

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Новикова Николая Александровича «Кинетические закономерности окисления кумола в присутствии 2-этилгексаноатов металлов 12 группы», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ

Окисление кумола кислородом воздуха является одной из стадий в технологическом процессе получения фенола и ацетона кумольным способом. Этот метод является самым распространённым в мире промышленным способом синтеза этих веществ. Ввиду сильной взаимозависимости конверсии кумола и селективности процесса возникает необходимость совершенствования технологии и интенсификации процесса. Для этого в работе предлагается применение катализаторов на основе металлов 12 группы. Поскольку соединения металлов, не способных к валентным превращениям, могут катализировать окисление углеводородов через образование промежуточных аддуктов с компонентами реакционной смеси. Целью диссертационного исследования является установление возможного механизма окисления кумола в присутствии соединений непереходных металлов, объяснение их каталитических способностей и оценка перспектив применения этих катализаторов в промышленном процессе окисления кумола.

Для моделирования рассмотрена полная кинетическая схема 1, состоящая из 44 стадий, некоторые из которых являются обратимыми. Определение кинетических параметров элементарных реакций велось на основе решения обратной кинетической задачи с целью минимизации функционала отклонения расчетных значений концентраций компонент от экспериментальных данных. Далее по оценке чувствительности модели к изменению предэкспоненциального множителя и энергии активации в уравнении Аррениуса проведено редуцирование схемы химических превращений до кинетической схемы 2 – за счет исключения стадий с наименее чувствительными параметрами.

На основе принятой схемы химических превращений и рассчитанных параметров проведена серия вычислительных экспериментов для выявления особенностей каталитического окисления кумола в присутствии 2-этилгексаноатов металлов 12 группы. Сформулированы предложения по возможному выделению катализаторов после проведения процесса в промышленных масштабах.

По автореферату диссертации возникли следующие замечания и вопросы:

1) При кинетическом моделировании процесса и решении обратной задачи определялось более 40 констант скоростей. При этом в автореферате нет информации об экспериментальных данных. Кроме того, для решения обратной задачи был применен метод прямого поиска, то есть метод локальной оптимизации. В связи с этим возникает вопрос об однозначности найденных параметров, который рассмотрен не был.

2) В автореферате не указан использованный численный метод для решения жесткой системы нелинейных дифференциальных уравнений кинетической модели каталитического окисления кумола в присутствии 2-этилгексаноатов металлов 12 группы.

3) В автореферате не указано, какие методы локального или глобального анализа чувствительности параметров применялись в диссертационной работе.

4) Не всегда можно исключить отдельные стадии из кинетической модели процесса только на основе анализа чувствительности связанных с ними параметров. Некоторые из них могут быть важны в аспекте химизма процесса. Были ли проанализированы исключаемые стадии с химической точки зрения?

Замечания не снижают научной значимости работы.

По актуальности, объему выполненных исследований, достоверности результатов, научной новизне и практической значимости выводов диссертационная работа «Кинетические закономерности окисления кумола в присутствии 2-этилгексаноатов металлов 12 группы», представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ соответствует п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» правительства РФ от 24.09.2013 № 842.

Автор диссертационной работы Николай Александрович Новиков достоин присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ.

Доктор химических наук (специальность 1.4.4. Физическая химия), директор Института нефтехимии и катализа Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (ИНК УФИЦ РАН), главный научный сотрудник лаборатории математической химии ИНК УФИЦ РАН

Сабилов Денис Шамилович

Дата « 01 » 12 2023 г.

Даю согласие на обработку персональных данных.

Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук. Почтовый адрес: 450075, Республика Башкортостан, г. Уфа, проспект Октября, 141. Тел.: +7 (347)284 27 50. E-mail: ink@anrb.ru, sabirovdsh@mail.ru.

Подпись  
ЗАВЕРЯЮ  
УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ  
К. Х. Н. КИНЗЯБОВА



Ф.И.О.

Вход. № 05 - 4839  
« 11 » 12 2023 г.  
подпись