



"УТВЕРЖДАЮ"  
проректор по научной работе  
ФГБОУ ВО "КНИТУ"

А.Н. Сабирзянов

17 января 2018

**Отзыв ведущей организации  
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего  
образования**

**"Казанский национальный исследовательский технологический университет"**

на диссертационную работу

Лебедева Игоря Витальевича

на тему:

"Моделирование структуры, свойств и процессов получения кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей", представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук, специальности 05.17.08 – "Процессы и аппараты химических технологий" и 05.13.18 – "Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ"

**Актуальность**

Задача создания новых функциональных композиционных материалов является приоритетной и актуальной для различных областей науки и промышленности Российской Федерации. Выполнение этой задачи требует проведения большого количества экспериментальных исследований, что ведет к существенному увеличению затрат трудовых и финансовых ресурсов. Однако применение современных подходов к моделированию, а также аппаратных и программных средств дает возможность снизить эти затраты, так как дает возможность получить адекватные модельные структуры функциональных композиционных материалов и прогнозировать их свойства.

Одними из заслуживающих внимания функциональных композиционных материалов являются гибридные аэрогели. Аэрогели являются перспективными материалами при использовании в качестве сорбентов и теплоизоляционных материалов, что обусловлено их высокими площадью удельной поверхности и пористостью.

В работе были проведены теоретические и экспериментальные исследования процессов получения кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей. На большой экспериментальной выборке изучена зависимость структуры материалов от условий их получения: концентрации растворителя, соотношения используемых реагентов, температуры старения. В результате проведенной работы были подобраны параметры ведения процессов гелирования, сверхкритической сушки и пиролиза, разработаны лабораторные методики по получению кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей, отдельные главы лабораторного регламента по получения кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей.

Были созданы модели и алгоритмы, которые позволяют получать модельные структуры кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей и прогнозировать их свойства (теплопроводность, модуль Юнга) с учетом их структуры. Разработанные модели позволяют сократить количество экспериментальных исследований, необходимых для создания новых композиционных материалов, заменяя их на вычислительные эксперименты.

В связи с вышеизложенным актуальность диссертационной работы не вызывает сомнений.

### Основное содержание работы

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

**Введение** содержит актуальность проводимых научных исследований, краткое содержание работы, постановку целей и задач, научную новизну и практическую ценность, а также положения, выносимые на защиту. Кроме того, отмечен личный вклад автора и указаны сведения об апробации работы.

**В первой главе** работы проведен анализ научно-технической литературы. Рассмотрены основные типы аэрогелей, их характеристики и свойства. Отдельное внимание уделено кремний-резорцинол-формальдегидным и кремний-углеродным аэрогелям - их свойствам, особенностям и процессам получения. Кроме того, изучены существующие методы моделирования нанопористых структур на нано- и мезоуровнях. Исследованы актуальные методы прогнозирования свойств нанопористых структур - теплопроводности и механических свойств. На основании анализа научно-технической литературы поставлены цели и задачи диссертационной работы.

**Вторая глава** работы содержит результаты экспериментальных исследований по получению кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей, полученных на их основе. Для наработанных образцов были проведены аналитические исследования их структурных и физико-механических свойств. На основании полученных данных были подобраны параметры ведения процессов гелирования и сверхкритической сушки для кремний-резорцинол-формальдегидных и оптимальный выбор температурного режима пиролиза для получения кремний-углеродных аэрогелей. Предложена схема образования структуры кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей. Были разработаны технологические схемы получения кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей с использованием термообработки и без использования термообработки. Были разработаны лабораторные методики по получению кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей, а также отдельные главы лабораторного регламента по получению кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей.

**В третьей главе** представлены клеточно-автоматные модели для генерации структур кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей: модель на основе метода перекрывающихся пор и модель на основе метода кластер-кластерной агрегации, ограниченной диффузией (DLCA). Для обеих моделей приведены описания и алгоритмы, а также сформулированы их допущения. Был проведен вычислительный эксперимент, в результате которого были получены модельные структуры, соответствующие ранее полученным экспериментальным образцам кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей. Проведена оценка адекватности полученных модельных структур, которая подтверждает адекватность разработанных моделей. Проведено сравнение двух моделей, выявлены их преимущества и недостатки, границы применения.

**В четвертой главе** представлена клеточно-автоматная модель для генерации структур кремний-углеродных аэрогелей на основе ранее полученных модельных структур кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей. Приведены описание, алгоритм и допущения разработанной модели. Был проведен вычислительный эксперимент, в результате которого были получены модельные структуры, соответствующие полученным ранее экспериментальным образцам кремний-углеродных аэрогелей. Исходные модельные кремний-резорцинол-формальдегидные структуры были получены с помощью обеих моделей – на основе метода перекрывающихся пор и метода DLCA. Проведена оценка адекватности полученных модельных структур, которая

подтверждает адекватность разработанных моделей. 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** представлены разработанные модели, которые позволяют прогнозировать свойства исследуемых аэрогелей - теплопроводности и модуля Юнга. Разработанные модели позволяют учитывать структуру аэрогелей. Приведено описание разработанных моделей и алгоритмов, сформулированы допущения моделей 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, а также сделаны рекомендации по оптимальному выбору температурного режима пиролиза.

Разработаны 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 натуральный эксперимент вычислительным.

Разработана 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 полученных результатов**

Разработаны методики по получению кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей, которые могут быть основой лабораторного регламента по получению кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей, а так же принципиальная технологическая схема 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 результатов обеспечивается большой выборкой экспериментальных исследований структур исследуемых аэрогелей с использованием общепринятых аналитических методов и современного оборудования; тестированием предлагаемых в работе моделей и алгоритмов на ряде модельных задач; проверкой адекватности разработанных моделей и сопоставлением с экспериментальными данными.

Основные результаты работы не противоречат данным научно-технической литературы. Кроме того, следует отметить, что работа прошла апробацию на международных и отечественных научно-практических конференциях.

Основное содержание диссертации достаточно полно отражено в автореферате и в 9 публикациях автора, включающих 3 статьи, индексируемые базами данных Web of Science и SCOPUS и 3 статьи в рецензируемых научных журналах по перечню ВАК. Кроме того, автором получено 5 свидетельств о регистрации программы для ЭВМ.

### **Замечания и вопросы к работе**

1. В автореферате, на рисунке 2 приведены технологические схемы получения КРФ аэрогелей. Так как в автореферате, нет ни какого описания этих схем, а в тексте диссертации они вообще отсутствуют становится не понятно для чего они приведены. Являются эти схемы известными или они разработаны соискателем?
2. В заключении по работе в п.1 говорится, что разработан процесс получения кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей, а в п.4, что разработаны лабораторные методики по получению тоже аэрогеля. В чем принципиальная разница в этих результатах?
3. Сравнение результатов расчета для модели кластер-кластерной агрегации (DLCA) с экспериментальными данными по распределения пор по размерам показывает хорошее согласование. Однако из описания модели не понятны физические предпосылки, приводящее к таким результатам. Скорее всего, дело в начальном размере (диаметре) кластера с которого начинается моделирование. Тогда это параметр, определение которого необходимо обсудить. Так же непонятно как устанавливалась скорость нового(укрупненного) кластера после столкновения двух кластеров скорости которых могли быть разными как по направлению так и по величине.
4. Представляется не очень корректной процедура расчета эффективной теплопроводности аэрогеля, путем простого сложения теплопроводностей материалов. Для получения этой величины нужно было рассмотреть поток тепла теплопроводностью через многослойный материал с учетом средней толщины каждого слоя. Так же не корректным является выражение 5.3 для термического сопротивления клетки. Термическое сопротивление должно быть прямо пропорциональным толщине (размеру) клетки, а не обратно пропорционально как это следует из 5.3.

Вместе с тем, указанные замечания не влияют на общую положительную оценку работы.

### **Заключение**

Диссертационная работа Лебедева И.В. "Моделирование структуры, свойств и процессов получения кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных

аэрогелей" соответствует паспорту специальности научных работников 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий по своей теме, содержанию и методам исследования. 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» и «Исследование массообменных процессов и аппаратов». Соответствует паспорту специальности научных работников 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» и «Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования».

Результаты и выводы диссертации могут использоваться в научных исследованиях свойств nano материалов, а так же во многих областях промышленности (химической, нефтехимической, фармацевтической, пищевой) и теплоэнергетике.

Диссертационная работа Лебедева И.В. соответствует требованиям п.9 "Положения о порядке присуждения ученых степеней", утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013г., предъявляемым к кандидатским диссертациям. Ее автор, Лебедев Игорь Витальевич, заслуживает присуждения ему 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.

Отзыв заслушан и утвержден на заседании кафедры "Процессы и аппараты химической технологии" казанского национального исследовательского технологического университета (протокол № 2 от 4 декабря 2018г.).

Профессор кафедры "Процессы и аппараты химической технологии" ФГБОУ ВО "Казанский национальный исследовательский технологический университет",  
д.т.н., доцент

Мухаметзянова Асия Габдулмазитовна

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Казанский национальный исследовательский технологический университет".

Адрес: 420015, Российская Федерация, Республика Татарстан, Казань, ул.К.Маркса, 68  
Тел. 8(843) 231-42-16

Адрес электронной почты: [office@kstu.ru](mailto:office@kstu.ru)

Интернет адрес: [www.kstu.ru](http://www.kstu.ru)



оверяется.

ФГБОУ ВО «КНИТУ»

О.А. Перельгина

«10» 12

2018