

Заключение диссертационного совета 24.2.312.03, созданного на базе
федерального государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования «Казанский национальный
исследовательский технологический университет»

Министерства науки и высшего образования Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 27.12.2023 г. №14

О присуждении Нурмуродову Тальату Шухрат угли, гражданину Республики Узбекистан, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Закономерности нестационарной и стационарной кинетики окисления кумола» по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ принята к защите 25.10.2023 г., протокол заседания №12, диссертационным советом 24.2.312.03, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования (ФГБОУ ВО) «Казанский национальный исследовательский технологический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68, приказ о создании диссертационного совета от 12.03.2010 г. №426-154 (приказом Минобрнауки России от 15.02.2013 г. №75/нк совет признан соответствующим действующему «Положению о совете....»; приказом Минобрнауки России №561/нк от 3.06.2021 г. диссертационному совету 24.2.312.03 установлены полномочия по защитах диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук на срок действия номенклатуры научных специальностей).

Соискатель Нурмуродов Тальат Шухрат угли, 16 июня 1996 года рождения, в 2021 г. окончил ФГБОУ ВО «КНИТУ» по направлению подготовки 15.04.04 «Автоматизация технологических процессов и производств» (квалификация – магистр). С 2021 г. и по настоящее время является аспирантом

очной формы обучения в ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет».

Диссертация выполнена на кафедре общей химической технологии ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Улитин Николай Викторович, заведующий кафедрой общей химической технологии ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет».

Официальные оппоненты:

Борецкая Августина Вадимовна, кандидат химических наук, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», старший научный сотрудник НИЛ Материалы для водородной энергетики и традиционной энергетики с низким углеродным следом / сектор аккумулирования водорода в жидком носителе Химического института им. А.М. Бутлерова,

Межуев Ярослав Олегович, доктор химических наук, доцент, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», заведующий кафедрой биоматериалов, –

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (г. Москва) в своем положительном отзыве, подписанном заведующей сектором, кандидатом технических наук Магомедовой Марией Владимировной, указала, что диссертация является законченной научно-квалификационной работой. В диссертации содержится решение актуальной задачи моделирования кинетики

реакции окисления кумола кислородом воздуха с целью оптимизации процесса и создания цифрового двойника для моделирования условий взрывоопасной эксплуатации производства. В работе приведены научные результаты, позволяющие интерпретировать их как имеющие существенное значение при эксплуатации существующих производств. Работа соответствует паспорту специальности 1.4.14. Кинетика и катализ. Диссертация по новизне, научной и практической значимости полностью отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней. Автор работы, Нурмуродов Талъат Шухрат угли, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ.

Соискатель имеет 15 опубликованных научных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 12 работ общим объемом 39 машинописных страниц (авторский вклад 90%), в том числе 2 статьи опубликованы в научных изданиях, включенных в перечень рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертационных работ, и 10 работ в материалах конференций. Авторский вклад соискателя в работах по теме диссертации заключается в кинетическом моделировании реакции окисления кумола, решении и анализе результатов обратных и прямых задач химической кинетики.

Основные публикации по теме диссертации:

1. Kharlampidi, Kh.E. The kinetic modeling of cumene oxidation taking into account oxygen mass transfer / Kh.E. Kharlampidi, K.A. Tereshchenko, T.Sh. Nurmurodov, D.A. Shiyan, N.P. Miroshkin, N.N. Ziyatdinov, A.S. Ziganshina, N.M. Nurullina, S.L. Khursan, N.V. Ulitin // Chemical Engineering Journal. – 2020. – V. 392. – Article 123811. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.123811>
2. Kharlampidi, Kh.E. Design of cumene oxidation process / Kh.E. Kharlampidi, T.Sh. Nurmurodov, N.V. Ulitin, K.A. Tereshchenko, N.P. Miroshkin, D.A. Shiyan, N.A. Novikov, O.V. Stoyanov, N.N. Ziyatdinov, T.V. Lapteva,

В диссертационной работе отсутствует заимствованный материал без ссылки на автора и(или) источник заимствования, а также результаты научных работ, выполненных в соавторстве, без ссылок на соавторов. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах.

На диссертацию и автореферат поступили положительные отзывы:

1. Д-ра хим. наук Усачевой Т.Р., доцента, зав. кафедрой общей химической технологии ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет» и канд-та хим. наук Граждан К.В., доцента, доцента той же кафедры. Имеются замечания: 1. Из текста автореферата непонятно, почему объемная доля кислорода в азотно-кислородной смеси варьировалась только от 5% до 21% и не использовались более высокие концентрации. 2. Непонятно, как результаты, полученные в аппарате колонного типа (стр. 10 и рисунок 6 автореферата), могут быть сопоставлены с результатами, полученными в каскаде из трех реакторов.

2. Д-ра хим. наук Хурсана С.Л., профессора, зам. директора Уфимского института химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, зав. лабораторией химической физики в том же учреждении. Имеются замечания: 1. Следовало бы объяснить причины, по которым кинетические модели, приведенные в главах 2 и 3, были верифицированы по разным экспериментальным данным. 2. Не исключено, что схема процесса окисления кумола (стр. 4-5 автореферата) может быть избыточна, по крайней мере, при определенных режимах проведения окисления. Анализ чувствительности констант скорости к изменению концентраций участников процесса был бы полезен для более полного понимания механизма окисления и способов регулирования процесса.

3. Д-ра хим. наук Сабирова Д.Ш., директора Института нефтехимии и катализа Уфимского федерального исследовательского центра Российской

академии наук, главного научного сотрудника лаборатории математической химии в том же учреждении. Имеются замечания: 1. При моделировании процесса, протекающего в промышленных условиях в стационарном режиме, прямая кинетическая задача была решена аналитически. Однако в автореферате не представлены полученные функциональные зависимости моделируемых компонент от времени. 2. В формально-кинетической схеме процесса, протекающего в стационарном режиме, не учтено изменение концентрации кислорода, растворенного в реакционной смеси. Такое допущение должно влиять на результаты вычислений. 3. Из автореферата диссертации остается неясным, учитывалось ли влияние температуры реакционной смеси на коэффициент массопередачи кислорода при его расчете. Хорошо известно, что температура оказывает существенное влияние как на растворимость кислорода в углеводородах, так и на массоперенос газов.

4. Д-ра техн. наук Галимова Э.Р., профессора, зав. кафедрой материаловедения, сварки и производственной безопасности ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева – КАИ». Имеются замечания: 1. Было бы целесообразным в рамках моделирования нестационарной кинетики окисления кумола рассмотреть также вопросы тепловой устойчивости реакторов. 2. В тексте автореферата имеются замечания редакционного характера.

5. Д-ра хим. наук Хайруллиной В.Р., доцента, профессора кафедры физической химии и химической экологии ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий». Имеются замечания: 1. Из схемы на стр. 4-5 не ясно, откуда появляется исходный реагент ROOH. 2. В тексте автореферата не обсуждаются существенные расхождения в теоретических и экспериментально известных значениях констант скорости k_1 , k_6 , k_{17} . 3. Из текста автореферата не ясно, на чем автор строит свои практические рекомендации, изложенные на стр. 16. 4. По тексту автореферата встречаются неудачные выражения, например «необрывающий путь рекомбинации пероксильных радикалов»,

«граница между областями, где возникает и не возникает нехватка кислорода».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их высокой профессиональной квалификацией, широкой известностью своими достижениями в области кинетики и катализа, наличием публикаций по проблематике, связанной с темой диссертации, компетенцией в вопросах, имеющих отношение к теме диссертации, и способностью определить научную и практическую ценность диссертации. Официальные оппоненты и ведущая организация не имеют совместных проектов и публикаций с соискателем.

Ведущая организация широко известна своими достижениями в области кинетики и катализа сложных химических реакций. Исследования в данной области отражены в публикациях ученых ведущей организации (Максимов А.Л., Магомедова М.В., Дементьев К.И. и др.) в международных и российских изданиях (Chemical Engineering Journal, Кинетика и катализ, Catalysts, Catalysis Communications, Industrial and Engineering Chemistry Research и др.).

Диссертационный совет отмечает, что наиболее существенные результаты, полученные лично соискателем, и их научная новизна заключаются в следующем:

разработаны теоретические положения, полученные с помощью моделирования кинетики и отражающие концептуальные представления о регулировании скорости гетерофазного окисления кумола молекулярным кислородом за счет влияющих на концентрацию кислорода в жидкой фазе факторов, о промышленной реализации и безопасном ведении процесса;

показано, что скорость целевой реакции в гетерофазном окислении кумола молекулярным кислородом не лимитируется скоростью переноса кислорода через границу раздела фаз, причем скорость химического процесса в целом определяется объемной скоростью подачи кислорода в реактор, а не

объемной долей кислорода в азото-кислородной смеси, от которой зависит движущая сила массопередачи;

показано, что реакторный узел окисления кумола в виде каскада из трех изотермических реакторов смешения непрерывного действия при температуре реакционной смеси 372 К в каждом аппарате каскада является оптимальным в аспекте компромисса между конверсией кумола, селективностью по целевому продукту и минимумом общегодовых затрат из расчета на единицу целевого продукта; *показано*, что для данного реакторного узла наиболее сильные отклонения температуры и концентраций компонентов реакционной смеси от их стационарных значений возникают при прекращении отбора пара из колонны разделения и прекращении циркуляции непрореагировавшего кумола.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

применительно к проблематике диссертации результативно использован комплекс общепринятых методов моделирования кинетики;

раскрыты закономерности нестационарной и стационарной кинетики гетерофазного окисления кумола молекулярным кислородом, которые формируют концептуальные представления о регулировании скорости химического процесса за счет влияющих на концентрацию кислорода в жидкой фазе факторов, о промышленной реализации и безопасном ведении процесса.

Значение полученных результатов для практики подтверждается тем, что определены перспективы их практического использования в качестве фундаментальной информации при проектировании новых и модернизации существующих производств гидропероксида кумола.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

теория, описывающая закономерности нестационарной и стационарной кинетики гетерофазного окисления кумола молекулярным кислородом, построена на воспроизводимых экспериментальных данных, полученных общепринятыми в этой области исследований синтетическими и аналитическими методами;

установлено качественное и количественное совпадение авторских результатов с экспериментальными данными, в том числе, представленными в независимых источниках по данной тематике.

Личный вклад соискателя состоит в сборе и анализе литературных данных, реализации решения задач исследования, анализе результатов, формулировании заключения и участии в написании и подготовке публикаций.

Диссертационное исследование соответствует паспорту специальности 1.4.14. Кинетика и катализ, а именно, п. 1 в части «Скорости элементарных и сложных химических превращений в гомогенных, микрогетерогенных и гетерогенных системах. Экспериментальные исследования и теория скоростей химических превращений.» и п. 6 в части «Нестационарные химические превращения.».

Результаты диссертационного исследования рекомендуется использовать в организациях, деятельность которых связана с исследованием и практической реализацией процессов химической переработки углеводородного сырья. Среди этих организаций *университеты*: Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева (г. Москва), Уфимский университет науки и технологий, Ивановский государственный химико-технологический университет, Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова; *институты РАН*: Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН (г. Москва), Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова (г. Москва), Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии (г. Черноголовка), Институт катализа им. Г.К. Борескова (г. Новосибирск), Уфимский институт химии, Институт нефтехимии и катализа (г. Уфа); *промышленные предприятия*: ПАО «Казаньоргсинтез», ПАО «Нижнекамскнефтехим».

Диссертационным советом сделан вывод, что диссертация соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней

(Постановление Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г., в действующей редакции).

На заседании 27.12.2023 г. диссертационный совет принял решение присудить Нурмуродову Тальату Шухрат угли ученую степень кандидата химических наук за решение задачи, важной для развития кинетики радикально-цепных химических процессов, по установлению закономерностей влияния массопереноса кислорода на кинетику гетерофазного окисления кумола молекулярным кислородом и границ контролируемого и неконтролируемого протекания данного процесса в условиях его промышленной реализации при оптимальных технологических и экономических критериях.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 7 докторов наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ, из 29 человек, входящих в состав совета, проголосовал: «за» – 20, «против» – нет, недействительных бюллетеней нет.

Заместитель

председателя

диссертационного совета



Бухаров Сергей Владимирович

Ученый секретарь

диссертационного совета



Терещенко Константин Алексеевич

27.12.2023 г.