

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Костина Андрея Сергеевича «Математическое моделирование и оптимизация процесса получения наночастиц диоксида титана золь-гель методом», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий.

Синтез наночастиц имеет исключительную важность для многих областей науки и техники. Материалы, созданные на основе нанотехнологий, обладают уникальными механическими, оптическими, каталитическими и другими свойствами благодаря размеру частиц, из которых они состоят, обеспечивающего большое отношение поверхности к объему. Возрастающий вклад поверхностных явлений вызывает изменения в свойствах веществ. При производстве наночастиц требования к качеству продукта включают обычно не только ограничение предельного размера частиц, но и заданную степень полидисперсности материала. Это означает, что должны быть тщательно подобраны условия проведения синтеза. Золь-гель технология является одним из наиболее перспективных методов массового получения наночастиц и материалов на их основе. Этот метод позволяет также гибко регулировать условия проведения процесса, а значит, и размеры получаемых частиц. Золь-гель технология не только не требует больших затрат, но и позволяет получать продукты особой чистоты.

Новизна работы определяется тем, что 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. Также впервые разработана математическая модель процесса получения наночастиц диоксида титана золь-гель методом, учитывающая сущность всех протекающих физико-химических явлений (гидролиз, поликонденсация по двум механизмам:  $\text{OH-OR}$ ,  $\text{OH-OH}$ ) с учетом функции распределения

кластеров по радиусам, с учетом распределения кластеров по числу входящих в них структурных единиц (Ti, O, R, H).

Работа является практически значимой: автором разработана математическая модель золь-гель процесса получения наночастиц диоксида титана, позволяющая оценивать влияние мольного соотношения исходных компонентов и стабилизатора (азотной кислоты) на размер получаемых частиц. Также разработан программный комплекс, пригодный для моделирования процессов получения широкого класса оксидов золь-гель методом, а результаты работы могут быть использованы для создания промышленно-технологического регламента на получение диоксида титана заданного размера.

Экспериментальные данные получены с использованием широкого круга современных методов исследования и их достоверность не вызывает сомнений. Результаты работы прошли апробацию на международной конференции, по теме диссертации опубликовано 6 печатных работ, из них 3 статьи в рецензируемых журналах, определенных Высшей аттестационной комиссией, 2 тезиса докладов и 1 авторское свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Рассматриваемая работа, однако, не лишена некоторых недостатков:

- в автореферате не указана точность определения размеров наночастиц и дисперсия сформированных наночастиц 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.

Вышеприведенное замечание, однако, не затрагивает основных результатов и выводов работы и не снижают ее научную ценность.

Таким образом, диссертационная работа Костина Андрея Сергеевича «Математическое моделирование и оптимизация процесса получения наночастиц диоксида титана золь-гель методом», представленная на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней»

утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 №842, а ее автор, безусловно, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата технических наук.

Кандидат химических наук,  
доцент ФНМ МГУ

Зам. декана ФНМ МГУ  
чл. корр. РАН

03.02.2016



А.А. Елисеев

А.В. Лукашин

119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 73, факультет наук о материалах

Тел.: +7 (495) 939-52-48, eliseev@inorg.chem.msu.ru