

«УТВЕРЖДАЮ»



И.о. ректора РХТУ им. Д. И. Менделеева,
д.т.н. проф. И. В. Воротынцев

И. В. Воротынцев

2023 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертация на тему: «Исследование, моделирование и оптимизация процессов получения нанокompозитов на основе бескислородных и кислородных матриц» по научной специальности 2.6.13. Процессы и аппараты химических технологий на соискание ученой степени кандидата технических наук 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 Шанева Анна Сергеевна, «26» марта 1994 года рождения, была аспирантом кафедры информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева» с 01.09.2017 г. по 31.08.2021 г. Работает в РХТУ имени Д. И. Менделеева с 2017 года, в настоящее время – на должностях ассистента и заведующего лабораторией кафедры информационных компьютерных технологий.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в РХТУ им. Д. И. Менделеева в 2022 году.

Научный руководитель – Кольцова Элеонора Моисеевна, д.т.н. 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».

По результатам рассмотрения диссертации на тему: «Исследование, моделирование и оптимизация процессов получения нанокompозитов на основе бескислородных и кислородных матриц» принято следующее заключение.

Диссертационная работа Шаневой Анны Сергеевны посвящена процессам получения керамоматричных композиционных материалов. Современные технологии требуют конструкционных материалов, способных работать при высоких температурах, обладающих высокими прочностью, износостойкостью, твердостью, жаростойкостью, трещиностойкостью. Такие материалы находят свое применение в авиационной, космической, оборонной и химической отраслях

Анна Сергеевна Шанева

промышленности. Термическая и химическая стойкость керамики позволяет использовать её для изготовления деталей и частей механизмов, подвергающихся воздействию высоких температур и вступающих в контакт с агрессивными химическими средами. Однако одним из недостатков таких материалов являются низкие показатели прочности, трещиностойкости. Поэтому создание функциональных керамоматричных композитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2(\text{Y}_2\text{O}_3)\text{-УНТ}$ на основе оксида алюминия, дисперсионно упрочненных модифицированными эвтектическими структурами и армированных углеродными нанотрубками (УНТ), обладающих уникальными и эксплуатационными характеристиками является актуальной задачей. А совместное использование порошков алюмомагнезиевой шпинели MgAl_2O_4 и карбида кремния создали условия для получения композиционного керамического материала $\text{SiC-MgAl}_2\text{O}_4\text{-УНТ}$ с высокой температурой эксплуатации в условиях теплоэрозионного износа. Так как MgAl_2O_4 обеспечит защиту от окисления SiC по всему объему материала при повышенных температурах, а карбид кремния армированный УНТ обеспечивает материал необходимой прочностью, твердостью, высокими теплоэрозионными показателями. Керамический материал на основе карбида кремния с добавкой MgAl_2O_4 , армированный УНТ может быть использован для изготовления деталей и узлов авиационно-космической техники.

Механоактивация и спекание порошков карбида кремния и бора создадут условия получения керамоматричного композита (на основе бескислородной матрицы SiC-B) с уникальными жаростойкими свойствами для использования в космической технике (для деталей жидкостного реактивного двигателя).

Научная новизна заключается в следующем: на основе методов механики гетерогенных сред, термодинамики необратимых процессов получена математическая модель процесса спекания керамоматричных композитов, содержащая:

- уравнение баланса числа пор по размерам с учетом явлений: уменьшения («залечивания») поры, коалесценции пор в ходе процессов спекания;
- уравнение баланса числа зерен в композите, учитывающее явление рекристаллизации зерен в ходе процесса спекания.

Для решения уравнения изменения плотности распределения пор и зерен по размерам (интегро-дифференциальных уравнений в частных производных 1-го порядка) разработаны «Z»-схема и зеркальная «Z»-схема, обеспечивающие второй порядок аппроксимации и по времени, и по размеру.

На основе экспериментальных исследований и математического моделирования определены оптимальные условия спекания трех композитов на базе кислородных и бескислородных матриц, позволившие улучшить свойства этих композитов:

- композит $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2(\text{Y}_2\text{O}_3)\text{-УНТ}$ прочность на изгиб 998 МПа, коэффициент трещиностойкости $7,3 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$, пористость 0,12 %;
- композит $\text{SiC-MgAl}_2\text{O}_4\text{-УНТ}$ прочность на изгиб 515 МПа, коэффициент трещиностойкости $7,2 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$, убыль массы 2,1 %, коэффициент теплопроводности $54 \text{ Вт}/(\text{мК})$;

- композит SiC-B убыль массы (жаростойкость) ~ 0,19 %, микротвердость 26,4 ГПа, коэффициент трещиностойкости $5,1 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$.

Для спекания композита SiC-MgAl₂O₄-УНТ выявлена закономерность влияния концентрации УНТ на пористость композита. Для процесса спекания SiC-B выявлены закономерности влияния добавки бора на скорости изменения поры и зерен композита в ходе спекания.

Практическая значимость работы: создано программное обеспечение, состоящее из программных модулей, позволяющее моделировать стадию измельчения исходных порошков, процесс искрового спекания (состоящий из 2-3 стадий, в зависимости от типа композита). Определены оптимальные условия получения композитов Al₂O₃-ZrO₂(Y₂O₃)-УНТ, SiC-MgAl₂O₄-УНТ, SiC-B.

Диссертационная работа выполнялась в рамках научного проекта РФФИ рамках № 19-37-90149 Аспиранты, а также при частичной поддержке ФЦП № 14.254.21.0158, «Приоритет-2030».

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

Основные положения диссертации получили полное отражение в 17 печатных работах, из них 8 в журналах, индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus. Получено 1 свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Основные положения и результаты диссертационной работы представлены на международных конференциях: XII, XIII, XVII Международные конгрессы молодых ученых по химии и химической технологии МКХТ (Москва, 2016 г., 2017 г., 2020 г.), Международная научно-междисциплинарная конференция GeoConference SGEM (Албена, Болгария, 2018 г., 2020 г.), Международный конгресс химико-технологических процессов CHISA (Прага, Чехия, 2018 г.), XVII Всероссийская молодежная научная конференция с элементами научной школы - «Функциональные материалы: синтез, свойства, применение», посвященная 110-летию со дня рождения член.-корр. АН СССР Н. А. Торопова (Санкт-Петербург, 2018 г.), Международная конференция со школой и мастер-классами для молодых ученых «Химическая технология функциональных наноматериалов» (Москва, 2017 г.).

Публикации по теме диссертации:

1. Koltsova E.M. To the question of determining the limiting particle size of corundum during grinding / E.M. Koltsova, M.A. Babkin, A.S. Shaneva, N.A. Popova, E.V. Zharikov // International Journal of Mechanical Engineering and Robotics Research. – 2020. – Vol. 9. – №. 2. – P. 207-211. DOI 10.18178/ijmerr.9.2.207-211 (*Scopus*).
2. Koltsova E. Modeling and optimization of the fabrication of Al₂O₃-based ceramocomposites reinforced with carbon nanotubes / E. Koltsova, N. Mamonova, A. Shaneva, M. Babkin, N. Popova, E. Zharikov // Materials Science Forum. – 2020. – Vol. 995. – P. 27-33. DOI 10.4028/www.scientific.net/MSF.995.27 (*Scopus*).
3. Шанева А. С. Исследование и математическое моделирование процесса получения керамоматричного композиционного материала на основе карбида кремния, модифицированного диоксидом циркония / А.С. Шанева, С.И.

Лёвина, Э.М. Кольцова, Н.А. Попова // Успехи в химии и химической технологии. – 2020. – Т. 34. – № 6(229). – С. 157-159.

4. Skichko E. Synthesis of carbon nanotubes by chemical vapor deposition of CH_4/H_2 mixtures: experimental study and computer modeling / E. Skichko, E. Koltsova, A. Shaneva // International Multidisciplinary Scientific GeoConference: SGEM. – 2020. – Vol.20. – №. 6.1. – P. 133-140. DOI 10.5593/sgem2020/6.1/s24.018 (*Scopus*).

5. Shaneva A. Computer simulation of porosity reduction of a ceramic composite based on an oxygen-free matrix of silicon carbide modified with partially stabilized zirconia / A. Shaneva, S. Lyovina, E. Koltsova, N. Popova // International Multidisciplinary Scientific GeoConference: SGEM. – 2020. – Vol. 20. – №. 6.1. – P. 25-31. DOI 10.5593/sgem2020/6.1/s24.004 (*Scopus*).

6. Шанева А. С. Технологическая схема процесса получения керамического композиционного материала SiC-УНТ / А.С. Шанева, Н.А. Попова, Э.М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии. – 2018. – Т. 32. – №. 1 (197). – С. 9-11.

7. Shaneva A. S. Mathematical modeling of spark plasma sintering of silicon carbide composite modified with carbon nanotubes / A.S. Shaneva, E.M. Koltsova, E.V. Zharikov, N.V. Mamonova, N.A. Popova // Chemical Engineering Transactions. – 2018. – Vol. 70. – P. 1807-1812. DOI 10.3303/CET1870302 (*Scopus*).

8. Mamonova N. V. Mathematical modelling of the process of spark plasma sintering of a ceramic material composite $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$, modified by carbon nanotubes / N.V. Mamonova, E.M. Koltsova, E.A. Skichko, A.S. Shaneva, N.A. Popova // Chemical Engineering Transactions. – 2018. – Vol. 70. – P. 1759-1764. DOI 10.3303/CET1870294 (*Scopus*).

9. Shaneva A. Research and mathematical modeling of the process of obtaining a nanocomposite of SiC-CNT / A. Shaneva, A. Zhensa, E. Zharikov, N. Popova, E. Koltsova // International Multidisciplinary Scientific GeoConference: SGEM. – 2018. – Vol. 18. – №. 6.1. – P. 425-432. DOI 10.5593/sgem2018/6.1/S24.057 (*Scopus*).

10. Кириллов Н.Д. Моделирование физико-механических свойств нанокompозита на основе оксида алюминия, армированного углеродными нанотрубками / Н.Д. Кириллов, Э.М. Кольцова, А.С. Шанева, А.П. Соколов // XVII Всероссийская молодежная научная конференция с элементами научной школы - "Функциональные материалы: синтез, свойства, применение", посвященная 110-летию со дня рождения член.-корр. АН СССР НА Торопова. – 2018. – С. 220-221.

11. Шанёва А.С. Исследование и математическое моделирование процесса получения керамического композиционного материала SiC-УНТ / А.С. Шанёва, Н.А. Попова, Э.М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии. – 2017. – Т. 31. – №. 8 (189). – С. 42-44.

12. Шанева А.С. Исследование и математическое моделирование процесса получения нанокompозита на основе карбида кремния, армированного углеродными нанотрубками / А.С. Шанева, Э. М. Кольцова, Н. А. Попова // 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. 289-291.

13. Кольцова Э.М. Нанокompозиты, армированные углеродными нанотрубками: синтез, моделирование, оптимизация / Э.М. Кольцова, Н.А. Федосова, Н.А. Попова, А.С. Шанёва // VI Всероссийская конференция по наноматериалам с элементами научной школы для молодежи. – 2016. – С. 504-505.

14. Fedosova N.A. Spark Plasma Sintering Simulation of Alumina Composite Modified with Carbon Nanotubes / N.A. Fedosova, E.M. Koltsova, E.V. Zharikov, I.I. Mitrichev, A.S. Shaneva // Chemical Engineering Transactions. – 2016. – Vol. 52. – P. 979-984. DOI 10.3303/CET1652164 (*Web of Science, Scopus*).

15. Шанева А.С. Технологические схемы получения керамического композитного материала Al_2O_3 -УНТ в промышленном масштабе / А.С. Шанева, Н.А. Федосова, Э.М. Кольцова // Сборник материалов Российско-Швейцарского семинара «От фундаментальных исследований к коммерциализации научных идей» под ред. Меньшутиной Н.В. – М: РХТУ им. Д.И.Менделеева, Москва, 26-27 мая 2016. – С.68-69.

16. Кольцова Э.М. Проектирование технологической схемы вакуумного спекания керамоматричного композита, модифицированного углеродными нанотрубками / Э.М. Кольцова, А.С. Шанева // Молодежь в науке: новые аргументы. – 2016. – С. 78-81.

17. Шанева А.С. Расчеты материальных балансов всех стадий лабораторного и промышленного получения керамического композитного материала Al_2O_3 -УНТ / А.С. Шанева, Н.А. Федосова, Э.М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии. – 2016. – Т. 30. – № 4(173). – С. 42-44.

18. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021663707. Программный модуль процесса искрового плазменного спекания композита SiC-УНТ / Шанева А.С., Кольцова Э.М.; заявитель и патентообладатель Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева - № 2021662843; заявл. 13.08.2021; опубл. 20.08.2021.

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

Фундаментальные исследования явлений переноса энергии, массы и импульса в химико-технологических процессах и аппаратах

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

Способы, приемы, методология исследования химических, тепловых, массообменных и совмещенных процессов, совершенствование их аппаратурного оформления.

Способы, приемы, методология изучения нестационарных режимов протекания процессов в химической аппаратуре, в том числе с целью формирования предпосылок эффективного управления и автоматизации.

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

Автореферат отражает основное содержание диссертации.

Диссертация Шаневой Анны Сергеевны 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 Шаневой Анне Сергеевне; 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 учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева», предъявляемым к подобным работам, диссертация на тему: «Исследование, моделирование и оптимизация процессов получения нанокompозитов на основе бескислородных и кислородных матриц» 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 «22» марта 2023 года, протокол № 11.

В обсуждении приняли участие: д.т.н., проф. Кольцова Э. М., к.т.н., доц. Василенко В. А., к.т.н., доц. Женса А. В., к.т.н., доц. Красильников И. В., к.т.н., доц. Митричев И. И., к.т.н., доц. Семенов Г. Н., к.т.н., доц. Филиппова Е. Б., ст. преп. Васецкий А. М., ст. преп. Приходько В. Н., асс. Бабкин М. А., асс. Лебедев Д. А., асс. Миронова Е. А., асс. Пысин М. Д., асс. Скичко Е. А., д.т.н., проф. Глебов М. Б.

Принимало участие в голосовании 15 человек. Результаты голосования: «За» – 15 человек, «Против» – 0 человек, воздержались – 0 человек, протокол № 11 от «22» марта 2023 г.

Председатель заседания

заведующий кафедрой ИКТ,
д.т.н., профессор

Э. М. Кольцова

Секретарь заседания

к.т.н., доцент кафедры ИКТ

Е. Б. Филиппова