



Заместитель генерального директора по науке
Акционерного общества «Всероссийский
научно-исследовательский институт по
переработке нефти», доктор химических наук,
профессор,



Никульшин П.А.

«/ /» 2023 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Акционерного общества «Всероссийский научно-исследовательский институт по переработке нефти» на диссертационную работу **Ефимова Игнатия Ильича «Физико-химическое описание равновесий конденсированных фаз в углеводородных системах с участием полициклических соединений»**, представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Актуальность темы диссертационной работы.

Диссертационная работа посвящена вопросу изучения растворимости асфальтенов в многокомпонентных смесях нефтепродуктов. Актуальность работы обусловлена существенным влиянием асфальтенов на процессы нефтепереработки, так как в определенных условиях они приводят к образованию отложений, что негативно сказывается на работе технологического оборудования и уменьшает полезное сечение трубопроводов. Кроме того, асфальтены могут негативно влиять на качество товарных нефтепродуктов, таких как, судовое топливо. Изучение свойств асфальтенов позволяет разработать научно-технические решения, которые позволяют снизить риск образования отложений и увеличить эффективность процессов нефтепереработки. По этой причине физико-химические исследования данных систем и разработка моделей прогнозирования седиментационной устойчивости асфальтен-содержащих смесей являются крайне актуальными задачами. Наиболее эффективным путем решения этих задач является применение методов физико-химического моделирования и совершенствование физико-химических методов анализа.

Актуальность темы исследования также подтверждается тем, что данная работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ по НИР № 0792-2020-

0010 «Развитие научных основ инновационных технологий переработки тяжелого углеводородного сырья в экологически чистые моторные топлива и новые углеродные материалы с регулируемой макро- и микроструктурной организацией мезофазы».

Общая характеристика диссертационной работы.

Диссертация соискателя Ефимова И.И. состоит из четырех глав. В первой главе представлен анализ методов идентификации компонентов среднедистиллятных нефтепродуктов и моделей седиментационной устойчивости асфальтен-содержащих углеводородных систем, а также их недостатков. Приведен обзор моделей локального состава, а также их групповых модификаций. В качестве наиболее подходящей для физико-химического моделирования данных систем была выбрана модель UNIFAC. Во второй главе описаны используемые экспериментальные и расчетные методы, дана характеристика всех используемых образцов нефтепродуктов. Для расчетов приведены используемые формулы и наборы термодинамических параметров. В третьей главе путем совместного использования модели UNIFAC и хромато-распределительного метода проведена идентификация ароматических соединений среднедистиллятных нефтепродуктов. В четвертой главе на основе групповых теорий растворов разработана модель для описания диаграмм седиментационной устойчивости асфальтен-содержащих смесей углеводородов.

Новизна исследования и полученных результатов:

1. Экспериментально определены коэффициенты распределения полициклических ароматических соединений для 21 индивидуального вещества и 23 групп алкилпроизводных в системе растворителей гексан – ацетонитрил;
2. На основе определенных коэффициентов распределения продемонстрирована возможность их использования для идентификации ароматических соединений в хроматографическом анализе.
3. Предложен метод расчета группового состава асфальтенов с точки зрения модели UNIFAC на основе использования данных физико-химических методов анализа (криоскопия, элементный анализ, ЯМР, SARA анализ).
4. На основе группового состава асфальтенов предложена модель растворимости асфальтенов с использованием уравнения равновесия осадок-раствор и групповой модели растворов UNIFAC.

Теоретическая и практическая значимость результатов диссертации.

Полученные в ходе работы коэффициенты распределения могут использоваться для улучшения качества хроматографического анализа нефтепродуктов за счет увеличения достоверности идентификации индивидуальных полициклических ароматических

компонентов в ходе хроматографического анализа. Увлечение надежности идентификации ароматических компонентов позволяет построить более точную термодинамическую модель растворимости асфальтенов, так как именно полициклические соединения оказывают наибольшее влияние на растворимость в многокомпонентных смесях. При этом предложенный метод идентификации возможно использовать, как с масс-детектором, так и с другими методами идентификации, что существенно увеличивает гибкость метода.

Предложенная модель растворимости асфальтенов позволяет учитывать влияние химической структуры асфальтенов и состава нефтепродуктов-разбавителей на фазовые равновесия в многокомпонентных смесях нефтепродуктов. Основным преимуществом модели является возможность учета влияния состава нефтепродуктов-разбавителей на растворимость без необходимости определения дополнительных параметров модели.

Достоверность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации.

Степень обоснованности и достоверности результатов, полученных в диссертации Ефимова И.И., подтверждается значительным объемом расчетных и натурных экспериментов, а также детальной проработкой научно-технической литературы. Эксперименты проведены с использованием современных инструментальных методов анализа: криоскопии, ЯМР, элементный анализ, ГХМС. Для полученных значений приведены погрешности. Заключения, сделанные в работе, отражают сущность полученных результатов, являются обоснованными и достоверными.

Значимость полученных автором диссертации результатов для развития соответствующей отрасли науки

Предложенный в диссертации метод расчета диаграмм растворимости асфальтенов в многокомпонентных углеводородных смесях позволяет прогнозировать седиментационной устойчивость остаточных судовых топлив по данным о структуре и групповом составе основных компонентов. Таким образом открывается возможность целенаправленного поиск оптимальных составов компаундированных судовых топлив. Предложенный дополнительный идентификационный признак в форме коэффициента распределения позволяет существенно расширить возможности идентификации экологически опасных и седиментационно значимых компонентов в компаундированных топливах.

Рекомендации по использованию результатов работы

Методы идентификации полициклических ароматических соединений могут быть использованы при проведении поисковых исследований в центрах коллективного пользования профильных институтов и университетов:

- Санкт-Петербургский горный университет;
- Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина;
- Уфимский университет науки и технологий;
- Лаборатории по контролю качества нефтепродуктов и природных и сточных вод.

Предложенная модель растворимости асфальтенов может быть использована для прогнозирования стабильности компаундированных остаточных топлив как на нефтеперерабатывающих заводах, так и в проектных организациях.

Вопросы и замечания по диссертационной работе:

1. В разделе литературного обзора, посвященному седиментационной устойчивости топлив, недостаточно внимания удалено подходу к коллоидно-химическому подходку описанию седиментационной устойчивости этих систем;
2. В тексте диссертации было бы уместно привести полные тексты расчетных программ, используемых в диссертационной работе;
3. Хотелось бы увидеть, вытекающий из теоретических и экспериментальных результатов диссертации, перечень практических рекомендаций автора исследования для организаций, занимающихся производством и контролем качества нефтепродуктов;
4. Насколько автор диссертации уверен в однозначности определения структур асфальтенов, представленных на рисунке 15?
5. В чем основное преимущество предложенного метода расчета растворимости асфальтенов по сравнению с более простыми методами на основе соотношения SARA компонентов, таких как индексы стабильности и диаграмма Станкевича?

Указанные замечания и вопросы по диссертации Ефимова Игнатия Ильича не ставят под сомнение качество и основное содержание выполненного исследования, ценность полученных результатов и выводов.

Заключение

Диссертационная работа Ефимова Игнатия Ильича представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, выполненную автором на соответствующем экспериментальном и теоретическом уровне. Она представляет собой систематическое исследование, представляющее решение задачи термодинамического моделирования фазовых равновесий в углеводородных системах с участием полициклических соединений. Решение данной задачи имеет существенное значение для соответствующей отрасли науки и техники, а также для развития страны.

По актуальности, новизне, практической значимости и уровню проведенных исследований работа соответствует требованиям п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (с изменениями), а ее автор Ефимов Игнатий Ильич заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Диссертационная работа и отзыв рассмотрены и обсуждены на заседании «08» ноября 2023 г., протокол № 8.

Отзыв подготовил:

Начальник отдела контроля
качества и физических методов
исследования АО «ВНИИ НП»,
кандидат химических наук
(научная специальность 02.00.04
«Физическая химия»)

Таразанов
Сергей Вячеславович

Сведения об организации:

Полное наименование организации: Акционерное общество «Всероссийский научно-исследовательский институт по переработке нефти».

Адрес: 111116, г. Москва, Авиамоторная ул., д. 6, стр. 2

Телефон: +7 (495) 787-48-87

E-mail: info@vniinp.rosneft.ru

Сайт: <http://vniinp.ru/>

Подпись начальника отдела
контроля качества и физических
методов исследования
АО «ВНИИ НП»

к. х. н. Таразанова С.В. заверяю.

Начальник отдела по персоналу
и социальным программам



Филатова

Мария Константиновна

Согласован вручаемой организацией
22.11.2023 Ефимов И.И.