

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.146.01,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТ ХИМИИ НЕФТИ  
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
(ИХН СО РАН), ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ  
СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета 24.1.146.01 от «21» февраля 2024 г. № 4  
О присуждении Паймурзиной Наталье Халитовне, гражданке РФ, ученой  
степени кандидата химических наук.

Диссертация «Прогноз физико-химических свойств полициклических ароматических углеводородов нефтяных фракций по моделям «структура-свойство» и «спектр-свойства» по специальности 1.4.12. Нефтехимия принята к защите 06.12.2023 г., протокол № 13, диссертационным советом 24.1.146.01, созданным на базе ИХН СО РАН, 634055, г. Томск, пр. Академический, 4, приказ № 443/нк от 12.08.2013 г.

Соискатель Паймурзина Наталья Халитовна, 1977 года рождения, в 1999 году окончила Башкирский государственный университет (БашГУ) по специальности «Физика». В период с 01.11.2011 г. по 01.11.2016 г. обучалась в заочной аспирантуре Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет» (УГНТУ) по специальности 05.09.12 – «Силовая электроника». С 2019 г. по настоящее время работает в УГНТУ старшим преподавателем.

Диссертация выполнена на кафедре «Прикладные и естественнонаучные дисциплины» УГНТУ.

**Научный руководитель** – Долوماتов Михаил Юрьевич, доктор химических наук, профессор, профессор кафедры «Технология нефти и газа» УГНТУ.

**Официальные оппоненты:**

Занозина Ирина Интерновна, доктор технических наук, Акционерное общество «Средневолжский научно-исследовательский институт по

нефтепереработке», испытательный центр «Нефть, нефтепродукты и химреагенты», начальник отдела оценки качества нефти и нефтепродуктов;

Хайруллина Вероника Радиевна, доктор химических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» (УУНиТ), кафедра «Физическая химия и химическая экология», профессор;  
*дали положительные отзывы на диссертацию.*

**Ведущая организация** – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Астраханский государственный технический университет» (АГТУ) в своем положительном **отзыве**, подписанном Пивоваровой Надеждой Анатольевной, доктором технических наук, заведующей кафедрой «Химическая технология переработки нефти и газа» указала, что диссертационная работа Паймурзиной Натальи Халитовны «Прогноз физико-химических свойств полициклических ароматических углеводородов нефтяных фракций по моделям «структура-свойство» и «спектр-свойства», представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.12 Нефтехимия, является самостоятельным законченным научно-квалификационным исследованием, в котором на основе большого объема экспериментального материала и его теоретического обобщения получены значимые и достоверные результаты, обладающие научной новизной и практической значимостью. По актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости, степени обоснованности научных положений и выводов диссертационная работа соответствует заявленной специальности 1.4.12. Нефтехимия и отвечает требованиям Положения о присуждении ученых степеней № 842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Паймурзина Наталья Халитовна, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата химических наук.

Соискатель имеет по теме диссертации 59 опубликованных работ, в том числе 4 статьи в журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 15

статей в рецензируемых научных журналах, рекомендованных перечнем ВАК, 3 статьи в зарубежных журналах, входящих в базу Chemical Abstracts, 6 патентов РФ и 1 свидетельство о государственной регистрации базы данных. Личный вклад составляет не менее 80 %.

**Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:**

1. Доломатов, М.Ю. Многомерная модель для расчета критического давления нормальных и замещенных нафталинов фазового перехода первого рода / М.Ю. Доломатов, Э.А. Ковалева, Н.С. Валеева, **Н.Х. Паймурзина** // Журнал физическая химия. – 2020. – Т. 94. – №11. – С. 1589-1594.

2. Dolomatov, M.Yu. Asphaltenes as new objects for nanoelectronics / M.Yu. Dolomatov, A.M. Petrov, R.Z. Bakhtizin, M.M. Dolomatova, I.R. Khairudinov, S.A. Shutkova, E.A. Kovaleva, **N.Kh. Paymurzina** //IOP Conf.Series: Materials Science and Engineering. – 2017. – V.195. – P. 012005.

3. Dolomatov, M.Yu. Structure and electrophysical properties of materials based on nanoparticles of oil asphaltenes / M.Yu. Dolomatov, R.Z. Bakhtizin, S.A. Shutkova, K.F. Latyipov, Z.Z. Ishniyazov, N.Kh. Paymurzina, A.M. Petrov // Eurasian Journal of Physics and Functional Materials. – 2017. – V. 1. – № 2. – P. 74-80.

4. Доломатов, М. Ю. Оценочный прогноз критических объемов алкилзамещенных нафталинов в фазовых переходах жидкость - пар / М.Ю. Доломатов, Э.А. Ковалева, Н.С. Валеева, Н.Х. Паймурзина // Известия ВУЗов. Серия «Химия и химическая технология». – 2021. – Т. 64. – № 11. – С.57-64.

5. Доломатов, М.Ю. Оценка донорно-акцепторных свойств молекул полициклических углеводов по интегральным автокорреляционным характеристикам оптических спектров / Доломатов М.Ю., **Паймурзина Н.Х.**, Ковалева Э.А. // Бутлеровские сообщения. – 2018. – Т. 53. – №2. – С.28-37.

Итоговая оценка оригинальности диссертации была проведена в системе «Антиплагиат» (<https://ugatu.antiplagiat.ru>). Проверка показала, что степень оригинальности текста диссертации составляет 89,08 %, доля самоцитирования – 3,23 %, доля заимствований – 7,69 %. Фрагменты заимствований в тексте диссертации составляют незначительные доли, а их

характер позволяет считать диссертацию Паймурзиной Н.Х. оригинальной научно-квалификационной работой, оформленной в соответствии с требованиями ВАК (п. 14 Положения о порядке присуждения ученых степеней об обязанности автора ссылаться на автора и (или) источник заимствования материалов или отдельных результатов).

На диссертацию и автореферат поступило 9 положительных отзывов, в которых отмечается актуальность выполненных исследований, научная новизна и практическая значимость полученных соискателем результатов. Замечания и пожелания содержат отзывы: д.ф.-м.н., директора Института физики Казанского федерального университета (КФУ) Гафурова М.Р.; д.х.н., гл. науч. сотр. лаборатории техногенных газовых гидратов Института проблем нефти и газа Сибирского отделения Российской Академии наук (ИПНГ СО РАН) Ивановой И.К.; к.х.н., зам. директора по НР ООО «Уфимский научно-технический центр» Телина А.Г.; д.ф.-м.н., профессора кафедры физической электроники и нанофизики Физико-технического института УУНиТ Бахтизина Р.З.; д.х.н., зам. руководителя по НР, гл. науч. сотр. Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» Хаматгалимова А.Р.; д.т.н., зав. каф. «Химико-технологические процессы» Института нефтепереработки и нефтехимии Уфимского государственного университета в г. Салавате Жирнова Б.С.; к.т.н., ст. преподавателя Института непрерывного образования УУНиТ Мукаевой Г.Р.; к.х.н., ст. науч. сотр. Института химии нефти СО РАН Петренко Т.В.; сотрудников каф. «Химическая технология переработки нефти и газа» Самарского государственного технического университета – д.т.н. доц., зав. каф. Тыщенко В.А. и д.х.н., доц., профессора Максимова Н.М. (*поступил в день защиты*).

Замечания и пожелания в отзывах официальных оппонентов касаются:

объема данных при оценке канцерогенных свойств ПАУ; отсутствия результатов исследования асфальтенов и смол, входящих в состав сырья производства игольчатого кокса; текстовых формулировок; методики эксперимента; используемых в работе дескрипторов и их физического смысла; влияния учета групп симметрии на точность прогноза электронодонорных свойств ПАУ; учета групп симметрии во фракциях асфальтенов.

Замечания и пожелания в отзывах на автореферат касаются: методов эксперимента; объектов исследования; статистических критериев; описания параметра распределения полициклических ароматических углеводородов в системе октанол/вода; отсутствия результатов исследования гетероорганических соединений; отсутствия результатов экспериментальных исследований электронной структуры асфальтенов информативными методами ЯМР, ЭПР, хромато-масс-спектрокопии; необходимости рассмотреть шире фракции каменноугольных смол и асфальтенов высоковязких нефтей; повышения точности разработанных моделей с учетом влияния растворителей, в которых снимались спектры; продолжения работы применительно к задачам нанотехнологии; основных коксогенов каталитического реформинга; нижней и верхней границы концентраций рабочих растворов; доказательства отсутствия ассоциации молекул в данном интервале концентрации растворов; отсутствия результатов исследования для тестовой выборки модели прогноза критических температур. Часть замечаний носит редакционный или рекомендательный характер.

**Выбор официальных оппонентов и ведущей организации** основывается на их широкой известности своими достижениями в данной отрасли науки, наличием публикаций по соответствующей тематике исследования в ведущих журналах и способностью определить научную и практическую ценность диссертационной работы.

**Диссертационный совет отмечает, что** на основании выполненных исследований соискателем научно обоснована и экспериментально доказана

*возможность* прогнозирования физико-химических свойств (ФХС) полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) нефтяных фракций по моделям «структура-свойство» и «спектр-свойства».

**Теоретическая значимость исследований обоснована тем, что в диссертации выявлены новые закономерности связи физико-химических свойств полициклических ароматических углеводородов с расчетными структурными дескрипторами и спектроскопическими дескрипторами, определяемыми по УФ и видимым спектрам поглощения, позволяющие прогнозировать физико-химические свойства как индивидуальных ПАУ, так многокомпонентных углеводородных систем.**

Применительно к проблематике диссертации соискателем результативно использован комплекс современных физико-химических и компьютерных методов исследования: *ab initio* методы квантовой химии, электронная абсорбционная спектроскопия, электронная феноменологическая спектроскопия, радиофизические методы обработки сигналов, многофакторный регрессионный анализ и получены результаты, обладающие новизной.

В работе *впервые*:

- *обнаружены* закономерности связи топологических и квантовых дескрипторов с параметрами критического состояния в фазовых переходах «жидкость – пар» для алкилзамещенных нафталинов.
- *разработаны* двухфакторные математические модели для прогнозирования критических давлений, критических температур и критических объемов, которые могут быть применены в нефтехимии и нефтепереработке.
- для ПАУ с количеством бензольных колец более трех *обнаружены* многофакторные закономерности связи топологических, спектроскопических и квантовых дескрипторов с ФХС, а именно с температурами кипения, коэффициентами межфазного распределения в системе октанол-вода,

эквивалентом токсичности. Разработаны двухфакторные регрессионные модели для прогноза указанных свойств.

- *обнаружены* закономерности связи топологических и квантовых дескрипторов с такими ФХС ПАУ, как теплоемкость и теплота испарения, стандартная энергия образования Гиббса, температура кипения, а также вязкость и теплопроводность паров. Разработаны двухфакторные регрессионные модели для прогноза указанных свойств.

- *предложен* спектроскопический дескриптор в виде отношения интегрального широкополосного сигнала в видимой и ультрафиолетовой области для оценки донорно-акцепторных свойств ПАУ.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что** разработанные многофакторные математические модели для прогноза ФХС ПАУ могут быть использованы в расчетах и контроле технологических процессов. Разработанная методика определения донорно-акцепторных свойств ПАУ и нефтяных асфальтенов по спектроскопическим дескрипторам может быть использована в лабораторной практике (Патенты РФ № 2621470, № 2658514, № 2621481). Установлена зависимость качества кокса в баллах от спектроскопического дескриптора сырья, которая имеет вид линейной зависимости показателей качества от относительного автокорреляционного параметра.

Результаты диссертационной работы используются для контроля качества сырья коксования ПАУ и асфальтенов нефти в лаборатории «Углеродные материалы» кафедры «Технология нефти и газа» УГНТУ, а также при проведении лабораторных занятий. Кроме того, результаты диссертационной работы представляют интерес для ряда научно-технических предприятий, научных организаций и учебных заведений, в которых проводятся исследования, направленные на изучение состава и свойств нефтяных систем (ОАО «Институт нефтехимпереработки», АО «Средневолжский научно-исследовательский институт по нефтепереработке», ИХН СО РАН, ИПНГ СО РАН, АГТУ, УУНиТ, КФУ).

### **Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:**

экспериментальные данные получены на сертифицированном аналитическом оборудовании: модифицированном спектрометре СФ-2000 с выводом интерфейса на БД спектров углеводородных систем и ЭВМ; жидкостном абсорбционном вытеснительном хроматографе «ГРАДИЕНТ - М» (АО ИНХП, г. Уфа); компьютере с параллельной архитектурой, 32 ядерными процессорами AMD с тактовой частотой 3,5 ГГц.

Также достоверность подтверждается тестовой выборкой и основными статистическими характеристиками регрессионного анализа: коэффициентом детерминации, коэффициентом множественной корреляции и стандартной ошибкой, критерием Фишера. При построении моделей использованы отечественные и зарубежные базы данных по ФХС ПАУ. Приведенные в базах данные основаны на результатах измерений на оборудовании, прошедшем метрологическую аттестацию в сертифицированных лабораториях. Научные положения и выводы теоретически обоснованы.

**Личный вклад соискателя состоит** в: подготовке образцов, исследовании основной части спектров, анализе экспериментальных данных, активном участии в постановке задач и планировании экспериментов, формулировке выводов, теоретическом обосновании полученных закономерностей, обсуждении результатов исследований и подготовке публикаций совместно с соавторами.

**В ходе защиты диссертации** в обсуждении приняли участие д-ра хим. наук: Манжай В.Н., Филимонов В.Д., Мин Р.С., Восмериков А.В., д-р техн. наук: Ивашкина Е.Н. и д-р геол.-минерал. наук Гончаров И.В.

Вопросы и пожелания касались актуальности исследования; объектов исследования; учета влияния межмолекулярного взаимодействия молекул и гетероатомных соединений в многокомпонентных углеводородных системах; оценки донорно-акцепторных свойств нефтяных асфальтенов с использованием моделей, разработанных для ПАУ; преимущества предложенного подхода для оценки физико-химических свойств ПАУ по



отношению к расчетам этих свойств по известным программам; баз данных; практического применения.

Соискатель Паймурзина Н.Х. ответила на заданные вопросы и согласилась с высказанными рекомендациями и пожеланиями.

**На заседании 21.02.2024 г. диссертационный совет принял решение** за разработку способа прогнозирования физико-химических свойств полициклических ароматических углеводородов нефтяных фракций по моделям «структура-свойство» и «спектр-свойства», вносящего существенный вклад в развитие фундаментальных и прикладных основ нефтехимии и нефтепереработки, присудить Паймурзиной Н.Х. ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них 13 докторов и 1 кандидат наук по профилю рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 17 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 14, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета

д-р хим. наук

А.В. Восмери́ков

Ученый секретарь диссертационного совета

канд. хим. наук

Е.Ю. Коваленко

« 27 » февраля 2024 г.

