

ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора технических наук, профессора, заведующего кафедрой технической кибернетики и автоматики ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет» Лабутина Александра Николаевича на диссертацию Лебедева И.В на тему: «Моделирование структуры, свойств и процессов получения кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальностям: 05.17.08 – «Процессы и аппараты химических технологий» и 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Актуальность темы диссертационной работы

Высокопористые материалы – аэрогели являются новыми функциональными композиционными материалами, которые находят широкое применение в науке и технике в качестве тепло- и шумоизоляторов, газовых фильтров, носителей веществ в фармацевтике и пищевой промышленности, носителей катализаторов, адсорбентов и др.

Различные области применения предъявляют свои специфические требования к структуре и свойствам аэрогелей.

В настоящее время не определена четкая взаимосвязь между химическим составом, способами и условиями получения, структурой и свойствами кремний-резорцинол-формальдегидных (КРФ) и кремний-углеродных (КУ) аэрогелей.

В связи с этим разработка процессов получения КРФ и КУ аэрогелей, исследование взаимосвязей между параметрами отдельных технологических стадий и структурой и свойствами аэрогелей, создание математических моделей, способных прогнозировать свойства композиционных материалов являются актуальными.

Изложенное свидетельствует об актуальности решаемых в диссертации задач и темы работы в целом.

Анализ содержания работы

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы из 156 наименований и приложений. Общий объем составляет 253 страницы печатного текста, включая 12 таблиц и 84 рисунка.

Во введении показана актуальность работы, цели и задачи исследования. Кроме того, приведена научная новизна и практическая ценность полученных результатов, положения, выносимые на защиту, сведения об апробации работы.

В первой главе проведен анализ литературных источников по теме диссертационной работы. Приведены основные типы применяемых в настоящее время аэрогелей. Более подробно рассмотрены кремний-резорцинол-формальдегидные и кремний-углеродные аэрогели и процессы их получения. В главе рассмотрены основные подходы и методы моделирования нанопористых структур на различных уровнях, а также методы прогнозирования свойств нанопористых структур – теплопроводности и механических свойств. Глава заканчивается постановкой цели и задач исследования.

Вторая глава содержит результаты экспериментальных исследований процессов получения кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей. Приведены методики получения изучаемых аэрогелей и результаты аналитических исследований наработанных экспериментальных образцов. Исследовано влияние параметров отдельных технологических стадий на структуру и свойства кремний-

резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей. Предложен механизм структурообразования для кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей. Разработаны лабораторные методики получения кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей, а также главы лабораторного регламента в части эффективных технологических схем для получения кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей с заданными свойствами.

Третья глава посвящена разработке клеточно-автоматных моделей для генерации модельных структур кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей. Было разработано две модели на основе двух различных методов: перекрывающихся пор и ограниченной диффузией кластер-кластерной агрегации (DLCA). Был проведен вычислительный эксперимент по получению модельных структур кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей с помощью обеих моделей. Проведено сравнение модельных структур с экспериментальными образцами. Кроме того, проведено сравнение двух моделей, выявлены их преимущества и недостатки. Даны рекомендации по применению обеих моделей.

Четвертая глава посвящена разработке клеточно-автоматной модели для генерации модельных структур кремний-углеродных аэрогелей. Приведены описание разработанной модели, ее допущения и границы ее применения. Был проведен вычислительный эксперимент по получению модельных структур кремний-углеродных аэрогелей. Исходные модельные структуры кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей были получены с помощью обеих моделей – на основе метода DLCA и метода перекрывающихся пор. Проведено сравнение модельных структур с экспериментальными образцами. Проведено сравнение модельных кремний-углеродных структур в зависимости от того, с помощью какой из двух моделей была получена исходная кремний-резорцинол-формальдегидная структура.

В пятой главе приведены разработанные модели для прогнозирования свойств кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей – модуля Юнга и теплопроводности. Разработанные модели позволяют прогнозировать свойства аэрогелей с учетом модельных структур исследуемых аэрогелей. Для обеих моделей приведены описания, допущения и границы их применения.

Выводы достаточно полно отражают содержание диссертационной работы.

Научная новизна исследования и полученных результатов

Разработан процесс получения кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей, изучено влияние технологических параметров, в частности, разбавления, соотношения компонентов и температуры старения на формирование структуры кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей и их вторичных кластеров, подобраны параметры ведения процессов гелирования, сверхкритической сушки.

Изучен процесс пиролиза кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей и его влияние на структуру кремний-углеродных аэрогелей.

Разработаны оригинальные клеточно-автоматные модели для генерации структур гибридных кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей на основе метода ограниченной диффузией кластер-кластерной агрегации и метода перекрывающихся пор, отличающиеся от ранее существующих моделей тем, что при моделировании учитывается наличие вторичных кластеров различного размера для органической и неорганической составляющих, что более полно соответствует реальной физико-химической природе гибридных аэрогелей и позволяет использовать эти модельные структуры как на нано-,

так и на мезоуровне в дальнейших расчетах теплопроводности, механических свойств, заменяя натурный эксперимент вычислительным.

Разработана оригинальная клеточно-автоматная модель для генерации структур кремний-углеродных аэрогелей, в которой использованы данные по структуре кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей и алгоритм удаления резорцинол-формальдегидной составляющей вдоль границы "вещество-пора" с вероятностью, рассчитанной по построенной эмпирической зависимости, что позволяет отразить процесс замены кластера одного вещества на неравноценный кластер другого вещества (процесс пиролиза) с изменением характера распределения пор по размерам.

Проанализированы зависимости теплопроводности и механических свойств от структуры и состава аэрогелей на основании вычислительного эксперимента по оригинальным клеточно-автоматным моделям для прогнозирования теплопроводности и механических свойств (модуля Юнга), позволяющим учитывать гетерогенную структуру аэрогеля, состоящую из пор, наполненных воздухом, и твердого каркаса органической и неорганической составляющих и их физико-механических свойств.

Практическая значимость

Разработаны лабораторные методики по получению кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей и отдельные главы лабораторного регламента по получению кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей, включая принципиальную технологическую схему процесса.

Создан комплекс программ для проведения вычислительных экспериментов, который включает в себя следующие модули: 1) модуль генерации пористых структур кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей с помощью двух моделей: модель на основе метода перекрывающихся пор и метода DLCA; 2) модуль генерации пористых структур кремний-углеродных аэрогелей; 3) модуль расчета теплопроводности; 4) модуль расчета механических свойств.

Степень обоснованности и достоверность научных положений и выводов

Достоверность обеспечивается большой выборкой экспериментальных исследований структур кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей с использованием общепринятых аналитических методов и современного оборудования; тестированием предлагаемых в работе моделей и алгоритмов на ряде модельных задач; сопоставлением результатов моделирования с экспериментальными данными.

Замечания по работе

1. Из описания процесса получения кремний-углеродных аэрогелей не ясно, из каких соображений выбиралась температура процесса – 700 и/или 950 °С?

2. В работе не обоснован выбор инертного газа при пиролизе. Встает вопрос: влияет ли выбор газа на структуру и свойства кремний-углеродных аэрогелей?

3. Моделирование структуры кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей проводилось только с учетом пор размером до 100 нм. Не ясно, каким образом учитываются поры размером более 100 нм, о которых упоминалось в главе 2.

4. На мой взгляд, не корректно записана формула (3.1) стр. 104 для определения средней относительной погрешности. Более правильно использовать формулу

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|X_i^{\text{расч}} - X_i^{\text{эксп}}|}{X_i^{\text{эксп}}} \cdot 100 \%.$$

При проверке адекватности моделей кроме средней относительной погрешности полезно было бы проанализировать случайность разброса абсолютной погрешности от нуля в зависимости от экспериментального значения величины.

5. В таблицах 3.1. (стр. 104) и 4.1 (стр. 118) не указано, при какой температуре старения получены образцы 4-6.

6. В приложении 4 приведены лабораторные технологические схемы получения кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей, однако отсутствуют данные о размерах оборудования. Следовало бы дать информацию по всем 144 экспериментальным образцам в приложении.

Общая оценка работы

Указанные замечания не снижают общей высокой оценки работы, являющейся законченным научным трудом, имеющим существенную научную новизну и практическую значимость в области разработки процессов получения аэрогелей и математического моделирования их структуры и свойств.

Диссертационная работа Лебедева И.В. «Моделирование структуры, свойств и процессов получения кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей» соответствует паспорту специальности 05.17.08 – «Процессы и аппараты химических технологий».

По формуле специальности:

- «Совершенствование аппаратного оформления технологических процессов с позиций энерго- и ресурсосбережения»;

По области исследования:

- «Исследование тепловых процессов в технологических аппаратах и технологических схемах»;
- «Исследование массообменных процессов и аппаратов»;

Работа соответствует паспорту специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

По формуле специальности:

- «Применение математического моделирования, численных методов и комплексов программ для решения научных и технических, фундаментальных и прикладных проблем»;

По области исследования:

- «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента»;
- «Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования»;

Научные положения апробированы на международных и российских конференциях. Основное содержание диссертации с достаточной полнотой отражено в 9 публикациях автора, которые включают 3 статьи в рецензируемых научных журналах по перечню ВАК и 3 статьи, индексируемые базами данных WebofScience и SCOPUS. Кроме того, автором получено 5 свидетельств о регистрации программы для ЭВМ.

Автореферат отражает содержание диссертации и основные результаты работы.

Заключение

Диссертационная работа Лебедева И.В. представляет собой завершённую, самостоятельно выполненную научно-квалификационную работу, направленную на разработку процессов получения кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей с заданными структурой и свойствами с использованием методов математического моделирования. Результаты исследований имеют существенное значение для развития методологических основ и практических подходов к разработке процессов получения аэрогелей.

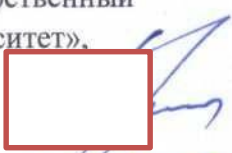
По актуальности, научной новизне и практической значимости диссертационная работа «Моделирование структуры, свойств и процессов получения кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей» соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г.), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор - Лебедев Игорь Витальевич – заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальностям 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий и 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент:

Заведующий кафедрой технической
кибернетики и автоматики

ФГБОУ ВО «Ивановский государственный
химико-технологический университет»,

д.т.н., профессор



Александр Николаевич Лабутин

10.12.2018

Адрес: 153000, Центральный федеральный округ, Ивановская область, г. Иваново,
пр. Шереметевский, 7

Тел. 8(4932) 32-72-26

Адрес электронной почты: lan@isuct.ru

Подпись 
Ученый секретарь 

