

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

В диссертационной работе Новикова Н.А. исследуется влияние 2-этилгексаноатов ряда непереходных металлов на образование продуктов окисления кумола, выявлены основные кинетические закономерности и проведено развернутое математическое моделирование процесса.

Актуальность и практическая значимость работы. Радикально-цепное окисление алкилароматических углеводородов характеризуется сравнительно низкой производительностью. Для увеличения эффективности окисления предлагаются различные катализаторы с целью повысить конверсию субстрата окисления при сохранении уровня селективности. Удобными для этой цели оказались катализаторы на основе непереходных металлов, позволяющие проводить окисление алкилароматических углеводородов в соответствующие гидропероксиды в мягких условиях (атмосферное давление и невысокие температуры (373-393 К)). Это повышает селективность на глубоких стадиях процесса, способствует дополнительному образованию радикалов по ходу процесса окисления, что приводит к увеличению скорости процесса. В частности, результаты диссертационной работы Новикова Н.А. могут быть использованы при окислении кумола в промышленно реализованном процессе получения фенола и ацетона.

Научная новизна диссертации заключается в том, что на основе кинетического моделирования предположена кинетическая схема катализируемого 2-этилгексаноатами непереходных металлов окисления кумола, оценены кинетические параметры элементарных реакций и установлены кинетические закономерности процесса. Достоверность результатов, полученных с помощью вычислительных экспериментов на кинетической модели, определяется корректным воспроизведением моделью экспериментальных данных.

Публикации (4 статьи в зарубежных рецензируемых научных журналах) полностью отражают содержание автореферата диссертации.

Замечания по автореферату:

1) Химизм (стадии k_6 , k_8 , k_{13} , k_{15} , k_{17} , k_{19} , k_{13} , k_{24} , k_{28} , k_{33} , k_{34} , k_{37} , k_{38} , k_{44}), а также вероятность реализации (k_{17} , k_{28} , k_{33}) ряда стадий кинетической схемы (стр. 4-6 автореферата) вызывают вопросы и, как минимум, нуждаются в комментариях;

2) Как нетрудно рассчитать из таблицы 2 (стр. 9-10 автореферата), отношение констант, k_8/k_{38} больше 10^5 (393 К, Cd), т.е. аддукт катализатора с гидропероксидом распадается исключительно радикально (о механизме радикального распада см. замечание 1). Это соответствует выводу 2 в диссертации, но зачем включать в схему стадии, кинетическая значимость которых околонулевая даже при повышенных температурах?

В целом, автореферат демонстрирует, что работа выполнена на актуальную тему, содержит результаты, которые обладают научной новизной и практической значимостью, диссертационная работа Новикова Н.А. соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, согласно п.п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г. (с последующими дополнениями). Можно с уверенностью констатировать, что Новиков Николай Александрович достоин присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ.

Доктор химических наук
по специальности 1.4.4 Физическая химия (02.00.04), профессор, заместитель
директора Уфимского института химии, обособленного структурного
подразделения Федерального государственного бюджетного научного
учреждения Уфимского федерального исследовательского центра
Российской академии наук, заведующий лабораторией химической физики
УФИХ УФИЦ РАН,


Заслуженный деятель науки Республики Башкортостан

Тел. + 7 917 432 24 26

e-mail: khursansl@anrb.ru, khursansl@gmail.com

Согласен на обработку персональных данных

04.12.2023


Хурсан Сергей Леонидович

Уфимский институт химии – обособленное структурное подразделение
Федерального государственного бюджетного научного учреждения
Уфимский Федеральный исследовательский центр Российской академии наук
(УФИХ УФИЦ РАН), 450054, г, Уфа, пр. Октября, 71, тел.: +73472355560,
сайт организации: www.ufaras.ru, e-mail организации: chemorg@anrb.ru

Подпись Хурсана Сергея Леонидовича заверяю

Ученый секретарь УФИХ УФИЦ РАН

к.х.н.



Выдрина В.А.

Вход. № 05 - 4832
« 11 » 12 2023 г.
подпись 