



«УТВЕРЖДАЮ»

И.О. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева  
Д.т.н. проф. И.В. Воротынцева

« 7 » апреля 2023 г.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертация на тему: «Математическое моделирование и оптимизация процессов, протекающих в биотопливном элементе» по научным специальностям 2.6.13. Процессы и аппараты химических технологий, 2.6.9. Технология электрохимических процессов и защита от коррозии 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», а также в лаборатории «Электрокатализ» Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН.

В процессе подготовки диссертации Аркадьева Ирина Николаевна, «4» января 1990 года рождения, была аспирантом кафедры кибернетики химико-технологических процессов федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева» с 01.09.2013 г. по 31.12.2017 г. В настоящее время является соискателем ученой степени кандидата наук в РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в РХТУ им. Д. И. Менделеева в 2023 году.

Научный руководитель – Василенко Виолетта Анатольевна, к.т.н. по специальности 05.17.08 Процессы и аппараты химических технологий, доцент кафедры информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»; научный консультант – Богдановская Вера Александровна, д.х.н., главный научный сотрудник лаборатории «Электрокатализ» ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН.

По результатам рассмотрения диссертации на тему: «Математическое моделирование и оптимизация процессов, протекающих в биотопливном элементе» принято следующее заключение.

Диссертационная работа Аркадьевой Ирины Николаевны посвящена

исследованию процессов, протекающих в безмембранном безмедиаторном биотопливном элементе (БТЭ), которые являются одним из перспективных направлений современной альтернативной энергетики – устройства по преобразованию химической энергии топлива в электрическую с использованием катализаторов биологической природы (ферментов, микробов и др.). БТЭ являются устройствами, альтернативными традиционным топливным элементам (ТЭ) с катализаторами на основе драгоценных металлов, поскольку обладают по сравнению с ними рядом преимуществ: используют возобновляемые катализаторы и работают в мягких условиях – температурном диапазоне 20-40°C и pH, близких к нейтральным, в то время как наиболее распространенные низкотемпературные ТЭ с катализаторами на основе платины функционируют в диапазоне pH~1-3, температуре 60-80°C и для них необходима протонпроводящая мембрана. Основной областью применения БТЭ является возможность их использования в качестве источника питания, в том числе для имплантируемых устройств (например, кардиостимулятора, искусственной почки и др.). Кроме того, на основе БТЭ разрабатываются биосенсоры на широкий круг субстратов для целей медицинской и экологической областей.

Для содействия более глубокому пониманию основных закономерностей функционирования подобных систем и расширения потенциала их практического применения требуется формулировка математического аппарата, способного предсказывать параметры, от которых зависят выходные характеристики разрабатываемых БТЭ.

Одной из наиболее перспективных является конструкция без мембраны и без медиатора БТЭ, в которой участники и продукты электродных реакций являются возобновляемыми и экологически чистыми. В качестве субстратов выбраны глюкоза и кислород как наиболее доступные, широко распространенные и экологически чистые вещества. В качестве катализатора для катода выбрали лакказы – активный и стабильный фермент, ускоряющий реакцию электровосстановления кислорода до воды. В качестве катализатора на аноде использовали модифицированную золотом сажу, на которой глюкоза окисляется в условиях, благоприятных для функционирования катода на основе лакказы.

**Научная новизна.** Разработаны эффективные каталитические системы и создан биотопливный элемент глюкоза-кислород на их основе без использования мембраны и медиатора.

Впервые на основе математического аппарата дробного дифференцирования разработаны математические модели: 1) иммобилизации фермента с учетом пористой структуры углеродного носителя; 2) прямого биоэлектрокаталитического восстановления кислорода лакказой; 3) электроокисления глюкозы с учетом изменения числа активных центров катализатора, которые позволили установить основные закономерности протекания физико-химических процессов в исследуемых системах, провести оптимизацию количества углеродного материала на электродах и глюкозы в питающем растворе.

**Практическая значимость работы:** В данной работе проведены экспериментальные и теоретические исследования физико-химических процессов и явлений, протекающих в БТЭ без разделительной мембраны и без медиаторов с



катализаторами на основе лакказы (катод) и модифицированной золотом сажи (анод). Определены основные закономерности процессов: самопроизвольной адсорбционной иммобилизации лакказы на углеродных материалах (УМ) с разной структурой (углеродные нанотрубки (УНТ) и сажа); электровосстановления кислорода в условиях прямого переноса электрона (без медиатора) на электроде с катализатором на основе лакказы; электроокисления глюкозы на электроде с катализатором 20Au/XC-72R при pH, близких к нейтральным.

Разработаны: 1) Математическая модель самопроизвольной адсорбционной иммобилизации лакказы на УМ различной природы. На основе полученных данных определены структурные параметры УМ, влияющие на эффективность адсорбции. 2) Математические модели процессов электровосстановления кислорода на катоде на основе лакказы и электроокисления глюкозы на аноде с катализатором 20Au/XC-72R, способные предсказать электрохимические характеристики исследуемых электродных процессов. 3) Математическая модель БТЭ, способную предсказать электрохимические характеристики исследуемой системы.

Сформулированный на основе обширных экспериментальных исследований математический аппарат позволил создать теоретическую базу для последующего расширения возможностей практического применения БТЭ без мембраны и без медиаторов.

#### **Публикации по теме диссертации:**

1. Василенко В.А. Разработка математической модели биотопливного элемента на основе лакказы и глюкозодегидрогеназы / В.А. Василенко, И.Н. Аркадьева, А.С. Скичко, Э.М. Кольцова // *Успехи в химии и химической технологии*. – Москва, 2016. – Т. 30. – С. 87-90. (РИНЦ)

2. Arkadeva I.N. Laccase Spontaneous Adsorption Immobilization: Experimental Studies and Mathematical Modeling at Enzymatic Fuel Cell Cathode Construction / I.N. Arkadeva, V.A. Bogdanovskaya, V.A. Vasilenko, E.A. Fokina, E.M. Koltsova // *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. – 2017. – 83. – P. 127-134. DOI: 10.1088/1755-1315/83/1/012017 (*Scopus*)

3. Bogdanovskaya V.A. Bioelectrocatalytic Oxygen Reduction by Laccase Immobilized on Various Carbon Carriers / V.A. Bogdanovskaya, I.N. Arkad'eva, M.A. Osina // *Russian Journal of Electrochemistry*. – 2017. – 53 (12). – P. 1323–1333. DOI: 10.1134/S1023193517120047 (*Scopus, WoS*)

4. Богдановская В.А. Биоэлектрокаталитическое восстановление кислорода лакказой, иммобилизованной на различных углеродных носителях / В.А. Богдановская, И.Н. Аркадьева, М.А. Осина // *Электрохимия*. – 2017. – 53 (12). – С. 1506-1516. (ВАК, РИНЦ, *Scopus, WoS*)

5. Аркадьева И.Н. Математическая модель адсорбции лакказы на углеродном



носителе при конструировании катода биотопливного элемента / И.Н. Аркадьева, В.А. Василенко, Е.А. Фокина, Э.М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии. – Москва, 2017. – С. 87-89. (РИНЦ)

6. Аркадьева И.Н. Математическая модель электроокисления глюкозы на саже, модифицированной золотом, в слабокислой среде / И.Н. Аркадьева, Е.А. Фокина, В.А. Василенко, Э.М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии – Москва, 2018. – Т. 32. – С. 62-65. (РИНЦ).

7. Vasilenko V.A. Research and mathematical modelling of direct bioelectrocatalytic oxygen reduction by laccase / V.A. Vasilenko, I.N. Arkadeva, V.A. Bogdanovskaya, E.A. Fokina, E.M. Koltsova // Chemical Engineering Transactions – 2018. – 70.– P. 1609-1614. DOI: 10.3303/CET1870269 (Scopus)

8. Vasilenko V. Glucose-oxygen biofuel cell with biotic and abiotic catalysts: Experimental research and mathematical modeling / V. Vasilenko, I. Arkadeva, V. Bogdanovskaya, G. Sudarev, S. Kalenov, M. Vocciante, E. Koltsova //Energies. – 2020. – 13(21). – P. 5630. (Scopus, WoS)

9. Arkadeva I. Glucose-oxygen biofuel cell based on laccase cathode and gold-modified carbon black anode: experimental research and mathematical modelling / Arkadeva I., Vasilenko V., Bogdanovskaya V., Sudarev G., Koltsova E. // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science – 2021. – 633.– P. 012001. (Scopus)

10. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018616925. Программный модуль расчета процесса самопроизвольной адсорбционной иммобилизации фермента на углеродном носителе (SOFT) / Кольцова Э.М., Василенко В.А., Аркадьева И.Н., Фокина Е.А.; заявитель и патентообладатель Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева № 2018614370 заявл. 28.04.2018, опубл. 09.06.2018.

11. Богдановская В.А. Биоэлектродокаталитическое восстановление кислорода лакказой, иммобилизованной на различных носителях, и разработка катода БТЭ / В.А. Богдановская, М.А. Осина, И.Н. Аркадьева, М.Р. Тарасевич, Е.А. Малеева // Химическая технология и биотехнология новых материалов и продуктов VI Международная конференция Российского химического общества им. Д.И. Менделеева. – Москва, 2014. – С. 9-11.

12. Аркадьева И.Н. Влияние структуры углеродных материалов на электрокаталитическую активность лакказы в реакции восстановления кислорода» / И.Н. Аркадьева, В.А. Богдановская // X Конференция молодых ученых, аспирантов и студентов ИФХЭ РАН «ФИЗИКОХИМИЯ – 2015». – Москва, 2015. – С. 120-121.

13. Василенко В.А. Разработка биотопливного элемента на основе лакказы и глюкозодегидрогеназы / В.А. Василенко, И.Н. Аркадьева, А.С. Скичко, Э.М. Кольцова // Сборник материалов Российско-Швейцарского семинара «От



фундаментальных исследований к коммерциализации научных идей». – Москва, 2016. – С. 53-55.

14. Arkadeva I.N. Laccase Spontaneous Adsorption Immobilization: Experimental Studies and Mathematical Modeling at Enzymatic Fuel Cell Cathode Construction / I N Arkadeva, V A Bogdanovskaya, V A Vasilenko, E A Fokina, E M Koltsova // International Conference on Green Energy Technology (ICGET 2017). – Рим, 2017. – P. 012017.

15. Аркадьева И.Н. Электроокисление глюкозы в слабокислом растворе на электроде с катализатором на основе сажи, модифицированной золотом: экспериментальные исследования и математическое моделирование / И.Н. Аркадьева, В.А. Богдановская, В.А. Василенко, Е.А. Фокина, Э.М. Кольцов // XII конференция молодых ученых, аспирантов и студентов ИФХЭ РАН «Физикохимия – 2017». – Москва, 2017. – С. 222-224.

16. Arkadeva I. Mathematical modeling of glucose electro-oxidation in a slight acid solution at the biofuel cell anode / I. Arkadeva, E. Fokina, V. Bogdanovskaya, V. Vasilenko, E. Koltsova // 18th international multidisciplinary Scientific GeoConference SGEM 2018. – София, 2018. – 18 (4.1). – P. 441-448. (*Scopus*)

17. Vasilenko V.A. Mathematical modeling of the process of oxygen bioelectroreduction by laccase / Vasilenko, V.A., Arkadeva, I.N., Bogdanovskaya, V., E.A. Fokina, E.M.Koltsova // 23rd International Congress of Chemical and Process Engineering, CHISA 2018 and 21st Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction (PRES 2018). – Прага, 2018. – P. 1145–1146. (*Scopus*)

18. Arkadeva I. Glucose-oxygen biofuel cell based on laccase cathode and gold-modified carbon black anode: experimental research and mathematical modelling / I Arkadeva, V Vasilenko, V Bogdanovskaya, G Sudarev and E Koltsova // 3rd International Conference on Green Energy and Environment Engineering 22-24 July 2020 (CGEEE 2020) – Сеул, 2020. – 633.

19. Сударев Г.М. Влияние pH электролита и металлической фазы катализатора на процесс электроокисления глюкозы / Сударев Г.М., Радина М.В., Аркадьева И.Н., Василенко В.А., Богдановская В.А. // материалы XXXI Международной научно-практической конференции «Приоритетные направления развития науки и технологий» – Тула, 2022. – С. 92 – 97 (*РИНЦ*)

20. Arkadeva I.N. Research and mathematical modeling of functioning processes of microbial biofuel elements with biotic catalysts / I.N. Arkadeva, V.A. Vasilenko // International Science Conference «Science. Education. Practice» 8 April 2023 г. (Дели, 2023 г.) – 2023. – p. 67-75.

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.

По тематике, методам исследования, предложенным новым научным положениям диссертация соответствует паспорту специальности научных работников 2.6.9. Технология электрохимических процессов и защита от коррозии в части:

Теоретические основы электрохимических и химических процессов коррозии, электроосаждения, электросинтеза, электролиза и процессов, протекающих в химических источниках электрической энергии.

Приборы и оборудование для исследований и реализации электрохимических и противокоррозионных технологий и мониторинга коррозионных процессов.

Создание новых и совершенствование традиционных химических источников электрической энергии.

Автоматизация и цифровизация электрохимических и противокоррозионных технологий.

Автореферат отражает основное содержание диссертации.

Диссертация Аркадьевой Ирины Николаевны 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 Аркадьевой Ирине Николаевне; 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: «Математическое моделирование и оптимизация процессов, протекающих в биотопливном элементе» рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата технических наук по научным специальностям 2.6.13. Процессы и аппараты химических технологий; 2.6.9. Технология электрохимических процессов и защита от коррозии.

Диссертация рассмотрена на заседании кафедры информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева», состоявшемся «5» апреля 2023 года, протокол № 12.

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., к.т.н., доц. Зубов Д.В., ст. преп. Васецкий А. М., 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 № 12 от «5» апреля 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