

УТВЕРЖДАЮ

Заместитель директора по
научной работе ФИЦ ХФ РАН

д.ф.-м. н., Гришин М.В.



«13» февраль 2023 г.

ВЫПИСКА
ИЗ ПРОТОКОЛА № 12

расширенного заседания семинара лаборатории окисления углеводов
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Федерального исследовательского центра химической физики
им Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)
от 02 февраля 2023 г.

Председатель: главный научный сотрудник, заведующий лабораторией
окисления углеводов ФИЦ ХФ РАН, д.х.н. Арутюнов В.С.

Секретарь: старший научный сотрудник лаборатории окисления
углеводородов ФИЦ ХФ РАН, к.х.н. Никитин А.В.

Присутствовали: д.х.н., проф. Арутюнов В.С., д.ф.-м.н. Трошин К.Я.,
д.ф.-м.н. Власов П.А., д.ф.-м.н. Смирнов В.Н., к.х.н. Никитин А.В.,
к.ф.-м.н. Беляев А.А., к.х.н. Стрекова Л.Н., к.х.н. Козлов Ю.Н.,
к.ф.-м.н. Михайлов Д.И., Захаров А.А., Малышев Н.С., Озерский А.В.,
Зимин Я.С.

Повестка дня: обсуждение диссертационной работы Паланкоевой Анны
Сергеевны «Влияние давления и гетерогенных процессов на окислительный
крекинг легких алканов», представленной на соискание ученой степени
кандидата химических наук по специальности 1.4.14 — кинетика и катализ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Федерального исследовательского центра химической физики
им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)

Диссертация Паланкоевой Анны Сергеевны «Влияние давления и гетерогенных процессов на окислительный крекинг легких алканов» выполнена в лаборатории окисления углеводородов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН). В период подготовки диссертации соискательница Паланкоева Анна Сергеевна работала в должности младшего научного сотрудника, научного сотрудника лаборатории окисления углеводородов ФИЦ ХФ РАН. Также в период подготовки диссертации соискательница Паланкоева Анна Сергеевна работала в должности преподавателя факультета фундаментальной физико-химической инженерии МГУ имени М.В. Ломоносова.

В 2014 году Паланкоева А.С. начала свою трудовую деятельность в лаборатории окисления углеводородов ФИЦ ХФ РАН в должности младшего научного сотрудника. В 2015 году Паланкоева А.С. окончила МГУ имени М.В. Ломоносова по специальности «Химия». В этом же году Паланкоева А.С. поступила в аспирантуру МГУ имени М.В. Ломоносова. С 2022 года по настоящее время работает в должности научного сотрудника в лаборатории окисления углеводородов ФИЦ ХФ РАН.

Научный руководитель — Арутюнов Владимир Сергеевич, доктор химических наук, главный научный сотрудник лаборатории окисления углеводородов Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН).

После доклада состоялось обсуждение работы. Активно задавали вопросы и участвовали в обсуждении:

д.ф.-м.н. Власов П.А.

д. ф.-м.н. Трошин К.Я.

д.ф.-м.н. Смирнов В.Н.

к.ф.-м.н. Беляев А.А.

По докладу были заданы следующие вопросы:

1. д.ф.-м.н. Власов П.А.: Учитывает ли модель, которую вы использовали реакции азота?

2. к.ф.-м.н. Беляев А.А.: Пробовали ли вы применить рассчитанные коэффициенты аккомодации к другим алканам?

3. д. ф.-м.н. Трошин К.Я.: Каково отношение получаемых СО и СО₂?

4. д.ф.-м.н. Смирнов В.Н.: Как влияют на процесс гетерогенные реакции на поверхности в реакторах промышленного масштаба?

Докладчик подробно ответил на все поставленные вопросы.

По итогам обсуждения рассмотренной диссертации принято следующее заключение:

Личное участие соискателя. Представленные в диссертационной работе результаты получены лично автором или при его непосредственном участии. Экспериментальные исследования, в том числе отладка оборудования, проведение экспериментальных исследований, анализ состава реагентов и продуктов, моделирование и верификация полученных результатов проводились лично автором диссертации.

Степень достоверности результатов. Достоверность полученных экспериментальных результатов опирается на воспроизводимость массива данных, полученных с использованием базовых методов физико-химического анализа: газовая хроматография, спектральный анализ газовых

смесей на инфракрасных модулях. Достоверность расчётных данных опирается на использование литературных кинетических моделей, которые были верифицированы на результатах различных экспериментов по парциальному окислению лёгких углеводородов. Результаты моделирования были получены в программной среде Chemical Workbench, широко используемой для моделирования кинетических процессов.

Научная новизна. (1) Установлено, что изменение давления в области 1–15 атм. не влияет на термический пиролиз легких алканов. На основании этого сделан вывод о том, что влияние давления на окислительный крекинг легких алканов обусловлено его влиянием только на окислительные стадии этого процесса. (2) Показано, что для адекватного описания кинетики окисления алканов в условиях реакторов лабораторного масштаба необходим учет гетерогенных процессов на поверхности реактора с участием промежуточных кислородсодержащих соединений, и разработана методика учета соответствующих процессов. (3) Показано, что дополнение литературных кинетических моделей газофазного окисления легких алканов блоком реакций, описывающих взаимодействие газофазных компонентов с поверхностью реактора, позволяет количественно описывать кинетику этих процессов в условиях реальных реакторов лабораторного масштаба. (4) На основе сопоставительного анализа экспериментальных результатов и их моделирования установлены основные кинетические закономерности окислительного крекинга легких алканов в области низких температур 800–1100 К и давлений 1–5 атм.

Практическая значимость работы. Показана возможность количественного кинетического описания процессов окисления легких алканов в реакторах лабораторного масштаба. Это открывает возможность использования получаемых в них результатов для анализа закономерностей этих процессов в реальных условиях и их оптимизации.

Ценность научных работ соискательницы подтверждена в ходе их представления и обсуждения на следующих конференциях: Международная конференция IV International Conference «Current Problems of Chemical Physics» (г. Ереван, Армения 2015), III Всероссийская молодежная конференция "Успехи химической физики" (г. Черноголовка, Россия 2016), V Российская конференция с международным участием «Актуальные проблемы нефтехимии» (г. Звенигород, Россия 2016), XII Международная конференция молодых ученых по нефтехимии (г. Звенигород, Россия, 2018), XXXVI Всероссийский симпозиум молодых ученых по химической кинетике (пос. Поведники, Московская обл., Россия 2019), XXXIII Симпозиум «Современная химическая физика» (г. Туапсе, Россия 2021), MACSPro'2021 (Москва, Россия 2021), XXVIII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов 2021" (Москва, Россия 2021).

Содержание диссертации соответствует специальности 1.4.14 — кинетика и катализ.

По материалам диссертации опубликовано 14 печатных работ. Работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК — 5. Материалы диссертации полностью изложены в опубликованных работах.

Диссертация соответствует требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года и «Изменений, которые вносятся в Положение о присуждении ученых степеней», утвержденных постановлением Правительства Российской Федерации № 355 от 21 апреля 2016 года. Она является научно-квалификационной работой, в которой существенно расширены и уточнены существующие представления о влиянии давления и гетерогенных процессов на окислительный крекинг легких алканов. Диссертация Паланкоевой Анны

Сергеевны рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14 — кинетика и катализ.

Заключение принято на расширенном заседании семинара лаборатории окисления углеводов ФИЦ ХФ РАН. Присутствовало на заседании 13 чел. Результаты голосования:

«За» — 13

«Против» — нет

«Воздержалось» — нет

Председатель семинара
главный научный сотрудник,
заведующий лабораторией
окисления углеводов ФИЦ ХФ РАН
д.х.н., проф.

В.С. Арутюнов

Секретарь семинара
старший научный сотрудник лаборатории
окисления углеводов ФИЦ ХФ РАН
к.х.н.

А.В. Никитин

02 февраля 2023 года