

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

В связи с широким распространением золь-гель технологии и отсутствием программных модулей для моделирования золь-гель метода, в частности моделирования процесса агрегации частиц, тема диссертационной работы, безусловно является актуальной.

Диссертационная работа обладает существенными элементами новизны: на основе термодинамического подхода получены аналитические зависимости для определения термодинамического потока и движущей силы агрегации; впервые разработана математическая модель процесса получения наночастиц диоксида титана золь-гель методом, учитывающая сущность всех протекающих физико-химических явлений (гидролиз, поликонденсация по двум механизмам: OH-OR, OH-OH) с учетом функции распределения кластеров по радиусам, с учетом распределения кластеров по числу входящих в них структурных единиц (Ti, O, R, H); выявлено преобладание механизма агрегации OH-OH над механизмом агрегации OH-OR.

Диссертационная работа является практически значимой, так как:

- в результате экспериментальных исследований определены мольные соотношения компонентов и стабилизатор (азотная кислота) для получения наночастиц диоксида титана с радиусом 11-15 нм при температуре 20-25°C золь-гель методом, годных для применения в катодных катализаторах топливных элементов водородных двигателей с сниженным содержанием платины (в 2 раза меньше платины, чем в коммерческом катализаторе 40%Pt/C);

- 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;

- разработан программный комплекс, пригодный для моделирования процессов получения широкого класса оксидов золь-гель методом;
- результаты работы могут быть использованы для создания промышленно-технологического регламента на получение диоксида титана заданного размера;
- полученный диоксид титана использован для создания PtCoCr/MTiO₂ катализатора топливного элемента;
- проведен инженерный расчет параметров реактора для получения диоксида титана в количестве, необходимом для выпуска 1000 автомобилей в год, работающих на водородном топливе.

Достоверность теоретических и практических результатов не вызывает сомнений. По теме диссертации опубликовано 6 печатных работ, из них 3 статьи в рецензируемых журналах, определенных Высшей аттестационной комиссией, 2 тезиса докладов, 1 авторское свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Однако из автореферата диссертационной работы не понятно, какова погрешность производимых вычислительных экспериментов, какова точность полученных прогнозов. Указанные замечания не портят хорошего впечатления о проделанной работе.

Вся диссертационная работа сделана на высоком научном уровне, является актуальной и практически значимой, соответствует паспорту специальности 05.17.08, отвечает требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней» (утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842), а диссертант Костин А.С. заслуживает присвоения ему квалификации кандидата технических наук по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий.





25.01.2016

Доктор химических наук, профессор

П.Н.Дьячков

лаб. Квантовой химии ИОНХ РАН

тел +79032011976

p_dyachkov@rambler.ru

Дьячков Павел Николаевич
119991, Москва, Ленинский пр

