнении полученных результатов с данными, наблюдаемыми в эксперименте, автор отсылает читателя к Таблице 1 работы [126]. Здесь необходимо уточнить, с какой именно частью данной Таблицы сравниваются полученные результаты (в первоисточнике Таблица занимает 11 страниц).

Эти замечания, однако, ни в коей мере не снижают общей высокой оценки представленной диссертации.

В целом считаю, что приведенные выше результаты П.А. Калашниковой имеют актуальное научное значение, являются новыми, оригинальными и важными для практики. Материал диссертации в полной мере изложен в статьях, опубликованных в уважаемых научных изданиях. Количество и качество публикаций по теме

диссертации удовлетворяет необходимым требованиям, предъявляемым к диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Автореферат диссертации правильно и в полной мере отражает содержание диссертации.

Диссертация П.А. Калашниковой удовлетворяет требованиям, установленным Положением «О присуждении ученых степеней» утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842, паспорту специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния» и отрасли науки «физико-математические науки», а ее автор заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент

доктор физико-математических наук  
по специальности 01.04.14 – «Теплофизика  
и теоретическая теплотехника»,

Леонид Владимирович Матвеев



Сведения:

Матвеев Леонид Владимирович

доктор физико-математических наук  
по специальности 01.04.14 – «Теплофизика и теоретическая теплотехника»  
Телефон: +7(495) 955-22-86  
Email: matweev@ibrae.ac.ru

Директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук

115191, г. Москва, ул. Большая Тульская, д. 52