

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата технических наук Кабирова Вадима Рафаиловича «Физико-химические особенности получения поверхностно-модифицированных металлов с минимальным углеродным следом», представленной к защите по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Диссертационная работа Кабирова Вадима Рафаиловича посвящена структурно-кинетическим исследованиям твердотельных процессов получения металлов, включая твердотельный гидридный синтез (ТГС), разработке экспериментальных подходов и технических решений для снижения эмиссии диоксида углерода в процессе восстановления металла из оксидного сырья, а также детализации физико-химического механизма восстановления и модифицирования металла с применением квантово-химического моделирования для улучшения антифрикционных свойств металлических продуктов.

Необходимость такого подхода связана с тем, что названные методы синтеза дисперсных металлов представляют собой весьма сложные процессы, исследование которых далеко не всегда поддается инструментальному анализу, требует углубленного изучения на микро- и наноуровне, в том числе путем квантово-химического моделирования. Кроме того, в последние годы особое внимание исследователей сосредоточено на детализации механизма формирования поверхностно-модифицированных металлов, содержащих хемосорбированные соединения.

Поэтому, **актуальность** структурно-кинетических исследований твердотельных процессов получения металлов, а также разработка экспериментальных подходов и технических решений для снижения эмиссии диоксида углерода в процессе восстановления металла из оксидного сырья не вызывает сомнений, а использование квантово-химического моделирования для выявления и прогнозирования сложных физико-химических закономерностей синтеза является весьма уместным.

Научная новизна работы определяется результатами проведенных исследований, из которых наиболее важными являются:

1. Детализация физико-химических представлений о механизме эффекта комбинированного воздействия смеси гидридных восстановителей – органогидридсилоксана и водорода (не более 2,5 об. %) в условиях твердотельного гидридного синтеза, приводящего к снижению времени,

ОТЗЫВ 1

ВХ. № 0-14 от 03.02.21

необходимого для достижения высокой степени восстановления оксидов до металла (не менее 99%) и формирования поверхностных Si-C-структур; при одновременном наблюдении существенного снижения эмиссии парниковых газов до уровня 0,03-0,05 кг CO₂ / кг металла.

2. Проведение квантово-химического моделирования строения молекул-реагентов восстановителей металлов, включая этилгидридсилоксан (ЭГС), применяющихся в ТГС, а также молекул аммониевых поверхностно-активных веществ (ПАВ) и ЭГС и их гетероатомного взаимодействия с модельной поверхностью порошков металлов в программных комплексах HyperChem и Gaussian. Определение физико-химических характеристик адсорбции молекул модификаторов на поверхности, представляющей 18-атомный кластер металла M (111). Получение рядов усиления смещения электронной плотности для образца Cu/ЭГС, а также для образцов Cu/A и Cu/T, где электродонорными молекулами выступают A – алкамон, T – триамон.

3. Достижение наибольшего антифрикционного эффекта и водоотталкивающих свойств в присутствии модификаторов различной нуклеофильно-электрофильной природы при наличии сильного гетероатомного взаимодействия с металлом.

Основные положения и результаты достаточно широко апробированы на международной конференции «Фундаментальные и прикладные научные исследования: актуальные вопросы, достижения и инновации» (г. Пермь, 2024 г.), Международной конференции «Прогрессивные научные исследования – основа современной инновационной доктрины» (г. Екатеринбург, 2024 г.), Международном форуме-конкурсе молодых ученых «Проблемы недропользования» (г. Санкт-Петербург, 2015-2017, 2019 гг.), Международном симпозиуме «Нанозифика и Наноматериалы» (г. Санкт-Петербург, 2018, 2020, 2021 гг.).

Степень обоснованности научных положений выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, хорошо отработана и не вызывает сомнений.

Работа выполнена на достаточно высоком теоретическом и экспериментальном уровне, характеризуется научной новизной и **практической значимостью**, которая подтверждена научными публикациями и **апробирована** на конференциях.

Диссертация «Физико-химические особенности получения поверхностно-модифицированных металлов с минимальным углеродным следом», представленная на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия, соответствует требованиям раздела 2 «Положения о присуждении учёных степеней» федерального

