



«УТВЕРЖДАЮ»

И.о. ректора РХТУ им. Д. И. Менделеева,
д.х.н., проф. Е. В. Румянцев

» апреля 20 25 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертация на тему: «Синтез углеродных нанотрубок: исследование, моделирование, оптимизация, масштабирование, применение» по научной специальности 2.6.13 – Процессы и аппараты химических технологий (технические науки) выполнена на кафедре информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева».

В процессе подготовки диссертации Скичко Евгения Абдулмуталиповна, «16» декабря 1986 года рождения, была аспирантом кафедры информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева» с 01.11.2009 г. по 01.11.2012 г. Работает в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева» с 2009 года, в настоящее время – на должности старшего преподавателя кафедры информационных компьютерных технологий.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева» в 2025 году.

Научный руководитель – доктор технических наук по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий, профессор, заведующий кафедрой информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева» Кольцова Элеонора Моисеевна.

По результатам рассмотрения диссертации на тему: «Синтез углеродных нанотрубок: исследование, моделирование, оптимизация, масштабирование, применение» принято следующее заключение.

Актуальность темы диссертационной работы обусловлена тем, что углеродные нанотрубки (УНТ) активно используются при создании новых керамоматричных композитов для авиационной, оборонной и космической промышленности, а также в области водородной энергетики. Одной из перспективных областей применения является использование УНТ в качестве армирующей добавки при изготовлении композиционных материалов

(композитов). Благодаря своим выдающимся механическим свойствам (упругость, прочность на растяжение) УНТ могут повысить показатель прочности на изгиб и трещиностойкости керамики. Еще одной перспективной областью применения является изготовление платиновых катодных катализаторов водородовоздушных топливных элементов с использованием УНТ в качестве носителя. На сегодняшний день платиновые катализаторы на углеродном носителе – саже являются единственной коммерциализуемой каталитической системой, но сажа сильно подвержена коррозии, что сокращает срок использования катализатора. По этой причине УНТ рассматриваются как альтернатива сажам. Эти и многие другие области использования обуславливают запрос на масштабное промышленное производство УНТ. Диссертационная работа Скичко Евгении Абдулмуталиповны посвящена процессам получения УНТ каталитическим пиролизом метана и метановодородных газовых смесей, а также математическому моделированию и оптимизации режима работы полупромышленного шнекового реактора непрерывного действия, являющегося одним из основных блоков технологической схемы масштабного производства УНТ.

Научная новизна заключается в следующем: выявлены зависимости скорости роста, выхода УНТ, времени дезактивации катализатора в процессе каталитического пиролиза от концентрации водорода в исходной метановодородной смеси и температуры процесса.

Разработан механизм роста УНТ, учитывающий выявленное влияние концентрации водорода в исходной газовой смеси. С учетом данного механизма проведено математическое моделирование кинетических закономерностей синтеза УНТ каталитическим пиролизом.

Разработана математическая модель полупромышленного шнекового реактора непрерывного действия, проведена оптимизация режима его работы.

Разработана модель технологической схемы каталитического пиролиза метановодородных смесей с получением УНТ и водорода, включающая блок пиролиза, блок выделения продукционного водорода, блок утилизации тепла пиролиза.

Теоретическая и практическая значимость работы состоит в следующем: на основании экспериментальных исследований подобрано соотношение металлов активной фазы катализатора $\text{Fe}:\text{Co} = 3:1$ для обеспечения наибольшего выхода УНТ. Получены результаты, подтверждающие влияние концентрации водорода в исходной газовой смеси на скорость роста, выход УНТ, время дезактивации катализатора. На основе разработанной математической модели пиролиза определен оптимальный режим работы шнекового реактора непрерывного действия, обеспечивающий производительность по УНТ 106,1 г/ч при пиролизе метановодородной смеси состава: 70% об. CH_4 , 30% об. H_2 , температуре пиролиза 770°C и расходе катализатора 140 мг/мин. Разработан программный комплекс расчета математических моделей на языке программирования Java.

Диссертационная работа выполнялась в соответствии с заданием Министерства образования и науки РФ в рамках ФЦП «Исследования и

разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 гг.» ГК № 16.513.11.3039, ГК № 02.513.12.3090.

Работа характеризуется логичностью построения, аргументированностью основных научных положений и выводов, а также четкостью изложения.

Основные положения диссертации получили полное отражение в 4 статьях в журналах, индексируемых в международных базах данных Web of Science, Scopus, Chemical Abstracts. Получено 1 свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ, 1 свидетельство о государственной регистрации базы данных.

Результаты диссертации представлены на международных и всероссийских конференциях, в том числе на: XIX Международном конгрессе химико-технологических процессов CHISA (Чехия, г. Прага, 2010 г.); VIII Европейской конференции в химической технологии «ЕССЕ» (Германия, г. Берлин, 2011 г.); Международной конференции со школой и мастер-классами для молодых ученых «Химическая технология функциональных наноматериалов» (г. Москва, 2017 г.); Международной научно-междисциплинарной конференции GeoConference SGEM (Болгария, г. Албена, 2020 г.); XIII, XVII Международных конгрессах молодых ученых по химии и химической технологии МКХТ (г. Москва, 2022 и 2024 гг.); IX Международной научно-практической конференции (школе-семинаре) молодых ученых «Прикладная математика и информатика: современные исследования в области естественных и технических наук» (г. Тольятти, 2023 г.); Международной научной мультikonференции ММТТ-37 (г. Минск, 2024 г.).

Публикации в изданиях, индексируемых в международных базах данных:

1. Skichko E.A. Physico-chemical properties of carbon nanotubes as supports for cathode catalysts of fuel cells. Surface structure and corrosion resistance / V.A. Bogdanovskaya, G.V. Zhutaeva, M.V. Radina, L.P. Kazanskii, M.R. Tarasevich, E.M. Koltsova, **E.A. Skichko** [et al.] // Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces. – 2016. – Vol. 52, No. 1. – P. 45-54. – DOI 10.1134/S2070205116010068. (**Scopus, Web of Science**)

2. Скичко Е.А. Разработка программного комплекса для моделирования кинетики синтеза и структуры углеродных нанотрубок, нановолокон / **Е.А. Скичко**, К.В. Кручинин, Э.Г. Раков, Э.М. Кольцова // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. – 2012. – Т. 55, № 2. – С. 93-97. (**Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts**)

3. Skichko E.A. Mathematical modelling of the process of spark plasma sintering of a ceramic material composite Al₂O₃ - ZrO₂ - Y₂O₃, modified by carbon nanotubes / N.V. Mamonova, E.M. Koltsova, **E.A. Skichko** [et al.] // Chemical Engineering Transactions. – 2018. – Vol. 70. – P. 1759-1764. – DOI 10.3303/CET1870294. (**Scopus**)

4. Скичко Е.А. Углеродные нанотрубки - перспективные носители для синтеза катодных катализаторов PtCoCr / В.А. Богдановская, М.В. Радина, О.В. Лозовая, М.Р. Тарасевич, А.В. Кузов, Э.М. Кольцова, Е.А. Скичко // Международный научный журнал Альтернативная энергетика и экология. – 2012. – № 2(106). – С. 91-106. (**Chemical Abstracts**)

Публикации в прочих изданиях:

1. Скичко Е.А. Экспериментальное исследование кинетических закономерностей синтеза углеродных нанотрубок каталитическим пиролизом газовых смесей переменного состава / Е.А. Скичко, Д.А. Ломакин, Ю.В. Гаврилов, Э.М. Кольцова // *Фундаментальные исследования*. – 2012. – № 3-2. – С. 414-418. **(РИНЦ)**
2. Абубакарова Е.А. Разработка новой технологии получения углеродных нанотрубок и чистого водорода путем каталитического пиролиза углеводородного сырья в реакторе непрерывного действия / Э.М. Кольцова, Ю.В. Гаврилов, Н.Г. Дигуров, В.В. Скудин, Ю.П. Байчток, Е.А. Абубакарова [и др.] // *Современные наукоемкие технологии*. – 2010. – № 7. – С. 141-146. **(РИНЦ)**.
3. Скичко Е.А. Моделирование и оптимизация шнекового реактора синтеза углеродных нанотрубок / Е.А. Скичко, Е.А. Миронова, Э.М. Кольцова // *Математические методы в технологиях и технике*. – 2024. – № 12-2. – С. 17-21. **(РИНЦ)**
4. Skitchko E.A. Carbon nanotubes for reinforcement ceramic - matrix nanocomposites: synthesis, modeling, optimization / E.M. Koltsova, Е.А. Skitchko, Е.А. Poriyeva, A.V. Zhensa // *International Journal of Applied and Fundamental Research*. – 2014. – No. 2. – P. 36.
5. Скичко Е.А. Математическое моделирование кинетических закономерностей синтеза углеродных нанотрубок каталитическим пиролизом углеводородных смесей переменного состава / Э.М. Кольцова, Е.А. Скичко, Е.А. Порысева, А.В. Женса // *Евразийский союз ученых*. – 2014. – № 6-3. – С. 55-57. **(РИНЦ)**

Публичные доклады на всероссийских и международных научных мероприятиях:

1. Skichko E. Synthesis of carbon nanotubes by chemical vapor deposition of CH₄/H₂ mixtures: experimental study and Computer modeling / E. Skichko, E. Koltsova, A. Shaneva // 20th International Multidisciplinary Scientific GeoConference SGEM 2020, Albena, Bulgaria, 18–24 August 2020. – Vol. 6.1. – P. 133-140. – DOI 10.5593/sgem2020/6.1/s24.018.
2. Наунг Т.С. Математическое моделирование синтеза углеродных нанотрубок в горизонтальном трубчатом реакторе непрерывного действия / Т.С. Наунг, Е.А. Скичко // *Прикладная математика и информатика: современные исследования в области естественных и технических наук: Сборник материалов IX Международной научно-практической конференции (школы-семинара) молодых ученых, Тольятти, 18–20 апреля 2023 года*. – Тольятти: Тольяттинский государственный университет, 2023. – С. 165-169.
3. Скичко Е.А. Моделирование кинетики синтеза углеродных нанотрубок каталитическим пиролизом метановодородных газовых смесей переменного состава / Е.А. Скичко, Э.М. Кольцова // *Химическая технология функциональных наноматериалов: Сборник материалов международной конференции со школой и мастер-классами для молодых ученых, Москва, 30 ноября – 01 декабря 2017 года* / под ред. Е. В. Юртова. – Москва: Издательский центр РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2017. – С. 248-250.

4. Skichko E.A. Simulation of carbon nanotube, nanofiber synthesis in methane catalytic decomposition process / **E.A. Skichko**, E.M. Koltsova // 8th ECCE together with ProcessNet-Annual Meeting and 1st ECAB together with 29th DECHEMA Biotechnology Annual Meeting, 2011, Berlin, Germany. (http://www.ecce2011.de/ECCE/Congress+Planner/Datei_Handler-tagung-535-file-2550-p-108.html; дата обращения: 03.03.2025) (устный доклад).

5. Cellular automata for simulation of carbon nanotubes', nanofibers' growth and formation in methane decomposition catalytic process / E.M. Koltsova, **E.A. Skichko**, A.V. Zhensa [et al.] // Proc. Internat. Congress "CHISA 2010, 19th International Congress of Chemical and Process Engineering". CZ, 2010. - V.3. - P. 1163. 7th European Congress of Chemical Engineering 7. 19th International Congress of Chemical and Process Engineering CHISA 2010, 28 August – 1 September 2010, Prague, Czech Republic. Summaries 3. Hydrodynamic process and system engineering. – Pp. 1162-1163.

6. Скичко Е.А. Математическое моделирование шнекового реактора синтеза углеродных нанотрубок / Е.А. Скичко, Е.А. Миронова, Э.М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии. – 2024. – Т. 38, № 9(288). – С. 83-85.

7. Скичко Е.А. Математическое моделирование синтеза углеродных нанотрубок каталитическим пиролизом метановодородных газовых смесей / Е.А. Скичко, Э.М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии. – 2022. – Т. 36, № 11(260). – С. 106-107.

8. Скичко Е.А. Экспериментальное исследование синтеза углеродных нанотрубок на железо-кобальт-алюминиевых катализаторах / Е.А. Скичко, Д.А. Ломакин, Ю.В. Гаврилов, Э.М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии. – 2011. – Т. 25, № 1(117). – С. 76-80.

Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ:

Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010613353 Российская Федерация. Программное обеспечение для моделирования роста и образования углеродных нанотрубок, нановолокон в термохимических процессах («КА_Nano») : № 2010611749 : заявл. 06.04.2010 : опубл. 21.05.2010 / Э.М. Кольцова, **Е.А. Абубакарова** ; заявитель Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» (РХТУ им. Д.И. Менделеева).

Свидетельство о государственной регистрации базы данных:

Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2010620487 Российская Федерация. База данных в области углеродных нанотрубок и композитов на их основе («I.S. Nanotube») : № 2010620355 : заявл. 08.07.2010 : опубл. 07.09.2010 / Ф.В. Бацелев, А.С. Егоркин, А.В. Женса, Э.М. Кольцова, Е.А. Порысева, Чан Хыу Кве, **Е.А. Абубакарова** ; заявитель Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» (РХТУ им. Д.И. Менделеева).

По тематике, методам исследования, предложенным новым научным положениям диссертация соответствует паспорту специальности научных работников 2.6.13. Процессы и аппараты химических технологий в части:

п. 1. Фундаментальные исследования явлений переноса энергии, массы и импульса в химико-технологических процессах и аппаратах;

п. 2. Способы, приемы, методология исследования гидродинамики движения жидкости, газов, перемещение сыпучих материалов в технологических аппаратах и схемах;

п. 4. Способы, приемы, методология исследования химических, тепловых, массообменных и совмещенных процессов, совершенствование их аппаратного оформления;

п. 13. Развитие теории и практики создания процессов, аппаратов, технологий, обеспечивающих создание автоматизированных цифровых производств.

Автореферат отражает основное содержание диссертации.

Диссертация Скичко Евгении Абдулмуталиповны является завершенной научно-квалификационной работой, содержащей результаты, полученные на основании исследований, проведенных на высоком научном и техническом уровне с применением современных методов исследования. Научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные автором, теоретически обоснованы и не вызывают сомнений. Представленные в работе результаты принадлежат Скичко Евгении Абдулмуталиповне; они оригинальны, достоверны и отличаются научной новизной и практической значимостью.

С учетом научной зрелости автора, актуальности, научной новизны и практической значимости работы, а также ее соответствия требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева», предъявляемым к подобным работам, диссертация на тему: «Синтез углеродных нанотрубок: исследование, моделирование, оптимизация, масштабирование, применение» рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата технических наук по научной специальности 2.6.13 – Процессы и аппараты химических технологий.

Диссертация рассмотрена на заседании кафедры информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева», состоявшемся «03» апреля 2025 года, протокол № 13.

В обсуждении приняли участие: заведующий кафедрой информационных компьютерных технологий, д.т.н., профессор Кольцова Э. М.; доцент кафедры информационных компьютерных технологий, к.т.н., доцент Василенко В. А.; доцент кафедры информационных компьютерных технологий, к.т.н., доцент Женса А. В.; доцент кафедры информационных компьютерных технологий, к.т.н., доцент Зубов Д.В.; доцент кафедры информационных компьютерных технологий, к.т.н., доцент Красильников И. В.; доцент кафедры информационных

компьютерных технологий, к.т.н. Митричев И. И.; доцент кафедры информационных компьютерных технологий, к.т.н. Семенов Г. Н.; доцент кафедры информационных компьютерных технологий, к.т.н., доцент Филиппова Е. Б.; старший преподаватель кафедры информационных компьютерных технологий, к.т.н. Шанева А.С.; старший преподаватель кафедры информационных компьютерных технологий Васецкий А. М.; старший преподаватель кафедры информационных компьютерных технологий Приходько В. Н.; ассистент кафедры информационных компьютерных технологий Лобанов А. В.; ассистент кафедры информационных компьютерных технологий Миронова Е. А.; ассистент кафедры информационных компьютерных технологий Чернухин А.В., заведующий кафедрой кибернетики химико-технологических процессов, д.т.н., профессор Глебов М. Б.

Принимало участие в голосовании 10 человек. Результаты голосования: «За» – 10 человек, «Против» – 0 человек, воздержались – 0 человек, протокол № 13 от «03» апреля 2025 г.

Председатель заседания

Заместитель заведующего кафедрой
информационных компьютерных технологий,
к.т.н., доцент

А. В. Женса

Секретарь заседания

доцент кафедры
информационных компьютерных технологий
к.т.н., доцент

Е. Б. Филиппова