

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА

Д 212.204.03 на базе Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета
от «18» февраля 2016 года, протокол № 2

О присуждении Костину Андрею Сергеевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата технических наук.

Диссертация «Математическое моделирование и оптимизация процесса получения наночастиц диоксида титана золь-гель методом» в виде рукописи по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий, принята к защите «3» декабря 2015 года, протокол № 18, диссертационным советом Д 212.204.03 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» Министерства образования и науки Российской Федерации (125047, Москва, Миусская площадь, 9, приказ о создании диссертационного совета от «15» октября 2014 года № 574/нк).

Соискатель **Костин Андрей Сергеевич**, «14» февраля 1987 года рождения, в 2008 году окончил Федеральное государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова». В период с 2008 по 2011 годы был аспирантом очной формы обучения аспирантуры кафедры информационных компьютерных технологий «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» Министерства образования и науки Российской Федерации. Временно не работает.

Диссертационная работа выполнена на кафедре информационных компьютерных технологий Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научный руководитель доктор технических наук, профессор Кольцова Элеонора Моисеевна, гражданин Российской Федерации, заведующий кафедрой информационных компьютерных технологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор Носов Геннадий Алексеевич, гражданин Российской Федерации, профессор кафедры процессов и аппаратов химических технологий имени Н.И. Гельперина Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский технологический университет», Москва;

доктор технических наук, профессор Матвейкин Валерий Григорьевич, гражданин Российской Федерации, заведующий кафедрой «Информационные процессы и управление» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Тамбовский государственный технический университет», Тамбов, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное унитарное предприятие «Государственный ордена Трудового Красного Знамени научно-исследовательский институт химических реактивов и особо чистых химических веществ», Москва, в своем **положительном заключении**, подписанном доктором химических наук Аллахвердовым Грантом Рантовичем, заведующим лабораторией тонкого неорганического синтеза, и кандидатом химических наук, Гришечкиной Еленой Витальевной, ученым секретарем, утвержденном директором, доктором технических наук Санду Романом Александровичем, указала, что диссертация является законченной научно-квалификационной работой, соответствующей требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней», а ее автор Костин Андрей Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата

технических наук по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий (отзыв заслушан и одобрен на заседании Ученого совета «20» января 2016 года, протокол № 1).

Соискатель имеет **6** опубликованных работ по теме диссертации, в том числе **3** в научных журналах, включенных в перечень российских рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций. Публикации выполнены в соавторстве с научным руководителем на русском языке. Личный вклад соискателя состоит в получении и анализе экспериментальных данных, в разработке математической модели процесса агрегации наночастиц диоксида титана, математической модели золь-гель метода получения наночастиц диоксида титана, в написании алгоритмов и программ для расчетов, интерпретации полученных данных, подготовке и написании материала. Соискателем опубликованы 2 тезиса докладов международных конференций, получено авторское свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Костин А.С., Кольцова Э.М. К вопросу о механизме агрегации наночастиц диоксида титана // *Фундаментальные исследования*, 2012. № 6. С. 647-651.

2. Костин А.С., Кольцова Э.М. Математическое моделирование и экспериментальное исследование золь-гель процесса получения наночастиц диоксида титана // *Фундаментальные исследования*, 2012. № 9. С. 381-387.

3. Костин А.С., Филиппова Е.Б., Кольцова Э.М. Влияние структурной составляющей расклинивающего давления на агрегативную устойчивость наночастиц диоксида титана, получаемого золь-гель методом // *Известия МГТУ «МАМИ»*, 2015. Т. 3. №2(24). С. 37-42.

На автореферат диссертации поступило **10** отзывов, **все положительные**. В отзывах указывается, что представляемая работа характеризуется высоким теоретическим и экспериментальным уровнем, имеет большое научное и практическое значение и по своей новизне и актуальности соответствует требованиям Высшей аттестационной комиссии.

В отзыве кандидата химических наук Елисеева Андрея Анатольевича, доцента факультета наук о материалах, доктора химических наук Лукашина Алексея Викторовича, члена-корреспондента Российской академии наук, заместителя декана факультета наук о материалах Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», сделано замечание: в автореферате не указана точность определения размеров наночастиц и дисперсия сформированных наночастиц по размеру, что затрудняет оценку точности расчетов радиуса частиц в зависимости от соотношения компонентов. Кроме того, в работе не обсуждается роль дисперсности нанофазы на устойчивость коллоидных растворов к агрегации.

В отзыве кандидата химических наук Пахомова Валерия Петровича, начальника отдела электрохимической физики Федерального государственного бюджетного учреждения «Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», содержится замечание: из автореферата диссертационной работы не ясно, что подтверждает преимущество механизма ОН-ОН над механизмом ОН-ОР, можно ли измерить соотношение скоростей агрегации по этим механизмам экспериментальным путем.

В отзыве доктора технических наук, профессора Дьячкова Павла Николаевича, ведущего научного сотрудника лаборатории квантовой химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова Российской академии наук, содержится замечание: не понятно, какова погрешность производимых вычислительных экспериментов, какова точность полученных прогнозов.

В отзыве кандидата химических наук Селищева Дмитрия Сергеевича, научного сотрудника, доктора химических наук Козлова Дениса Владимировича, руководителя группы фотокатализа, ведущего научного сотрудника Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института катализа имени Г.К. Борескова Сибирского

отделения Российской академии наук, содержатся вопросы и замечания: может ли автор сравнить конечную стоимость TiO_2 , произведенного по золь-гель методу со стоимостью такого распространенного и достаточно дорогого коммерческого образца TiO_2 , как Nombifine N; из текста автореферата остаются до конца не ясными условия применимости разработанной модели к процессу получения диоксида титана; в тексте автореферата не удалось найти данных о фазовом составе получаемых наночастиц диоксида титана.

В отзыве доктора технических наук Тихомирова Сергея Германовича, профессора кафедры информационных и управляющих систем Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет инженерных технологий», содержатся вопросы: как показана и доказана адекватность разработанной математической модели? Инженерный расчет параметров реактора выполнен для получения конечного количества диоксида титана. Как в дальнейшем этот реактор можно использовать?

В отзыве доктора технических наук, профессора Ахмадиева Фаила Габдулбаровича, заведующего кафедрой «Прикладная математика» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Казанский государственный архитектурно-строительный университет», содержится замечание: по автореферату не ясно, как проводились идентификация математической модели и оптимизация процесса получения наночастиц диоксида титана.

В отзыве доктора технических наук, профессора Лабутина Александра Николаевича, заведующего кафедрой технической кибернетики и автоматике Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет», содержатся замечания: из автореферата не ясно: рассчитанный реактор периодического или непрерывного типа; каковы требования к температуре процесса, определяющей значение константы скорости реакции гидролиза – K_3 ; как определялась абсолютная погрешность коэффициентов L_1 и L_2 для расчета относительной погрешности; вызывает некоторое сомнение корректность формулы (2) на стр. 6 (содержит двойной интеграл) с учетом выражения (3). Действительно ли подынтегральное выражение содержит произведение: $f(\mu) \cdot f(\mu)$?

В отзыве доктора химических наук, профессора Захарова Вадима Петровича, проректора по научной работе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет», содержатся замечания: не обоснован выбор технологии OpenMP для параллельного программирования, не ясно, что такое $MTiO_2$, как используется диоксид титана в топливных элементах.

В отзыве доктора технических наук, Жекеева Малика Касымовича, профессора кафедры «Химическая технология неорганических веществ», заведующий лабораторией «Проблемы экологии» научно-исследовательского института «Экологии и биотехнологии» Южно-Казахстанского государственного университета имени М. Ауэзова, содержится замечание: из автореферата не ясно, были ли исследованы какие-то свойства диоксида титана, кроме его размера, такие как удельная поверхность, химически активная поверхность, количество кислотных центров.

Отзыв доктора физико-математических наук, Урманчеева Саида Федоровича, профессора, временно исполняющего обязанности директора Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института механики им. Р.Р. Мавлютова Уфимского научного центра Российской академии наук замечаний не содержит.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обоснован тем, что область их научных интересов и направление основной деятельности соответствуют тематике работы соискателя, что подтверждается большим числом научных и учебно-методических публикаций. Высокая компетентность в области основных процессов химической

технологии и аппаратов для их проведения дает возможность им в должной мере оценить научную и практическую значимость диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

предложено совмещение аппаратов механики гетерогенных сред и термодинамики необратимых процессов для получения зависимостей структур термодинамических сил и потоков при агрегации включений;

разработаны, методика расчета для определения размера частиц при агрегации и условий их получений (на примере получения частиц диоксида титана) на основе использования вариационного принципа минимума производства энтропии системы, в которой протекают процессы агрегации; математическая модель золь-гель метода процесса получения наночастиц диоксида титана, рассчитывающая компонентный состав частиц и их размер, позволяющая оценить влияние мольного соотношения исходных компонентов на состав и размер полученных частиц;

доказано на основе проведения вычислительного эксперимента с применением полученной математической модели золь-гель процесса преобладание механизма агрегации (поликонденсации) $\text{OH} - \text{OH}$ над механизмом $\text{OR} - \text{OH}$;

определены условия на основе проведения экспериментальных исследований и вычислительного эксперимента для получения наночастиц диоксида титана с радиусом 11-15 нм при температуре 20-25°C, годных для применения в катодных катализаторах водородных топливных элементов;

проведен инженерный расчет параметров реактора для получения диоксида титана в количестве, необходимом для выпуска 1000 автомобилей в год, работающих на водородном топливе.

Теоретическая значимость исследований обоснована тем, что:

– **получены** на основе термодинамического подхода: аналитическая зависимость для определения движущей силы агрегации, с использованием теории ДЛФО (Дерягина, Ландау, Фервея, Овербека), аналитическая зависимость для «константы» агрегации (поликонденсации) для применения её в уравнениях баланса числа включений в любых системах с эффектом агрегации (поликонденсации);

– **впервые использован** термодинамический вариационный принцип минимума производства энтропии для определения предельного размера частиц при агрегации, который позволил теоретически обосновать возможность получения наночастиц диоксида титана золь-гель методом в диапазоне размеров (радиусов) [7-30 нм];

– **разработана** математическая модель процесса получения наночастиц диоксида титана алкоксидным золь-гель методом, учитывающая сущность всех протекающих физико-химических явлений (гидролиз, поликонденсацию по двум механизмам: $\text{OH} - \text{OH}$, $\text{OH} - \text{OR}$) с учетом функции распределения кластеров по размерам и по числу входящих в них структурных частиц (Ti, O, R, H);

– **выявлено** преобладание механизма агрегации $\text{OH} - \text{OH}$ над механизмом $\text{OH} - \text{OR}$.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

– **разработаны** программный комплекс, пригодный для моделирования процессов получения широкого класса оксидов алкоксидным золь-гель методом (с содержанием атомов основного компонента до 1 000 000); методика расчета для определения размера частиц при агрегации;

– **определены** мольные соотношения компонентов и стабилизатора (азотной кислоты) для получения наночастиц диоксида титана с радиусом 11-15 нм при температуре 20-25°C алкоксидным золь-гель методом, годных для применения в катодных катализаторах водородных топливных элементов со сниженным содержанием платины (в 2 раза по сравнению с коммерческим при сохранении вольт-амперных характеристик);

– полученные результаты **могут быть рекомендованы** для использования научно-исследовательскими институтами, нанотехнологическими центрами и предприятиями химической промышленности для разработки технологий получения нанопорошков широкого класса оксидов.

Оценка достоверности результатов выявила, что:

– экспериментальные данные получены с помощью современных методов и технически средств;

– достоверность полученных результатов подтверждается корректным применением методов математического и компьютерного моделирования, параллельного программирования; использованием фундаментальных закономерностей протекания процесса агрегации, теории ДЛФО и термодинамического подхода; сопоставлением результатов численных экспериментов с результатами экспериментальных исследований;

– выводы диссертации обоснованы и не вызывают сомнения, согласуются с современными представлениями о процессе агрегации.

Личный вклад соискателя состоит в участии на всех этапах выполнения диссертации: в проведении экспериментальных исследований; в создании математической модели алкоксидного золь-гель метода; в разработке методики расчета определения предельного размера на основе принципа минимума производства энтропии; в применении термодинамического подхода для получения структур термодинамических движущих сил и потоков; в разработке алгоритмов и программных комплексов для расчета золь-гель процесса получения наночастиц диоксида титана; подготовке публикаций по работе.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследования, непротиворечивой методологической платформы, концептуальности и взаимосвязи выводов. По своему содержанию диссертация отвечает паспорту специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий по пунктам «фундаментальные разработки в изучении явлений, переноса энергии и массы в технологических аппаратах»; «методы изучения химических процессов и аппаратов, совмещенных процессов».

Диссертационный совет пришёл к выводу о том, что диссертация представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, в которой на основе проведенных исследований решена задача получения наночастиц диоксида титана алкоксидным золь-гель методом для использования его в водородных топливных элементах, что имеет важное значение для развития экономики страны.

По актуальности, новизне, практической значимости диссертация соответствует требованиям, установленным «Положением о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук.

На заседании «18» февраля 2016 года протокол № 2 диссертационный совет принял решение присудить Костину Андрею Сергеевичу ученую степень кандидата технических наук по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 11 докторов наук по специальности и отрасли наук рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, **проголосовали: за присуждение учёной степени – 17**, против присуждения учёной степени – **нет**, недействительных бюллетеней – **нет**.

Председатель диссертационного совета

Ученый секретарь диссертационного совета



М. Б. Глебов

А. В. Женса