

ОТЗЫВ

официального оппонента, кандидата химических наук Жилиной Екатерины Михайловны 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

I. Актуальность темы

В центре внимания работы Кабирова В.Р. находится изучение прямого восстановления из твердофазового сырья металлов методом твердотельного гидридного синтеза с целью минимизации выделения диоксида углерода. Актуальность диссертационного исследования обусловлена, прежде всего, тем, что найдено техническое решение для борьбы с парниковым эффектом при восстановлении металлов из оксидного сырья, основываясь на физико-химическом анализе протекающих процессов с применением методов квантово-химического моделирования. Другой аспект диссертации, делающий ее востребованной и своевременной, состоит в том, что используемые автором методики синтеза позволяют получать поверхностно-модифицированные металлы с полезными свойствами. Поэтому получаемые дисперсные вещества – перспективные материалы в качестве антифрикционных, влагостойких и противокоррозионных добавок для различных смазок, компаундов и покрытий. Актуальность тематики диссертации дополнительно подтверждена выполнением работы в рамках госзадания Минобрнауки РФ, при поддержке грантом Фонда содействия инновациям и частично по договору с компанией GMS (Москва).

II. Научная новизна диссертации

– Научно обосновано и подтверждено опытным путем технологическое решение, обеспечивающее получение дисперсного металлического продукта ($M=Cu, Fe, Ni$) при восстановлении из оксидов с минимальным углеродным следом на уровне 0,03–0,05 кг CO_2 /кг металла.

– Физико-химический механизм подавления эмиссии диоксида углерода связан с термостабильностью связи Si–C в используемом восстановителе этилгидридсилоксане (с добавкой H_2) при осуществлении процесса в условиях твердотельного гидридного синтеза металлов.

– С применением квантово-химического моделирования в программных комплексах HyperChem и Gaussian впервые уточнен механизм процессов.

ОТЗЫВ

ВХ. № 0-5 от 27.01.25
АУ УС

протекающих при формировании гидрофобного слоя на реальной поверхности металла.

– Установлены ряды изменения антифрикционных и водоотталкивающих свойств металлических продуктов в зависимости от строения поверхностного слоя и программы синтеза.

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

Обеспечена аргументированными теоретическими предпосылками и опытными данными, полученными с применением современных физико-химических методов на поверенных приборах и установках; использованием корректных методик квантово-химического моделирования в рамках теории функционала плотности, а также результатами при внедрении выводов работы на практике и широкой апробацией материала на международных конференциях и симпозиумах.

IV. Научные результаты, их ценность.

В диссертации осуществлен твердотельный гидридный синтез поверхностно-модифицированных металлов (Cu, Fe, Ni). Проанализированы фазовый состав твердых продуктов синтеза и механизм выделения CO_2 при восстановлении оксидного сырья. Реализовано техническое решение для снижения эмиссии CO_2 , которое заключается в последовательном восстановлении исходного сырья в парах этилгидридсилоксана с добавкой молекулярного водорода (не более 2.5 об.%) с завершающей термообработкой в токе метана при повышении температуры от 340 до 600 °С. Установлено снижение эмиссии диоксида углерода в разы по сравнению с получением поверхностно-модифицированных металлов по патенту №2570599 (ближайшего аналога). Снижение эмиссии CO_2 (углеродного следа) по сравнению с традиционными металлургическими процессами происходит более, чем на порядок.

Изучены свойства промышленных порошков металлов, включая порошки меди ПМ-1 и ПМС-1, поверхностно-модифицированных путем хемосорбции аммониевых соединений и этилгидридсилоксана. Получены ряды усиления антифрикционных и гидрофобных свойств образцов в зависимости от строения поверхностного слоя металла, которые сопоставлены с аналогичными свойствами дисперсных металлических продуктов твердотельного гидридного синтеза. Установлено, что последние обладают более высокими свойствами, что связано с механизмом их синтеза, предотвращающим окисление металла.

Проведено квантово-химическое моделирование ряда молекул восстановителей-модификаторов и хемосорбционного взаимодействия в системе

металл–модификатор. Сделанные расчеты позволили уточнить представление о механизме формирования металлических продуктов и улучшения их свойств.

Результаты диссертации Кабирова В.Р. опубликованы 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.

V. Теоретическая и практическая значимость результатов диссертации

Методами квантово-химического моделирования дополнены справочные данные об энергии низшей вакантной молекулярной орбитали (НВМО) для 7 гидридных восстановителей и 3 аммониевых соединений, используемых для модифицирования металлических порошков. Уточнены дипольные моменты используемых молекул восстановителей-модификаторов. Оценены энергии адсорбционного взаимодействия 18-атомных кластеров меди и железа с этилгидридсилоксаном и аммониевыми соединениями в составе отечественных поверхностно-активных препаратов (алкамона и триамона). Полученные соискателем ряды усиления электрофильно-нуклеофильных свойств, определенных, исходя из значений энергии НВМО, позволяют детализировать физико-химический механизм регулирования антифрикционных и гидрофобных свойств и прогнозировать режимы получения металлических продуктов с улучшенными характеристиками.

Практическая значимость результатов диссертации дополнительно подтверждается внедрением в ООО «Джи Эм Си» (Москва) с ожидаемым экономическим эффектом 8 млн. руб./год (Акт о внедрении №8/09 от 29.09.2023), а также получением свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ по моделированию твердотельного гидридного синтеза металлов.

VI. Рекомендации по использованию результатов диссертации

Результаты диссертации Кабирова В.Р. могут быть использованы в СПбГУ, СПбГТИ (ТУ), ВГУ, ВГТУ, СПбПУ, в СПбГЭТУ, ИжГТУ, РГПУ им. А.И. Герцена, УрГАУ, БГТУ, ИПМ УрО РАН, в ИХФ РАН, ИПХФ РАН, ФТИ РАН, ИОНХ РАН, ИМЕТ УрО РАН, НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей», ПАО «Норникель», ПАО «НЛМК», СКТБ «Технолог», ЗАО «Металл-Полимер», в компании «Лукойл», РУП ПО «Беларуськалий», ООО «МК Констракши», ОАО «Белгорхимпром», ЗАО «Солигорский институт проблем ресурсосбережения с опытом производством», в ООО «Джи Эм Си», ООО «ГСК-Шахтпроект», ООО

«К-Поташ Сервис», а также рекомендованы иным организациям, которые занимаются экологическими проблемами, разработкой, производством и внедрением коррозионно-стойких металлических, наноструктурированных материалов, композитных и полимерных материалов различного назначения, гидрофобных покрытий и материалов с улучшенными характеристиками.

VII. Замечания и вопросы по работе

1. В диссертации приводится довольно много результатов квантово-химических расчетов, позволяющих более детально представлять механизм процессов на поверхности металла. Это положительный момент, показывающий, что работа выполнялась в области исследований, характерных для научной дисциплины «Физическая химия». Но возникает вопрос: почему так мало внимания уделяется термодинамике (в основном в лигобзоре) и кинетике процессов?

2. На стр. 9 не указано за какой период времени или при производстве какого количества продукции экономический эффект от внедрения составляет 8 млн. руб.?

3. На стр. 16 к продуктам парциального окисления углерода отнесен молекулярный водород.

4. На стр. 59 в табл. 3.1 результаты соискателя сравниваются с данными патента, который в таблице ошибочно значится под ссылкой номер 35 (это теоретическая работа Нечаева), а не под номером 42, соответствующего в списке литературы этому патенту.

Приведенные замечания и вопросы не носят принципиального характера и не затрагивают сколько-нибудь серьезным образом надежность и достоверность основных выводов, научных положений и рекомендаций работы. Диссертация представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, в которой содержится ряд новых результатов, дополняющих и развивающих представления в области физической химии дисперсных металлических материалов и межфазных взаимодействий. Объекты и методология исследования соответствуют специальности «Физическая химия». Публикации и автореферат Кабирова В.Р. в достаточной степени отражают содержание диссертации.

VIII. 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, старший научный сотрудник лаборатории редких тугоплавких металлов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института металлургии имени академика Н.А. Ватоллина Уральского отделения Российской академии наук», кандидат химических наук (специальность 02.00.04 – физическая химия)

Жилина
Екатерина
Михайловна

10.01.25г.

620016, Свердловская область, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д.101, ФГБУН «Институт металлургии имени академика Н.А. Ватоллина Уральского отделения Российской академии наук»

Официальный сайт организации: <http://www.imet-uran.ru>

Телефон: +7(343) 232-91-22

E-mail: ezhilina@bk.ru

*Подпись старшего научного сотрудника к.х.н Жилиной В.М.
удостоверено*

