

«УТВЕРЖДАЮ»

Ректор ФГБОУ ВО «Юго-Западный
государственный университет»,
доктор технических наук, профессор

С.Г. Емельянов



«31» октября

2016 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Юго-Западный государственный университет» на диссертационную работу Кузнецова Андрея Аркадьевича «Процессы массопереноса и структурообразование в суспензии взаимодействующих магнитных наночастиц», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы.

Диссертация посвящена численному исследованию поведения суспензии магнитных наночастиц (магнитной жидкости) в гравитационном поле и моделированию явлений самоорганизации частиц на микро- и макроуровнях с учетом их броуновского движения и межчастичных взаимодействий (магнитодипольных и стерических). Задача решается методами ланжевеновской динамики, в рамках приближения твердых дипольных сфер, взвешенных в вязкой среде.

Актуальность темы диссертационной работы связана со следующими обстоятельствами:

1. Проблемой точного расчёта концентрационных и размагничивающих полей в устройствах, использующих магнитную жидкость в качестве рабочего тела. Решение соответствующих краевых задач сдерживается отсутствием надежных данных о зависимости коэффициента градиентной диффузии от концентрации частиц и энергии магнитодипольных взаимодействий.

2. Проблемой коллоидной устойчивости и стабильности магнитных нанодисперсных систем при низких температурах или в поле сильных центробежных сил. В этих случаях образование агрегатов в растворе может существенно повлиять на физические и механические свойства системы.

3. Дискуссионностью проблемы фазовых переходов первого и второго рода в суспензии взаимодействующих магнитных наночастиц.

Наиболее важные результаты, определяющие **научную новизну** диссертационной работы Кузнецова А.А., состоят в следующем:

1. Методами ланжевеновской динамики решена задача о гравитационной седиментации магнитных наночастиц в плоском

горизонтальном слое концентрированной магнитной жидкости. При решении задачи произведен учёт броуновского движения частиц, магнитодипольных и стерических взаимодействий между оседающими частицами. Приведены концентрационные профили (распределение частиц по высоте) в широком диапазоне параметра диполь-дипольных взаимодействий и средней концентрации частиц.

2. Предложены аппроксимационные выражения для коэффициента градиентной диффузии, осмотического давления и свободной энергии магнитных коллоидных частиц. Аппроксимации хорошо описывают известные в литературе численные данные в широком диапазоне значений объёмной доли частиц и параметра магнитодипольных взаимодействий.

3. Показана возможность спонтанного возникновения магнитной структуры в микрообъеме магнитной жидкости, ограниченном жёсткими стенками. Продемонстрировано влияние геометрии полости на характер такого упорядочения.

4. Отмечена аналогия между процессами температурной флуктуации полного магнитного момента жёсткой стержнеобразной цепочки взаимодействующих магнитных наночастиц и неелевской релаксацией момента одиночной суперпарамагнитной частицы.

5. Исследована динамика и равновесная структура гибкой цепочки магнитных наночастиц. Определены условия перехода такой цепочки в состояние плотной квазисферической или торoidalной глобулы.

Структура и содержание работы. Диссертационная работа А.А. Кузнецова «Процессы массопереноса и структурообразование в суспензии взаимодействующих магнитных наночастиц» состоит из введения, пяти глав, заключения и списка цитируемой литературы, включающего 212 наименований. Общий объем диссертации 121 страницы машинописного текста, которые содержат 39 рисунков и 1 таблицу.

Во **введении** обоснована актуальность работы, сформулирована цель и основные положения, раскрыта научная новизна и практическая значимость работы.

Первая глава носит обзорный характер. В ней рассмотрены общие сведения о магнитных суспензиях и проанализировано современное состояние проблем, затрагиваемых в исследовании: массопереноса в магнитной жидкости под действием внешних силовых полей, фазового расслоения магнитной жидкости и гипотетического перехода магнитного коллоида в ориентационно упорядоченное состояние.

Во **второй главе** диссертации описывается метод ланжевеновской динамики, приводятся уравнения движения магнитных наночастиц и их конечно-разностные приближения, используемые при моделировании.

В **третьей главе** решается задача о гравитационной седиментации магнитных наночастиц в плоском горизонтальном слое магнитной жидкости. Проводится расчёт концентрационных профилей частиц при различных значениях безразмерного параметра магнитодипольных взаимодействий.

Показано, что при высоких значениях этого параметра, когда энергия магнитодипольного взаимодействия частиц существенно превышает энергию теплового движения, коэффициент сегрегации магнитных частиц увеличивается на несколько порядков по сравнению со случаем немагнитных твердых сфер. На профилях возникает участок с высоким градиентом плотности частиц, что напоминает поведение в гравитационном поле систем, претерпевающих фазовое расслоение. Однако при снятии гравитационного поля однородное распределение частиц быстро восстанавливается, что не позволяет сделать вывод о существовании в моделируемой системе магнитных частиц фазового перехода первого рода типа «газ – жидкость». На основе анализа полученных численных данных по седиментации предложены аппроксимации для коэффициента градиентной диффузии коллоидных магнитных частиц, их осмотического давления и свободной энергии. Продемонстрирована возможность формирования плотной гексагональной упаковки в концентрированной системе монодисперсных частиц вблизи нижней границы горизонтального слоя. Показано, что при достаточно высоких значениях параметра магнитодипольных взаимодействий моделируемой плоский слой магнитной жидкости может обладать спонтанной намагниченностью.

В **четвертой главе** исследуется влияние геометрии полости с суспензией магнитных сферических частиц на характер спонтанного ориентационного упорядочивания в ней. Показано, что вблизи жестких стенок контейнера частицы всегда ориентируются по касательной к этим стенкам. Для сферического контейнера и для цилиндрического контейнера с малым отношением длины к диаметру крупномасштабная магнитная структура имеет вихреобразный характер, при котором полный магнитный момент системы близок к нулю. Для вытянутого цилиндра, длина которого много больше диаметра, становится возможным появление спонтанной намагниченности. Как частный случай вытянутого цилиндра в главе рассматривается жесткая стержнеобразная цепочка магнитных наночастиц. Показано, что при достаточно высоких значениях параметра магнитодипольных взаимодействий магнитные моменты отдельных частиц преимущественно сонаправлены, но проекция полного магнитного момента цепочки на ее ось случайным образом меняет знак в результате тепловых флуктуаций. Средняя частота, с которой происходит смена знака экспоненциально убывает с ростом параметра взаимодействия. Эта зависимость в работе количественно описывается с помощью известной в литературе интерполяционной формулы для неелевского времени релаксации суперпарамагнитной частицы с одноосной магнитной анизотропией.

В **пятой главе** исследуется равновесная структура одиночной гибкой цепочки магнитных наночастиц с ограниченными степенями свободы. Между соседними звеньями в такой цепочке действует дополнительный парный потенциал, который не даёт соседним частицам отойти друг от друга дальше некоторого предельного расстояния. Благодаря этому удается избежать распада цепочки фиксированной длины на более мелкие агрегаты.

Показано, что теоретически предсказанный в работах других авторов структурный переход «клубок – глобула», который предположительно может инициировать фазовый переход первого рода в дипольной жидкости, наблюдается в моделируемой системе только при условии, что предельное расстояние между соседними частицами в цепи находится в интервале от двух до десяти диаметров частиц. При снятии ограничений на максимальное расстояние между частицами, плотная глобула распадается на отдельные кольца.

По диссертации А.А. Кузнецова необходимо сделать следующие **замечания:**

1. Используемая модель, основанная на ланжевеновской динамике, не учитывает Ван-дер-вальсовские (дисперсионные) взаимодействия между частицами, что накладывает серьезные ограничения на обоснованность получаемых выводов. Кроме того, моделируемая система значительно упрощена предположением о том, что все частицы одинаковы по размерам (нет полидисперсности).

2. В работе обсуждается только броуновский механизм намагничивания частиц, хотя реальная магнитная жидкость состоит из наночастиц, которым из-за малых размеров как раз более свойственен неелевский механизм.

3. Нет физического обоснования полученному результату разнонаправленности магнитных моментов частиц в цепочке, в результате чего проекция полного магнитного момента цепочки на ее ось случайным образом меняет знак. Каким образом в этом случае сохраняется целостность цепочки?

4. Отсутствует физическое обоснование сделанному выводу об аналогии смены знака в ориентации магнитных моментов частиц в цепочке известному в магнетизме неелевскому процессу внутридоменного флюктуационного перемагничивания суперпарамагнитной частицы с одноосной магнитной анизотропией. К сожалению, в диссертации на стр. 72 сказано: «Детальный анализ образования и поведения доменов не проводился».

5. В работе утверждается, что рассматриваемая теоретическая модель предполагает, что магнитные частицы находятся в вязкой жидкости-носителе, но в 3.1, 4.1 и 5.1 диссертации вязкость не входит в число входных параметров моделирования. Нигде не говорится о функции вязкости или каких-либо ограничениях, накладываемых вязкостью на процессы седиментации или перемагничивания системы частиц.

6. В тексте диссертации количество проведенных симуляций указывается лишь при решении задачи о структуре гибкой дипольной цепочки, взвешенной в жидкости (глава 5). По другим рассматриваемым задачам эта информация не представлена.

7. На рисунке 4.1(б) диссертации неясно, с чем связано наличие выбивающейся точки на графике $\langle P \rangle$ вблизи $\Lambda=45$.

8. В автореферате на с.13 (рис. 7) и в диссертации на стр. 74 (рис. 4.5) используется аппроксимационное выражение, которое само по себе является приближением к реальному процессу, и поэтому не может служить количественной оценкой степени соответствия рассматриваемых процессов.

9. В автореферате и диссертации имеются опечатки.

Тем не менее, в целом **анализ диссертационной работы** показывает, что содержание и структура диссертации находятся в логическом единстве и соответствуют поставленной цели исследования.

Основные результаты и выводы работы **опубликованы в 17 печатных работах, в том числе в трех статьях** из списка ВАК - в международных рецензируемых журналах, входящих в базы данных Web of Science и Scopus.

Текст автореферата полностью соответствует содержанию диссертации. Он в достаточном для понимания объеме отражает наиболее важные моменты работы. Оформление автореферата отвечает требованиям положения ВАК РФ.

Достоверность полученных результатов обеспечивается проведением тестовых расчётов, использованием апробированных алгоритмов, согласием результатов моделирования с известными аналитическими предсказаниями для предельных случаев и с численными результатами других авторов, полученных в рамках альтернативных подходов.

Практическая значимость результатов работы заключается в том, что полученные аппроксимационные выражения для коэффициента диффузии и осмотического давления магнитных частиц могут быть использованы при постановке краевых задач, для расчетов и оценки концентрационного расслоения магнитной жидкости в механизмах и устройствах, использующих её в качестве рабочего тела.

Результаты и выводы, приведенные в диссертации, можно рекомендовать к использованию в Институте механики сплошных сред УрО РАН (Пермь), в Институте механики МГУ им. Ломоносова (Москва), Уральском федеральном университете имени первого Президента России Б.Н. Ельцина (Екатеринбург), Институте химии растворов им. Г.А. Крестова РАН (Иваново), Северо-Кавказском федеральном университете (Ставрополь), Ивановском государственном энергетическом университете им. В.И. Ленина (Иваново), Юго-Западном государственном университете (Курск).

Заключение

Диссертационная работа Кузнецова Андрея Аркадьевича «Процессы массопереноса и структурообразование в суспензии взаимодействующих магнитных наночастиц» представляет собой законченную научно-исследовательскую работу на актуальную тему. Сделанные выше замечания не носят принципиального характера. Основные результаты диссертации опубликованы в рецензируемых российских и международных журналах, входящих в базу данных Web of Science и Scopus. Таким образом,

диссертация соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, **Кузнецов Андрей Аркадьевич**, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы.

Отзыв рассмотрен и утвержден на заседании кафедры нанотехнологий и инженерной физики 27 октября 2016 г., протокол № 4

Отзыв составили:

Профессор кафедры нанотехнологий
и инженерной физики ФГБОУ ВО «Юго-Западный
государственный университет»,
доктор физ.-мат. наук, профессор,
Вячеслав Михайлович Полунин

/В.М. Полунин

Зав. кафедры нанотехнологий
и инженерной физики ФГБОУ ВО «Юго-Западный
государственный университет»,
кандидат физ.-мат. наук, доцент,
Андрей Евгеньевич Кузько

/А.Е. Кузько

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Юго-Западный государственный университет»,
305040, г.Курск, 50 лет Октября, 94,
e-mail: rector@sksu.ru
тел.:+7 (471) 250-48-08