

ОТЗЫВ

научного руководителя о выпускной квалификационной работе студента магистратуры по направлению «Химия» (ВМ.5512.2019) кафедры химической термодинамики и кинетики Института химии СПбГУ

Александра Алексеевича Смирнова на тему: «Фазовое равновесие и критические явления в реакционной системе с участием н-бутилацетата»

Цели выпускной квалификационной работы направлены на получение новых экспериментальных данных о фазовых равновесиях в химически реагирующих многокомпонентных средах, теоретический анализ закономерностей фазового поведения (равновесия, процессов) систем с химическим взаимодействием компонентов, включая описание физико-химических свойств с применением методов термодинамического моделирования. В качестве объекта исследования выбрана система с реакцией синтеза н-бутилацетата. Экспериментальное изучение подобных систем было предпринято в рамках комплексного исследования фазовых и химических равновесий в многокомпонентных жидкофазных системах при политермических условиях, проводимого на кафедре Химической термодинамики и кинетики Института Химии СПбГУ. Помимо фундаментальной значимости, востребованность данных о фазовых равновесиях связана с совершенствованием ряда технологических процессов. Внедрение энерго- и ресурсосберегающих технологий в химическое производство, а также переход на возобновляемые источники энергии не могут быть осуществлены без полноценной базы научных данных. Широкое распространение идей «зеленой» химии и природоохранных проектов приводит к необходимости оптимизировать даже такие устоявшиеся производственные циклы, как получение, в частности, н-бутилацетата – широко используемых органических растворителей, а также добавок в косметических и парфюмерных продуктах. Более того, в последние годы практический интерес связан и с новыми задачами энергетики: производством биобутанола как альтернативного жидкого топлива. Свойства системы уксусная кислота – н-бутанол – н-бутилацетат – вода, с одной стороны, типичны для изученных ранее четырехкомпонентных систем с химическими реакциями (как правило, это также системы с реакциями этерификации/гидролиза сложного эфира), с другой стороны, расслаивание в двух бинарных подсистемах определяет более сложную структуру диаграмм состояния. Поставленные в ВКР задачи не только актуальны в силу их практической значимости, пополнения фундаментальной базы данных, но и в свете развития общей термодинамической теории реакционно-массообменных процессов.

Результаты работы являются новыми и нестандартными, получен массив экспериментальных данных о фазовых равновесиях в системе уксусная кислота – н-бутанол – н-бутилацетат – вода, проведен термодинамический анализ результатов, включая корреляцию с применением модели NRTL. Текст работы в полной мере отражает основное содержание исследований, достаточно иллюстративен (в текстовом и графическом отношении).

В работе приведен обзор ряда научных статей, подробно описан эксперимент, а также проведена теоретическая работа, основывающаяся на корреляции экспериментальных данных о равновесии жидкость-жидкость. В целом по результатам работы А.А. Смирновым опубликовано **13** работ, среди которых **2** статьи в международных высокорейтинговых журналах Q1 (Fluid Phase Equilibria и Journal of Chemical and Engineering Data).

Все это позволяет охарактеризовать А.А. Смирнова как квалифицированного специалиста, способного решать сложные физико-химические задачи, в первую очередь, в области термодинамических исследований сложных многокомпонентных систем. Считаю, что выпускная квалификационная работа А.А. Смирнова заслуживает оценки «отлично».

Научный руководитель:
кандидат химических наук, доцент,
кафедра Химической термодинамики и кинетики
Института Химии СПбГУ

20.05.2021



М.А. Тойкка