

Отзыв

На автореферат диссертации на соискание ученой степени

кандидата химических наук

по специальности 1.4.12 – нефтехимия

Паймурзиной Натальи Халитовны

«Прогноз физико-химических свойств полициклических ароматических углеводородов нефтяных фракций по моделям «структура – свойство» и «спектр – свойства»

Данная диссертационная работа посвящена разработке многофакторных моделей типа «структура – свойство» и «спектр-свойство» для прогнозирования физико-химических свойств полициклических ароматических углеводородов (ПАУ), которые являются компонентами нефти, высококипящих нефтяных фракций, нефтяных остатков, компонентами каменноугольных смол, а также концентратов асфальто-смолистых веществ. Они играют исключительную роль в процессах коксования и формирования углеродных и углеграфитовых материалов, являются источниками коксовых отложений на катализаторах крекинга, гидрокрекинга, риформинга и тем самым значительно снижают их каталитическую активность. Многие ПАУ благодаря повышенным электронодонорным и электроноакцепторным свойствам являются перспективными объектами молекулярной электроники. Поэтому проблема прогнозирования физико-химических свойств ПАУ достаточно актуальна и тема диссертационной работы представляется современной, актуальной и интересной для изучения. Автором изучены известные достижения и теоретические положения феноменологической спектроскопии и метода «спектр-свойство», проанализированы известные данные по структуре и свойствам ПАУ.

Теоретическая значимость работы заключается в комбинированном дескрипторном подходе для исследования и прогнозе ФХС многокомпонентных углеводородных систем, с использованием принципов «структура-свойства» и «спектр-свойства», включающими топологические и экспериментально определяемыми по спектрам автокорреляционные спектроскопические дескрипторы. Впервые для оценки донорно-акцепторных свойств ПАУ, а также прогнозирования донорно-акцепторных свойств нефтяных асфальтенов предложен спектроскопический дескриптор в виде отношения интегрального широкополосного сигнала в видимой и ультрафиолетовой области.

В работе содержится решение научно-технической задачи прогнозирования ФХС алкилнафталинов, которое может быть использовано в расчете нефтехимических процессов с участием сверхкритических флюидов. Показана возможность прогнозирования качества игольчатого кокса по спектроскопическим дескрипторам для области нефтепереработки. Автором разработаны соответствующие методики и определены эмпирические коэффициенты установленных зависимостей для углеводородного сырья. Обоснована валидность установленных закономерностей, проведено статистическое и теоретическое подтверждение результатов исследования. Весь комплекс проведенных работ и полученные результаты имеют существенное значение для развития фундаментальных и прикладных аспектов научного направления «Нефтехимия».

К замечаниям можно отнести некоторую невнимательность автора:

-Так интервалы коэффициентов детерминации, приведенные после таблиц 1 и 2, не совсем соответствуют их минимальным и максимальным значениям, приведенным в самих таблицах. Это относится и к диапазону значений потенциала ионизации (ПИ) и сродства к электрону (СЭ), приведенных после таблицы 14, а также диапазону средних ПИ указанному в выводе 5.

-В разделе «основные положения, выносимые на защиту» автор указывает, что рассматривались ПАУ с количеством бензольных колец более трех, на самом же деле более двух.

Также хотелось пожелать автору в своих дальнейших исследованиях обратить внимание на влияние растворителей, в которых снимались спектры, что возможно позволит повысить точность разработанных моделей.

Анализируя автореферат, следует отметить, что материал изложен последовательно, лаконично, достаточно графически иллюстрирован таблицами и рисунками; его содержание отражает суть выполненных исследований критериям актуальности, научной новизны, практической значимости исследований. Исследования полностью соответствуют заявленной специальности и всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям. Автореферат даёт представление, что Паймурзина Наталья Халитовна провела серьёзное, актуальное научное исследование, выполненное на высоком профессиональном уровне и заслуживает присвоения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.12 – Нефтехимия

Отзыв на автореферат диссертации представлен, старшим научным сотрудником Федерального бюджетного учреждения науки Института химии нефти Сибирского отделения РАН,

кандидатом химических наук Петренко Татьяной Васильевной

(специальность 02.00.04 - Физическая химия)

Старший научный сотрудник,

кандидат химических наук

Т.В.Петренко

Адрес:634055, Томск, пр. Академический 4,

конт. телефон 89095484641

e-mail:uvikon@ipc.tsc.ru

Подпись Т.В.Петренко заверяю

Ученый секретарь ИХН СО РАН

кандидат химических наук

А.А. Степанов

5 февраля 2024г

