

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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 прогнозу физико-химических свойств полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) с использованием топологических, квантовых и спектральных дескрипторов. В качестве спектральных дескрипторов автор предлагает использовать интегральную силу осциллятора, относительный показатель поглощения и относительный интегральный автокорреляционный параметр (впервые предложен к использованию). В работе дано экспериментальное и теоретическое обоснование использования данных параметров в качестве дескрипторов для прогноза физико-химических свойств ряда полициклических ароматических соединений и для разработки соответствующих методик.

В качестве объектов исследования использованы различные ПАУ, представляющие интерес в нефтехимии и нефтепереработке и нанoeлектронике. Дескрипторы определяются широкополосными автокорреляционными характеристиками сигнала абсорбционного спектра и структурными характеристиками вещества. В данном случае, разработаны методики определения потенциалов ионизации (ПИ) и сродства к электрону (СЭ), а также других физико-химических свойств ПАУ.

Показана возможность применения предлагаемой выше методики для прогноза усреднённых ПИ и СЭ для нефтяных асфальтенов. Адекватность подхода обоснована использованием усреднённой молекулярной массы асфальтенов, квантово-химическими расчётами гипотетической структуры молекулы асфальтена «континентального типа» (построена на основе данных химического анализа и спектроскопии).

Недостатком работы является использование различных статистических критериев, хотя применение коэффициентов детерминации и критерия Фишера, по-видимому, достаточно для проверки адекватности моделей.

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.

Кандидат технических наук (02.00.13 – Нефтехимия),

доцент, старший преподаватель

Института непрерывного образования

ФГБОУ ВО «Уфимский

университет науки и технологий»,

450008, Республика Башкортостан,

г. Уфа, ул. К. Маркса, д. 12,

Тел.: +79174526390 (моб.)

mukaeva.guzel@yandex.ru

«02» февраля 2024 г.

Подпись Мукаевой Р.Г. заверяю

Ученый секретарь Ученого совета

университета, кандидат филологических наук,

доцент

«02» февраля 2024 г.



Мукаева /Мукаева Гузель Рагиповна

Ефименко /Ефименко Н.В.