

ОТЗЫВ

на автореферат Паймурзиной Натальи Халитовны «Прогноз физико-химических свойств полициклических ароматических углеводородов нефтяных фракций по моделям «структура-свойство» и «спектр-свойства», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.12 Нефтехимия

Диссертационная работа Паймурзиной Н.Х. посвящена интересной теме, актуальной с точки зрения современного развития и применения методов машинного обучения и искусственного интеллекта в различных областях науки и технологий – разработке статистических моделей, основанных на взаимосвязях «структура-свойство» и «спектр-свойства», для прогноза физико-химических свойств полициклических ароматических углеводородов (ПАУ), присутствующих в нефти и нефтяных фракциях. Работа дополнительно демонстрирует новые возможности изучения электронной структуры и реакционной способности органических соединений и графеноподобных наночастиц. В том числе наночастиц нефтяных асфальтенов, которые могут рассматриваться как производные ПАУ. Среди оригинальных результатов диссертационного исследования, на мой взгляд, наиболее интересными являются:

- в ряду замещенных нафталинов обнаружены закономерности, связывающие квантовые и макроскопические свойства, которые характеризуют фазовые переходы;
- для ПАУ установлена закономерность связи топологических, квантовых и спектроскопических дескрипторов с различными свойствами.

Практическая значимость работы заключается в разработке методики одновременного определения физико-химических свойств ПАУ, используя спектры оптического поглощения в ультрафиолетовом и видимом диапазонах.

Замеченные недостатки. (1) При изучении электронной структуры асфальтенов в последней главе работы не использованы такие информативные экспериментальные методы, как ЯМР, ЭПР и хромато-масс-спектрометрия. (2) В автореферате встречается ряд сокращений, однако они не введены (например, ПИ).

Приведенные недостатки не снижают научную и практическую значимость работы. Впечатляет публикационная активность Н.Х. Паймурзиной – по результатам проведенных исследований опубликованы 15 статей из списка ВАК, 4 из списка Scopus/WoS, получено свидетельства о регистрации 7 РИД.

Считаю, что диссертационная работа Паймурзиной Натальи Халитовны соответствует требованиям, предъявляемым ВАК Российской Федерации к кандидатским диссертациям (п. 9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г.), автор работы заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.12 Нефтехимия.

Доктор физико-математических наук
(специальность 01.04.07
Физика конденсированного состояния),
Директор Института физики
Федерального государственного образовательного учреждения высшего
Образования Казанский (Приволжский) федеральный университет,
420008, г. Казань, ул. Кремлевская 16а
Тел. +7(843) 233-74-16,
Email Marat.Gafurov@kpfu.ru
<https://kpfu.ru/Marat.Gafurov>

/Марат Ревгерович Гафуров

«31» января 2024 г.

Подпись Гафурова М.Р. января



ж директора
физики К(П)ФУ
АНОВА
СОЮНОВНА