

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертации Кирий Владимира Александровича по теме:
«Электрокинетическая неустойчивость вблизи реальных ионоселективных поверхностей», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Работа посвящена теоретическому и численному исследованию электрогидродинамики и гидродинамической устойчивости раствора электролита вблизи несовершенных ионоселективных мембран с учетом всегда присутствующих на их поверхности микронеоднородной проводимости и микрошероховатостей. Гидродинамические и электрические явления в микро- и наномасштабах в последнее время привлекают все большее внимание в связи с быстрым развитием микро-, нано- и биотехнологий. Среди многочисленных современных приложений можно отметить разработку микронасосов, очистку воды, обессоливание, исследования биологических мембран и клеток, приложения в фармацевтической промышленности, медицинской диагностике и областях, связанных с изготовлением микрочипов. В настоящее время сформировалась новая наука, занимающаяся данными явлениями: микрофлюидика. Иногда она называется нанофлюидикой или наномикрофлюидикой. Учитывая сказанное, можно считать диссертационное исследование **актуальным**.

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка цитируемой литературы и двух приложений.

Во введении кратко описаны основные проблемы, обоснована их актуальность, сформулирована цель работы и научная новизна, дана информация об апробации работы, публикациях и личном вкладе автора.

В первой главе приводится история проблемы, дается обзор практически важных приложений электрогидродинамики малых масштабов вблизи ионоселективных поверхностей и обосновывается фундаментальная важность исследуемой задачи.

Описываются особенности движения жидкости в микро- и наномасштабах. Обсуждается применимость модели сплошной среды в зависимости от характерных геометрических размеров объекта и свойств жидкости. Указывается, что в микромасштабах на первый план выходят способы управления течением жидкости, в которых главную роль играют различные электрические эффекты, создаваемые внешним электрическим полем. Анализируется замкнутая система уравнений, описывающая движение раствора электролита во внешнем электрическом поле. Рассматриваются перспективные с точки зрения приложений ионоселективные поверхности, пропускающие только один тип ионов: полупроницаемые электрические мембраны, электроды, системы микро- или наноканалов.

Поведение электролита около таких поверхностей проявляет необычные черты, используемые в практических приложениях. Анализируется вольт-амперная характеристика ионообменной мембраны. Отмечается, что экспериментальные данные указывают на существование трёх токовых режимов: при малых разностях потенциалов ток пропорционален приложенной разности потенциалов, этот режим называют омическим или допредельным. При увеличении разности потенциалов наступает насыщение тока или предельный режим. При дальнейшем увеличении тока наступает сверхпредельный режим, когда ток опять начинает расти с увеличением разности потенциалов. Указываются возможные причины возникновения сверхкритических токов: диссоциация воды, конвекция Рэлея-Бенара, термоэлектрокинетическая неустойчивость, микровихри Духина-Мищук и электрокинетическая неустойчивость. Обсуждается основной механизм возникновения сверхпредельных токов - электрокинетическая неустойчивость.

Во второй главе приводится постановка задачи об электрогидродинамике вблизи электрических мембран и приводятся простейшие решения, описывающие одномерное состояние равновесия в случае допредельных и предельных токовых режимов.

Сформулирована задача о поведении раствора электролита вблизи неидеальной электроселективной поверхности, включающая уравнения систему уравнений, краевые условия на межфазной поверхности электролит-мембрана и электродах и начальные условия для концентрации электролита. Внутри пористой мембраны скорость жидкости считается нулевой, уравнения транспорта ионов переписаны с учётом твердого скелета мембраны и, следовательно, пористости. Уравнение Пуассона выписано с учётом фиксированной плотности пространственного заряда. Рассмотрен случай допредельных и предельных токов для неидеально селективных поверхностей, когда кулоновская сила мала для реализации электрокинетической неустойчивости, и течение оказывается одномерным и зависящим только от координаты нормальной к мембране. Для одномерного стационарного случая система уравнений переходит в одно нелинейное дифференциальное уравнение третьего порядка с разрывными коэффициентами относительно электрического потенциала. Это уравнение с заданными граничными условиями решается численно. В результате находятся распределения концентраций катионов, соли, плотности электрического заряда и потенциала. Также построены вольт-амперные характеристики ячейки и определена селективность мембраны в зависимости от разности потенциалов и величины заряда мембраны.

В третьей главе в линейной постановке рассматривается задача об устойчивости одномерного состояния равновесия и об условиях возникновения режима сверхпредельных токов. Краевая задача на собственные значения решается численно, полученные результаты обсуждаются.

На одномерное состояние равновесия накладываются малые нормальные возмущения. При дискретизации краевой задачи учитывались изменения неизвестных величин вблизи межфазных поверхностей; для этого в каждой из трёх областей проводилась дискретизация методом Галёркина, в качестве базисных функций использовались полиномы Чебышёва. Проблема собственных значений в итоге свелась к обобщённой алгебраической проблеме собственных значений матриц, которая решалась с использованием стандартного QR—алгоритма. Результаты исследования устойчивости обсуждаются в параграфе 3.2. Критическое значение разности потенциалов даёт границу между состоянием равновесия и микровихревыми решениями, определяющими сверхпредельный токовый режим. Показано, что порог наступления неустойчивости зависит от величины заряда на мембране и от числа Дебая. На плоскости этих параметров построена карта режимов неустойчивости. При относительно больших значениях заряда мембраны неустойчивость носит монотонный характер, при малых значениях — колебательный характер. В промежуточных значениях происходит сложная перестройка режимов неустойчивости от одного типа к другому.

В четвертой главе произведено прямое численное интегрирование системы нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих динамику электролита около мембраны, с соответствующими граничными условиями. На основе решения построены распределение плотности заряда, функции тока, распределение вертикальной компоненты скорости для различных режимов возникновения конвекции. Когда заряд мембраны велик, в зоне обеднённого раствора из области пространственного заряда формируется система острых стационарных пиков. При уменьшении заряда пики становятся более размазанными и исчезают. В параграфе 4.2 приводятся результаты численного моделирования динамики электролита в случае, когда поверхность раздела электролит - мембрана покрыта проводящими и непроводящими участками (пятнами) естественного происхождения с характерным размером неоднородности от микрон до сотен микрон. Пятна создают неоднородность в распределении заряда и тангенциального электрического поля вблизи поверхности, а, следовательно, гидродинамическое течение - механизм формирования сверхпредельных токов Духина-Мишук. В случае, когда разность потенциалов больше критической, включается механизм Рубинштейна-Зальцмана, связанный с электрокинетической неустойчивостью. Оба механизма создают конвективный перенос ионов в дополнение к электромиграции и диффузии, что в конечном итоге приводит к сверхпредельным токовым режимам. Проведено численное моделирование динамики электролита при воздействии всегда присутствующих микронезоднородностей различной физической природы и микрошероховатостей поверхности мембраны, которые могут существенным образом менять поток ионов и вольт-амперную характеристику мембраны. Для

различных токовых режимов построены линии тока и вольт-амперные характеристики.

В работе получены **новые результаты**. В частности:

- Рассчитаны границы потери устойчивости одномерных состояний равновесия и, соответственно, смены токового режима на сверхпределный для неидеально селективных мембранных систем.
- Исследованы основные переходы и неустойчивости вблизи неидеально селективных электрических мембран при изменении селективности и приложенной разности потенциалов.
- Теоретически и численно исследовано поведение электролита вблизи неоднородных электроселективных поверхностей, состоящих из чередующихся проводящих и непроводящих элементов при наличии нормального к поверхности электрического поля.
- Исследована динамика раствора электролита под действием внешнего электрического поля вблизи ионоселективной поверхности, имеющей геометрические шероховатости микронного размера.

Достоверность полученных результатов обусловлена применением классических математических и надёжных численных методов, сопоставлением полученных численных результатов с аналитическими и численными результатами других авторов. Существует количественное согласие результатов расчёта порога неустойчивости, полученного методами линейной теории устойчивости и прямым численным интегрированием полной нелинейной системы Нернста-Планка-Пуассона-Стокса.

Научная и практическая значимость диссертационного исследования состоит в том, что его результаты могут найти применение в дальнейшем исследовании течений электролита около электроселективных поверхностей во внешнем электрическом поле. Расчёты могут использоваться при проектировании новых мембранных устройств и при создании новых приборов, основанных на электроосмотическом движении, в частности, микронасосов и микросмесителей.

В заключении кратко перечислены основные результаты работы.

По сути работы можно сделать следующие замечания.

1. Одни и те же уравнения выписываются дважды. Например, уравнения (2.4) – (2.7) и (2.23) – (2.26). И это повторяется в нескольких местах. Можно было бы просто сослаться.
2. На рис. 1.8 приводится классическая нейтральная кривая для неустойчивости Рэлея-Бенара. Зачем? К тому же оси координат поменяны местами: волновое число зависит от числа Рэлея. Обычно рисуют наоборот.

3. Иногда автор употребляет странную терминологию: «разность потенциала» вместо «разность потенциалов», «разность температуры» вместо «разность температур», «точные численные решения», вместо «численные решения».
4. Что за одномерное стационарное течение, о котором говорится в начале параграфа 2.3, в котором скорость вообще не фигурирует?
5. На стр. 55 переход от допредельных токовых режимов к предельным автор называет бифуркацией. Бифуркация это раздвоение или ветвление. Что в этом переходе ветвится?
6. Почему на вольт-амперных характеристиках (рис. 2.5) на линиях В и С показаны переходы к сверхпредельным режимам, которые происходят раньше чем переходы от допредельных к предельным?
7. В работе нет упоминаний и ссылок на исследования по электрогидродинамической неустойчивости при униполярной инжекции. В обоих случаях физический механизм возникновения неустойчивости – взаимодействие пространственного заряда с внешним электрическим полем. Более того – уровень инжекции зачастую регулируется ионообменными мембранами.

Несмотря на это работа в целом заслуживает положительного отзыва: в ней автор получил ряд новых интересных результатов, продемонстрировал технику владения теоретическими и численными методами исследования. Работа прошла апробацию на ряде конференций различного уровня, её результаты достаточно широко освещены в научной печати. Работа представляется законченным исследованием.

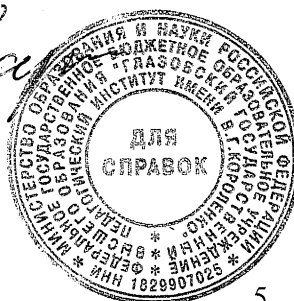
Учитывая вышеизложенное, считаю, что диссертационная работа Кирий В.А. соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 –Механика жидкости, газа и плазмы.

Оппонент: Саранин Владимир Александрович, д.ф.-м.н., профессор кафедры физики и дидактики физики Глазовского государственного педагогического института

427621, г. Глазов, ул. Первомайская, 25, тел. (8-34141) 5-58-57, e-mail: ggpi@ggpi.org

Подпись

В.А.



5

В.А. Саранин

