ОТЗЫВ

на магистерскую диссертацию студентки математико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного университета

Рейнберг Натальи Андреевны

«Моделирование поведения жидкостей внутри углеродных нанотрубок методом молекулярной динамики»

В магистерской диссертации Рейнберг Н.А. исследованы свойства течения жидкостей в углеродных нанотрубках методом молекулярной динамики. Целью данной работы является исследование свойств течения жидкости в углеродных нанотрубках. Развитие нанотехнологий и значительные перспективы их использования, определяет актуальность работы. В работе представлен обзор о свойствах нанотрубок. Проанализированы перспективы использования нанотрубок в качестве наноканалов для переноса различных жидкостей. Далее в работе представлена физическая модель рассматриваемой системы, состоящей из одной или нескольких нанотрубок и молекул жидкости, как внутри так и снаружи трубки. Для описания динамического поведения модели использован современный численный метод. Описаны особенности созданной при непосредственном участии Рейнберг Н.А. компьютерной программы, для решения поставленной задачи. Получен и проанализирован ряд важных результатов. В частности обнаружен эффект скачкообразного движения воды в нанотрубке; исследовано влияние размеров трубки на параметры движения в таком режиме; исследовано течение смеси воды с метаном и показана зависимость скорости течения смеси от концентрации метана, от наличия дефектов в нанотрубке и от состава смеси снаружи трубки; получены аппроксимационные зависимости скорости от процентного соотношения воды и метана в смеси.

Работа содержит новые результаты, которые могут быть опубликованы.

Считаю, что работа заслуживает оценки «отлично».

Научный руководитель:

Член-корреспондент РАН, д.ф.-м.н., профессор Индейцев Д. А.