

ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора технических наук Барбина Николая Михайловича на диссертацию Кабирова Вадима Рафаиловича на тему: «Физико-химические особенности получения поверхностно-модифицированных металлов с минимальным углеродным следом», представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

1. Актуальность темы

Модифицирование поверхности металлов различными химическими соединениями позволяет повысить долговечность и функциональность металлургической продукции. В традиционном исполнении модифицирование металла представляет собой, как правило, самостоятельную отдельную стадию, а зачастую и отдельное производство. Главный недостаток этого подхода состоит в том, что при этом трудно избежать окисления поверхности металла и получить высокие свойства модифицированного металлического продукта. Кабиров В.Р. развивает в своей работе инновационный подход, предложенный в Горном университете Санкт-Петербурга, - совмещать в одном процессе восстановление металла и его модифицирование. Конкретная реализация этого принципа достигается посредством запатентованного твердотельного гидридного синтеза (ТГС) металлов, разработанного научным руководителем соискателя, профессором А.Г. Сырковым. Автор диссертации, используя идеологию ТГС, подбирает комбинацию гидридных восстановителей, которая позволяет не только улучшить свойства получаемого металлического продукта, но и добиться при восстановлении металла из оксидного сырья минимизации парникового эффекта (эмиссии CO₂). Выраженный физико-химический аспект работы связан с тем, что для детализации механизма восстановления и модифицирования металла и механизма формирования улучшенных свойств (гидрофобности и антифрикционного эффекта) эффективно используются методы квантово-химического моделирования. Таким образом, актуальность тематики работы связана с физико-химическим обоснованием нового металлургического процесса получения востребованных на практике дисперсных материалов, который характеризуется минимальным углеродным следом. Своевременность такого исследования дополнительно подтверждается поддержкой государственно значимыми научно-техническими программами.

2. Научная новизна

- Уточнены представления о физико-химическом механизме эффекта комбинированного воздействия газовой смеси гидридных восстановителей (этилгидридсилоксана и водорода) при осуществлении ТГС металлов (Ni, Fe, Cu).

ОТЗЫВ

ВХ. № 9- 4 ОТ 27.01.25
АУ УС

Выявлено, что предложенный режим восстановления приводит к ускорению полного восстановления оксидного сырья до металла и к снижению эмиссии диоксида углерода до 0,03-0,05 кг CO₂/кг металла.

- С применением программных комплексов HyperChem и Gaussian оценены характеристики электронного строения используемых в синтезе молекул восстановителей-модификаторов металла и величина энергии адсорбции органогидридсилоксанов и аммониевых соединений на металлической поверхности.

- Установлено, что наибольшие антифрикционный эффект и гидрофобность металлического продукта ТГС достигаются с увеличением энергии взаимодействия в системе металл-хемосорбированный восстановитель; при модифицировании готовых промышленных порошков меди этому способствует присутствие в поверхностном слое одновременно электрофильных и нуклеофильных молекул модификаторов.

Отметим, что объяснение механизма снижения парникового эффекта в автореферате и, особенно, в итоговой статье в Non-Ferrous Metals сделано несколько более понятным языком.

3. Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов и рекомендаций

Определяются экспериментальными данными, полученными с применением современных инструментальных методов на сертифицированном оборудовании; корректными квантово-химическими расчетами с использованием функционала V3LYP, успешными промышленными испытаниями при внедрении результатов, а также широкой апробацией материалов диссертации на международных конференциях.

4. Научные результаты, их ценность

- Разработаны научно-технологические основы получения поверхностно-модифицированных дисперсных металлических продуктов из оксидного сырья с минимальной эмиссией диоксида углерода (на уровне погрешности определения).

- Доказаны целесообразность использования на первой стадии восстановления в условиях ТГС этилгидридсилоксана с добавкой водорода (не более 2,5 об.% H₂) и ключевое влияние термостабильности связи Si-C в этилгидридсилоксане на предотвращение выделения CO₂ в ходе процесса.

- С применением квантово-химических расчетов дополнительно подтверждено позитивное влияние усиления энергии взаимодействия металла с хемосорбированным восстановителем и электрофильно-нуклеофильных характеристик молекул модификаторов на антифрикционные и гидрофобные свойства получаемых металлических продуктов.

Результаты диссертации Кабирова В.Р. в достаточной степени освещены в 23 печатных работах, в том числе 2 статьях – в изданиях из перечня рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук (Перечня ВАК), и 2 статьях – в изданиях, входящих в международные базы данных и системы цитирования (Scopus, Web of Science). Получено 1 свидетельство на программу для ЭВМ.

5. Теоретическая и практическая значимость результатов диссертации

Результаты исследования Кабирова В.Р. представляют собой современные оригинальные данные, которыми можно дополнять теоретический материал в лекционных и практических курсах по физической химии, квантово-химическому моделированию гетерогенных процессов, нанотехнологии, металлургии, материаловедению. Новые сведения и предложенные рекомендации делают возможным применение кремнийорганических восстановителей со связью Si-H в структуре молекулы для решения экологических проблем предприятий минерально-сырьевого комплекса при восстановлении оксидного сырья углеродсодержащими реагентами. Это, наряду с успешным применением методов квантово-химического моделирования, соискатель убедительно продемонстрировал при внедрении с экономическим эффектом результатов работы в ООО «Джи Эм Си». Также по итогам работы Роспатентом выдано свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ по моделированию твердотельного гидридного синтеза.

Установленные в диссертации Кабирова В.Р. ряды изменения антифрикционных и гидрофобных свойств дисперсных металлических продуктов в зависимости от программы синтеза, а также закономерности твердотельного синтеза металлов вносят весомый вклад в развитие физической химии поверхностных явлений на металлах, включая процессы получения последних.

6. Рекомендации по использованию результатов диссертации

Результаты работы могут быть рекомендованы для ознакомления организациям, которые решают экологические проблемы перерабатывающих производств, а также занимаются разработкой, получением и внедрением дисперсных металлических материалов и композитов, поверхностно-наноструктурированных металлов, гидрофобных покрытий и селективных сорбентов. Результаты диссертации могут быть использованы в ЗАО «Металл-Полимер», ПАО «Лукойл», НИЦ «Курчатовский институт – ЦНИИ КМ «Прометей», ПАО «Норильский никель», ПАО «НЛМК», ООО «ГСК – Шахтпроект», ООО «Джи Эм Си», в СПбГТИ (ТУ), СПбПУ, СПбГЭТУ «ЛЭТИ», СПбГУ, ВГУ, ВГТУ, ЮЗГУ,

БГТУ, УрГАУ, УрИ ГПС МЧС РФ, ИОНХ РАН, ФТИ РАН, ИМЕТ УрО РАН, ИММС НАН РБ.

7. Замечания и вопросы по работе

В целом, диссертацию можно охарактеризовать как работу, выполненную на достаточно высоком научном уровне, при прочтении которой появились некоторые замечания.

1. В названии работы и в основном тексте речь идет о «поверхностно-модифицированных металлах», а в названии свидетельства о регистрации программы для ЭВМ фигурирует несколько иная терминология – «поверхностные соединения металлов». Если речь идет об одних и тех же веществах, то зачем их по-разному называть; каковы в этом смысл и логика?

2. Схемы реакций молекулярного наслаивания, приведенные в общем виде на рис. 1.8 (стр. 30), и комментарии к ним в тексте под рисунком недостаточно информативны. Было бы много наглядней и понятней, если бы автор рассмотрел, например, реакции ОН-групп подложки с $TiCl_4$ с последующим гидролизом Ti-Cl-групп на поверхности для наращивания титанооксидного слоя. Вместо этого приведены поверхностные реакции прекурсоров типа AC_4 , AB_4 , NB_4 и NC_4 с нерасшифрованными названиями.

3. В последнем абзаце на стр. 40 текст сформирован таким образом, что из него вытекает будто барботер является частью корпуса реактора, который изображен на рис. 2.3. На самом деле, это не так.

4. На стр. 92, в середине 2-ого абзаца, присутствует фраза, которая начинается со слов «Принимая во внимание...», которая в точности повторяет фразу на стр. 91 и снова содержит странный термин «сродных», не поясняя его физико-химического смысла. По-видимому, речь идет о структурно-подобных разных аммониевых соединениях, имеющих аналогичное строение молекул? Именно такую терминологию, более удачную и точную, на наш взгляд, используют в работах научной группы соискателя и сам соискатель в своей статье в журнале «Конденсированные среды и межфазные границы» (№2 за 2021 г.)

Сделанные замечания и обнаруженные неточности в тексте не влияют сколько-нибудь принципиальным образом на достоверность результатов, выводов, научных положений и рекомендаций диссертации Кабирова В.Р.

Работа заслуживает положительной оценки. Автореферат и публикации соискателя в полной мере отражают содержание диссертации.

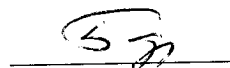
8. Заключение по диссертации

Диссертация «Физико-химические особенности получения поверхностно-модифицированных металлов с минимальным углеродным следом», представленная

на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.4.4. - Физическая химия полностью отвечает требованиям раздела 2 «Положения о присуждении ученых степеней» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский горный университет императрицы Екатерины II», утвержденного приказом ректора Санкт-Петербургского горного университета Екатерины II от 20.05.2021 № 953 адм, а ее автор Кабиров Вадим Рафаилович заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Официальный оппонент, доктор технических наук, ведущий научный сотрудник учебно-научного комплекса техносферной безопасности, пожаротушения и аварийно-спасательных работ федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уральский институт Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий», доцент

Барбин
Николай
Михайлович



Подпись заверяю



10.01.2021

620062, Свердловская область, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 22, ФГБОУ ВО «Уральский институт Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий»

Официальный сайт организации: <https://uigps.ru>
Телефон: +7 (343) 374-07-06
E-mail: nmbarbin@yandex.ru