



«УТВЕРЖДАЮ»

Заместитель директора ИХХС РАН

А.Б. Куликов

«01» июля 2026 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертацию *Багавеева Ильдара Маратовича* «Кинетика гомогенно-каталитического эпокси́дирования пропилена гидропероксидом кумола», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ

Диссертационная работа Багавеева И.М. посвящена исследованию и моделированию кинетики реакции гомогенно-каталитического эпокси́дирования пропилена гидропероксидом кумола.

Актуальность представленной автором работы обусловлена востребованностью оксида пропилена как сырья для получения полиуретанов, полиэфиров и стеклопласта, и отсутствием в открытых литературных источниках кинетических моделей для описания реакции и моделирования промышленного процесса эпокси́дирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденсодержащего катализатора.

Структура диссертации. Диссертация включает введение, литературно-аналитический обзор, экспериментальную часть, результаты и обсуждение. В завершении работы приведено заключение, список сокращений и обозначений.

Во **введении** обоснована актуальность работы, отмечена степень разработанности темы исследования, сформулирована цель работы и задачи, показана научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, представлена методология и методы исследования, отмечены выносимые на защиту положения, указан личный вклад соискателя в выполнение работы, приведен перечень конференций, на которых обсуждались результаты работы.

В качестве информационных приложений к диссертационной работе представлены различные таблицы и иллюстрации. Общий объем работы составляет 103 страницы, работа содержит 22 рисунка и 14 таблиц. Библиографический список насчитывает 124 наименования.

Глава 1 (Литературно-аналитический обзор) включает шесть разделов. Раздел 1.1 посвящен реализованным в промышленности процессам получения оксида пропилена, приведены условия проведения процессов, технологические схемы, указаны особенности, преимущества и недостатки схем. Раздел 1.2 дает представление о гомогенных катализаторах, которые используют для проведения реакции эпексидирования пропилена в присутствии гидропероксидов. В третьей части обзора (раздел 1.3) приведена информация существующих механизмах для описания реакции эпексидирования олефинов гидропероксидами в присутствии молибденовых катализаторов. В разделе 1.4 приведен обзор влияния природы растворителя для приготовления катализатора на протекание реакции эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола. В разделе 1.5 представлен перечень работ по математическому моделированию реакции, указаны особенности исследования кинетики и применяемых моделей. В разделе 1.6 дано краткое описание программного пакета, который предполагается использовать в работе для моделирования химико-технологической схемы, и сделан акцент на выбор модели для расчета термодинамических свойств системы. В завершении главы приведено обобщение информации, полученной на основе анализа литературных данных.

Глава 2 диссертационной работы (Экспериментальная часть) включает в себя три раздела. В разделе 2.1 приведены сведения об используемых для выполнения работы реактивах и материалах. Раздел 2.2 посвящен описанию методики получения гомогенного молибденсодержащего катализатора. В разделе 2.3 приведена методика проведения эксперимента по изучению закономерностей реакции эпексидирования пропилена в автоклавном реакторе.

Глава 3 посвящена результатам работы и их обсуждению, она включает три раздела.

Раздел 3.1 посвящен экспериментальному исследованию реакции и определению оптимальных условий ее проведения. Исследование реакции окисления пропилена проведено в реакторе автоклавного типа, с использованием гомогенного молибденсодержащего катализатора в присутствии гидропероксида кумола. Приготовление катализатора осуществляли путем растворения порошка металлического молибдена в смеси изопропилового спирта и оксидата кумола. В рамках работы автор исследовал влияние концентрации молибдена в растворе (3 точки), молярного соотношения изопропиловый спирт/ГПК=1 (3 точки) и пропилен/гидропероксид кумола (3 точки) и температуры (4 точки). На основе анализа результатов автором сделан вывод об оптимальных условиях проведения реакции: содержание молибдена в реакционной смеси составляет $5 \cdot 10^{-4}$ - $7.5 \cdot 10^{-4}$ г-ат Мо/моль ГПК, молярное соотношение изопропиловый спирт/ГПК 1 к 1, пропилен/ГПК 6 к 1, температура 388 К (115°C). В заданных условиях достигается конверсия гидропероксида кумола 94% и селективность по оксиду пропилена 84%.

Далее в разделе 3.2 автором представлены стехиометрические уравнения реакции, которые позволяют описать некаталитические (радикально-цепные) и каталитические стадии реакции эпоксицирования пропилена гидропероксидом кумола. В первом приближении схема включала в себя 17 некаталитических и 34 каталитических стадий, и решить обратную задачу химической кинетики для разработанной модели 1 автору не удалось. Поэтому количество элементарных стадий для каталитических стадий было сокращено вдвое и модель 2 включает в себя 34 стадии. Описание скоростей элементарных стадий осуществлено на основе закона действующих масс. Решение системы нелинейных дифференциальных уравнений осуществлено с применением неявного BDF метода 5-го порядка. Для модели 2 найдены значения кинетических параметров, построены кинетические кривые

изменения концентраций компонентов как для некаталитических, так и каталитических стадий. Проведена оценка чувствительности модели к изменению предэкспоненциального множителя и энергии активации с использованием интервалов неопределенности. С использованием метода неопределенности из модели 2 исключено 24 стадии. Итоговая механистическая модель включает в себя 12 стадий.

В разделе 3.3 автором проведено моделирование химико-технологической схемы с использованием современного программного обеспечения. При этом для расчета реактора использована формальная схема эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола на основе 9 молекулярных стадий. Для нее рассчитаны кинетические параметры и построены кинетические кривые. Приведена технологическая схема процесса с тремя последовательными реакторами смешения, ее описание. Проведен технологический расчет схемы и определена достигаемая конверсия гидропероксида кумола.

В **Заключении** автор обобщил полученные результаты и оценил степень выполнения поставленных задач и достижения цели исследования.

Научная новизна. Полученные результаты работы носят как фундаментальный, так и прикладной характер и являются оригинальными. В работе впервые проведены исследования кинетики реакции окисления пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденсодержащего катализатора и изопропилового спирта. На основе анализа полученных результатов впервые разработана кинетическая механистическая модель реакции, включающая в себя как некаталитические, так и каталитические стадии, проведен анализ чувствительности модели к изменению энергии активации предэкспоненциального множителя и выявлены наиболее значимые стадии. Кроме того автором, впервые разработана феноменологическая модель для описания реакции, включающая реакции образования оксида пропилена, распада гидропероксида кумола и пероксида

дикумила и получения 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенола и (1-изопропокси-1-метилэтил)бензола.

Представленные в работе **результаты имеют практическое значение** для отечественной нефтехимической промышленности. Разработанная механистическая модель гомогенно-каталитического окисления пропилена гидропероксидом кумола может быть в дальнейшем использована для разработки кинетических моделей процессов эпоксицирования других олефинов (например, октена-1, стирола) гидропероксидами различного строения в присутствии молибденсодержащих катализаторов. Предложенная феноменологическая модель может быть использована для расчета химико-технологической схемы промышленного процесса окисления пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденсодержащего катализатора и изопропилового спирта.

Теоретически значимым является то, что в результате выполненной работы получены данные о влиянии изопропилового спирта как компонента реакционной среды на показатели процесса окисления пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденсодержащего катализатора.

Достоверность результатов обеспечивается воспроизводимостью экспериментальных данных, применением современных методов физико-химического анализа для определения концентраций реагентов, применением современного подхода и программ для математического описания реакции, а также отсутствием противоречий с опубликованными литературными данными.

Апробация результатов исследований

Основные научные результаты диссертационной работы были представлены на Всероссийских и Международных конференциях (6 тезисов докладов), опубликованы в изданиях из перечня ВАК Минобрнауки России (3 статьи).

Стиль, язык и форма изложения не вызывают нарекания. Но в тексте иногда встречаются просторечия (например, с.6 – «научный базис», с. 17 –

«жесткие условия реакции», с. 52 – «резкий скачок температуры»). Во введении, с. 5 в разделе «Теоретическая значимость работы» несколько раз идет смысловой повтор текста.

Автореферат диссертации и публикации автора полностью отражают содержание и заключение, представленные в диссертационной работе.

Однако, несмотря на общее положительное впечатление о работе, к ней имеется ряд **вопросов и замечаний**:

1. В рамках представления результатов кинетических экспериментов (раздел 3.1) автор оперирует двумя понятиями – исходная концентрация молибдена в реакционной смеси (г-ат Мо на 1 моль гидропероксида кумола (ГПК)) и концентрация молибдена в гомогенном катализаторе. При равной исходной концентрации в реакционной смеси в соответствии с приведенными результатами (например, табл. 3.3) автор приводит разную концентрацию в растворе катализатора. Какой итоговой концентрации в катализаторе соответствует концентрация в реакционной смеси 5×10^{-4} г-ат Мо/моль ГПК?

2. Какой итоговый массив данных использовался для нахождения кинетических параметров разработанных моделей? Какое количество независимых экспериментов?

3. Может ли автор прокомментировать найденные значения кинетических параметров (табл. 3.7), с точки зрения физического смысла протекающих реакций? Какие стадии протекают наиболее быстро? Как рассчитанные значения согласуются с литературными данными для аналогичных реакций?

4. Насколько модель на основе 34 стадий с учетом радикально-цепного механизма, лучше описывает результаты экспериментальных исследований, чем модель на основе 9 молекулярных уравнений, использованная при расчете химико-технологической схемы?

5. Шаблон модели какого реактора (RKinetic, RStoic, RGibbs) в программном пакете Aspen использовалась при расчете химико-технологической схемы?

Отмеченные замечания нисколько не снижают общей высокой оценки диссертационной работы. Поставленные задачи решены в полном объеме с использованием современных экспериментальных и расчетных методов исследования, а сформулированные выводы надежны и достоверны.

Полученные И.М. Багавеевым научные результаты имеют существенное значение для катализа, нефтехимии, катализаторной и нефтеперерабатывающей промышленности и могут быть использованы в научно-исследовательских организациях и учебных заведениях, где проводятся работы, касающиеся исследования реакции получения оксида пропилена с использованием пероксидов различной природы: *Институте нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, Российском государственном университете нефти и газа имени И.М. Губкина, ПАО СИБУР, Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова* и других исследовательских центрах.

Полученные результаты также могут быть использованы профильными промышленными и проектными организациями для разработки исходных данных и создания отечественной технологии эпоксидирования пропилена в присутствии гидропероксида кумола и молибденсодержащего катализатора с получением оксида пропилена.

Диссертация Багавеева И.М. «Кинетика гомогенно-каталитического эпоксидирования пропилена гидропероксидом кумола» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, соответствующую пункту 1 – «Скорости элементарных и сложных химических превращений в гомогенных, микрогетерогенных и гетерогенных системах. Экспериментальные исследования и теория скоростей химических превращений» и пункту 2 – «Установление механизма действия катализаторов. Изучение элементарных стадий и кинетических закономерностей протекания гомогенных, гетерогенных и ферментативных каталитических превращений» паспорта специальности 1.4.14. Кинетика и катализ (химические науки) и требованиям п. 9-14 «Положения о

присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013 (в ред. от 11.09.2021). Автор диссертации Багавеев Ильдар Маратович заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ.

Отзыв подготовил:

Константин Игоревич Дементьев, кандидат химических наук по специальности 02.00.13 – Нефтехимия.

/ К.И. Дементьев /

01.06.2026



Отзыв на диссертацию заслушан и обсужден на секции Ученого совета ИНХС РАН «Нефтехимия, кинетика и катализ» 26 мая 2026 г, протокол №4.

Подпись К.И. Дементьева заверяю
И.о. Ученого секретаря ИНХС РАН, к.х.н.



Грушевенко Е.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук (ИНХС РАН)
Адрес: 119991, ГСП-1, г. Москва, Ленинский проспект, д. 29
Тел.: +7 (495) 955-42-01, e-mail: director@ips.ac.ru, сайт: <http://www.ips.ac.ru>

Вход. № 05-9022

« 10 » 06 2026 г.

подпись

