

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

Лискова Игоря Юрьевича

на диссертационную работу Галкиной Елены Владимировны
«Закономерности лазерного инициирования пентаэритриттетранитрата,
содержащего наночастицы металлов, в том числе со структурой «ядро-
оболочка»», представленную на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Разработка систем инициирования взрыва, позволяющих повысить безопасность данных работ в промышленности является важным трендом в физической химии энергетических материалов. Один из подходов заключается в разработке составов селективно чувствительных к лазерному излучению на основе вторичных взрывчатых веществ, сохраняющих низкие уровни чувствительности к удару, трению, нагреву и электрическому разряду. Для оптимизации данных составов требуется учет особенностей состава и строения наночастиц, в частности, для наночастиц металлов – учет оксидной оболочки. Диссертационная работа Галкиной Е.В. направлена на выявление влияния теплофизических характеристик наночастиц металлов и эффектов, возникающих благодаря инертной оксидной оболочке, что делает **тему исследования**, безусловно, **актуальной**.

Работа Галкиной Е.В. изложена на 122 страницах, содержит 36 рисунков, 8 таблиц. Состоит из введения, пяти глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, списка цитируемой литературы из 140 наименований.

В заключении диссертационной работы Галкина Е.В. сформулировала 5 основных результатов и выводов.

1. Создан пакет прикладных программ и проведен расчет кинетических закономерностей и критических параметров процессов, инициируемых PETN с наночастицами 12 металлов импульсам длительностью на полувысоте 12 и 14 нс.

Пакет прикладных программ описан в главе 2 диссертации. Приведены использованные схемы решения прямой задачи моделирования закономерностей инициирования взрыва, включая подход к разбиению пространства на расчетные ячейки, схемы интегрирования и вычисления критических параметров инициирования. Пакет зарегистрирован как программа для ЭВМ (приоритетная публикация):

Каленский, А.В. Инвариант микроочаговой модели теплового взрыва/ А.В. Каленский, М.В. Ананьева., А.П. Боровикова, Н.В. Газенаур, Е.В. Галкина, А.А. Звеков, А.П. Никитин // свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ RUS. № 2017613068. Дата приоритета 10.01.2017, дата гос. регистрации 9.03.2017

Достоверность первого вывода основана на использовании законов сохранения для получения дискретизированной по пространству системы уравнений и контроле как точности на шаге, так и общей погрешности интегрирования.

2. Получены значения оптимальных теплофизических радиусов наночастиц 12 металлов в PETN при длительностях инициирующего импульса 12 и 14 нс, спрямляющие координаты, рядовые и функциональные зависимости рассчитанных величин от теплофизических характеристик металлов, инвариант модели.

Результаты, подкрепляющие второй вывод, представлены в главе 3 диссертации. Автором рассчитаны зависимости критической плотности энергии от длительности лазерного импульса и радиуса наночастицы для 12 металлов. Для каждого металла определены оптимальный теплофизический радиус и время достижения максимальной температуры очага. (положение 1, выносимое на защиту). Проанализированы рядовые зависимости, получена зависимость оптимального радиуса наночастиц от теплоемкости металла. Предложен инвариант лазерного инициирования теплового взрыва, показывающий, что рост критической плотности энергии сопровождается снижением времени достижения максимальной температуры очага (положение 2, выносимое на защиту и 1-й абзац научной новизны). Достоверность второго вывода обосновывается высокой точностью выполнения полученной зависимости оптимального радиуса от теплоемкости наночастиц и малых отклонениях для инварианта модели.

По второму выводу имеются следующие приоритетные публикации:

1. Kalenskii, A.V. The critical parameters of the thermal explosion micro hot-spot model dependence on the pulse duration/ A.V. Kalenskii, A.A. Zvekov, E.V. Galkina// Journal of Physics: Conference. 2017, V. 830, Issue 1, C. 012128.

2. Никитин, А.П. Связь закономерностей инициирования взрывного разложения PETN с физическими свойствами сенсibiliзирующих наночастиц/ А.П. Никитин, Г.Э. Иващенко, Е.В. Галкина, К.А. Радченко // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2017, – Т. 14, – №1. – С. 64-69.

3. Каленский, А.В. Инвариант микроочаговой модели теплового взрыва/ А.В. Каленский, М.В. Ананьева, А.П. Боровикова, Н.В. Газенаур, Е.В. Галкина, А.А. Звеков,

А.П. Никитин // свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ RUS. № 2017613068. Дата приоритета 10.01.2017, дата гос. регистрации 9.03.2017

3. Разработана и зарегистрирована программа для ЭВМ, проведен расчет оптических характеристик наночастиц со структурой ядро-оболочка. Проведена адаптация модели и расчетной программы для моделирования закономерностей инициирования взрывного разложения энергетических материалов, содержащих наночастицы со структурой «ядро-оболочка», лазерным импульсом.

Программа для ЭВМ и схема адаптации методик расчета описаны в главе 4 диссертации. Приведены выражения для расчета коэффициентов эффективности поглощения и рассеяния света в рамках модели Адена-Керкера. Показано, что физические особенности процесса поглощения света наночастице типа металлическое ядро-оксидная оболочка наиболее достоверно передаются коэффициентом эффективности поглощения, рассчитанном на ядро наночастицы. Достоверность вывода определяется правильным выполнением асимптотических зависимостей, согласием с результатами работ других авторов.

Приоритетные публикации по 3-му выводу работы:

1. Каленский, А.В. Моделирование спектральных характеристик композитов прозрачная матрица-наночастицы со структурой ядро-оболочка/ А.В. Каленский, А.А. Звеков, Е.В. Галкина, Д.Р. Нурмухаметов // Компьютерная оптика. 2018. Т. 42. № 2. С. 254-262.

2. Каленский, А.В. Расчет оптических свойств наночастиц со структурой ядро-оболочка / А.В. Каленский, М.В. Аананьева, А.П. Боровикова А.А. Звеков, Е.В. Галкина, Н.В. Газенаур// свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ RUS. №20186643081. Дата приоритета 24.09.2018, дата гос. регистрации 14.11.2018.

4. Рассчитаны критические параметры инициирования взрывного разложения композитов $\text{PETN}/\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3$ лазерным импульсом при варьировании в широких пределах как радиуса наночастицы, так и толщины оболочки. Определены кинетические особенности формирования очага взрывного разложения исследованных объектов.

Соответствующий материал описан в главе 5 диссертации. Приведены системы дифференциальных уравнений, описывающих наночастицу с оксидной оболочкой в контакте с матрицей взрывчатого вещества, в условиях лазерного нагрева. Обсуждены изменения в теплофизической части модели, вносимые оболочкой. Проведен цикл расчетов и получены зависимости критической плотности энергии от толщины оболочки,

выделены вклады оптических свойств и теплофизических процессов. (третье положение, выносимое на защиту).

Приоритетные публикации:

1. Звеков, А.А., Программный комплекс для расчета оптических свойств наночастиц со структурой ядро-оболочка/ А.А. Звеков, Е.В. Галкина, К.А. Радченко //Современные фундаментальные и прикладные исследования. 2016. № 3 (22). С. 25-31.

2. Каленский, А.В. Моделирование спектральных характеристик композитов прозрачная матрица-наночастицы со структурой ядро-оболочка/ А.В. Каленский, А.А. Звеков, Е.В. Галкина, Д.Р. Нурмухаметов // Компьютерная оптика. 2018. Т. 42. № 2. С. 254-262.

Достоверность вывода 4 основана на использовании хорошо апробированных методов численного моделирования, согласии с качественными ожидаемыми закономерностями.

5. Получено аналитическое выражение зависимости пороговой плотности энергии от радиуса наночастицы, толщины оксидной оболочки. Количественно описана зависимость критической плотности энергии инициирования лазерным импульсом PETN с включением алюминия от массовой доли металла в наночастице

Материал, на котором основан данный вывод приведен в 5-й главе диссертации. Автором получены приближенные выражения, вычленяющие вклады теплофизической и оптической частей модели. Получено выражение для оптимального радиуса наночастицы с учетом имеющийся оксидной оболочки. В конце главы приведено сравнение результатов расчета критической плотности энергии с экспериментальными результатами по инициирования взрыва композитов пентаэритрита тетранитрата модифицированных наночастицами алюминия, подвергнувшимся контролированному окислению. Наблюдается удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных зависимостей, что свидетельствует в пользу достоверности модели и полученных в ее рамках результатов.

Приоритетные публикации:

1. Kalenskii, A.V. Micro hot-spot model of thermal explosion taking into account dielectric shell of sensitizing nanoparticle/ A.V. Kalenskii, M.V. Anan'eva, E.V. Galkina, V.G. Kriger, A.A. Zvekov // Journal of Physics: Conference Series. – 2018. – С. 052017.

2. Galkina, E.V. Micro hot-spot model of initiation of composites based on the explosives and inclusions of nanoparticles with shell-core structure / E.V. Galkina, A.V. Kalenskii, A.A. Zvekov, M.V. Anan'eva, B.P. Aduiev, V.V. Galkina //7th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE-2020 online), (19th International Conference on Radiation

Physics and Chemistry of Condensed Matter): Abstracts. Tomsk: Publishing House of IAO SB RAS, 2020. P 482.

Результаты диссертации докладывались на 12 конференциях различного уровня, изложены в 36 научных работах, в том числе в 10 статьях в журналах, рекомендованных ВАК для публикации основных научных результатов диссертации, в 2 свидетельствах о государственной регистрации программ для ЭВМ. Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (№ 3.5363.2017/8.9), РФФИ № № 14-03-00534А, 19-33-90261, МД-3502.2021.1.2. Содержание диссертации соответствует паспорту научной специальности 1.4.4 – Физическая химия (физико-математические науки) в части развития модельных представлений о химических реакциях в реальных системах, осложненных процессами тепло-массопереноса (пп. 6, 7, 11).

Теоретическая значимость работы определяется развитием представлений о закономерностях процесса инициирования взрывного разложения лазерным импульсным излучением композитов на основе взрывчатых веществ и светопоглощающих наночастиц, модернизацией микроочагового варианта модели теплового взрыва с учетом прозрачной оболочки поглощающей наночастицы, установлением рядовых и функциональных зависимостей оптимальных радиусов наночастиц 12 металлов в PETN от физико-химических характеристик металлов.

Практическая значимость работы заключается в создании программ для ЭВМ, предназначенных для расчета оптических характеристик наночастиц со структурой “ядро-оболочка” и моделирования кинетики и расчета H_c PETN, содержащего поглощающие наночастицы; исследовании оптических и взрывных характеристик материалов, которые могут быть использованы в качестве капсуля ОД.

По диссертационной работе имеются следующие замечания:

1. В работе не указана длина волны (или диапазон) лазерного излучения, для которых проводились расчёты.
2. Рисунки оформлены не в едином стиле.
3. В главе 3 приведены результаты без учета поглощения излучения наночастицами. Из полученных результатов не понятно как будут выглядеть реальные зависимости, поскольку коэффициент эффективности поглощения сильно зависит от природы металла, длины волны и радиуса наночастицы.
4. Имеются орфографические ошибки и опечатки:
с. 60 «Методика расчета ыактров эффективности рассеяния и экстинкции аналогична (1.1, 1.2)»,

- с. 77 «При плотности энергии равной 75 мДж/см² происходит увеличение температуры с 710 до 1213 К от радиуса 10 нм до 60 нм далее от 60 нм до 120 нм уменьшение температуры с 1213 до 1102»,
- с. 79 «В рамках модели, записаной в виде системы дифференциальных уравнений с частными производными (5.1-5.3), рассчитаны кинетические зависимости температуры на границе PETN – наночастица»,
- с. 80 «Слошной линией показана зависимость температуры поверхности ядра наночастицы с учетом химического разложения PETN. На начальном участке температура увеличивается индентично при нагревании лазером до 1200 К», «За единицу принята критическая плотность энергии импульса для композитов исследуемого состава.», «Линейновозрастающая зависимсоть продолжается практически до 1000 К, далее при лазерном нагреве прямая продолжает возрастать, а с учетом химического разложения PETN прямая резко возрастает до 1200 К.», «(85 % от критической плотноти энергии) химиченское»,
- с. 81 «температура возрасла до 898,72 К.»,
- с. 83 «несколько меньшео 1146,37 К»,
- с. 84 «Однока плотности энергии»,
- с. 86 «ядра из металличенского алюминия 60 нм»,
- с. 92 «при постоянных значениях раоиуса наночастицы»,
5. В работе применяется термин «массовая концентрация наночастиц и массовая доля оксида в наночастице», с физической точки зрения было бы правильнее использовать объемную концентрация наночастиц и объёмную долю оксида в наночастице.

Сформулированные замечания имеют частный характер и не меняют общего позитивного мнения о работе. Диссертационная работа Галкиной Е.В. является научно-квалификационной работой, в которой решены задачи, имеющие существенное значение для развития физической химии инициирования лазерным импульсом вторичных взрывчатых веществ: разработана и исследована микроочаговая модель лазерного инициирования теплового взрыва с учетом наличия оксидной оболочки, проведено сравнение с существующим экспериментом. По актуальности, новизне, теоретической и практической значимости, объему проведенных исследований и уровню обсуждения полученных результатов диссертационная работа «Закономерности лазерного инициирования пентаэритриттетранитрата, содержащего наночастицы металлов, в том

числе со структурой «ядро-оболочка»» полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям «Положением о порядке присуждения ученых степеней» (пункты 9-11, 13, 14), утвержденном постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 (в действующей редакции), а ее автор Галкина Елена Владимировна заслуживает присвоения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

15 января 2024 года

 / Лисков И.Ю.

650000, Россия, г. Кемерово, пр. Советский, 18, Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр угля и углехимии Сибирского отделения Российской академии наук», liskow42@yandex.ru, 8-923-612-47-70.

Лисков И.Ю. – Кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории энергетических соединений и нанокompозитов Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр угля и углехимии Сибирского отделения Российской академии наук».

Подпись Лискова И.Ю. заверяю

Заместитель директора по научно-

административной работе ФИЦ УУХ СО РАН



 Зиновьев В.В.