

## Рецензия

на итоговый отчет по проекту Овчинниковой Елены Викторовны  
«ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ  
ГЕТЕРОГЕННОГО КАТАЛИТИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА  
ОКИСЛЕНИЯ  $\beta$ -ПИКОЛИНА В НИКОТИНОВУЮ КИСЛОТУ»

Сопоставление заявленных целей и задач проекта с данными, представленными в итоговом отчете, позволяют сделать вывод об успешном выполнении запланированных в рамках проекта исследований и достижении желаемого результата. Проведенные исследования, безусловно, являются актуальными, а их научная новизна и значимость подтверждаются публикацией двух статей, описывающих наиболее важные результаты работы. Разработанная кинетическая модель адекватно описывает исследуемый процесс, что позволяет не сомневаться в корректности рассчитанных параметров промышленного трубчатого реактора.

На основании этих заключений считаю справедливым произвести финансирование по проекту в полном объеме.

Однако хотелось бы высказать несколько замечаний, которые в основном касаются формата промежуточного и итогового отчетов и подхода автора к представлению результатов.

- в отчете отсутствует информация об использованных методиках анализа. По моему мнению, необходимо было привести хотя бы ссылку на работы, где эти методики описываются. Ознакомление с опубликованными работами автора приводит к выводу о том, что анализ концентрации побочных продуктов реакции селективного окисления  $\beta$ -пиколина и самого субстрата проводятся напрямую, а содержание никотиновой кислоты определяется исходя из 100% материального баланса. С другой стороны, на странице 6 отчета присутствует фраза «Баланс по углероду был 92-98,7%», которая остается непонятной в условиях отсутствия данных о методиках анализа. Возможно, эта фраза вообще не относится к определению состава смеси?

- В итоговом и промежуточном отчетах, а также в работе *E.V.Ovchinnikova, T.V.Andrushkevich, React. Kinet. Catal. Lett. 96 (2009) 91* приведены значения «кинетических параметров» и соответствующих им «энергий активации» для разработанной кинетической модели процесса. Однако в финальном отчете автором была изменена нумерация стадий, что привело к некоторым затруднениям в сопоставлении этих данных с теми, которые были опубликованы в журнале *RKCL* и представлены в полугодовом отчете. В финальном отчете в ходе кинетических расчетов были учтены стадии, ранее не рассматривавшихся для отдельных продуктов, что, безусловно, является важным усовершенствованием модели (например,  $W_{NA} = w1 + w4 - w6 - w8$  в итоговом отчете, и  $W_{NA} = w1 + w3$  в промежуточном). Приведенные «кинетические параметры» K1-K18 автор называет «кинетические константы», что представляется не вполне корректным для большинства из них. Значения рассчитанных «энергий активации» для 6-ти кинетических параметров, приведенные в итоговом отчете, не соответствуют значениям, опубликованным в рецензируемом журнале. Можно предположить, что это связано с упомянутым выше более подробным рассмотрением автором кинетики процесса. Однако это должно следовать не из предположений читателя, а из текста отчета. Более того, приводя измененную кинетическую модель, автор ссылается на промежуточный отчет, в котором представлены заметно отличающиеся результаты.

- В этой же таблице имеется сноска «\*Параметры откорректированы для образца катализатора, который испытывался на пилотной установке», значение которой неоднозначно. Исходя из результатов, представленных в отчетах и публикациях автора, складывается впечатление, что для всех экспериментов (за исключением статьи *V.M.Bondareva, E.V. Ovchinnikova, T.V. Andrushkevich: React. Kinet. Catal. Lett., 93, 327, 2008,*

не имеющей отношения к данной работе) был использован один и тот же высоко-активный катализатор. Не понятно, что именно хотел сказать автор, приводя эту сноску.

- Насколько это становится ясным из текста отчета, 8 из 10-ти графиков на Рисунке 6 были приведены автором для демонстрации хорошей согласованности экспериментальных и расчетных значений выходов продуктов реакции. Однако на графиках представлены лишь конечные экспериментальные точки для выходов продуктов реакции. По-видимому, это связано с тем, что испытания проводились на пилотной установке, и анализ продуктов реакции на промежуточных этапах процесса не имеет большого значения с практической точки зрения. Но тогда становится непонятной мотивация включения этих графиков в финальный отчет. Не менее наглядным было бы представление экспериментальных и расчетных данных о выходах продуктов в конечной точке в виде таблицы. Характер изменения концентраций веществ, участвующих в процессе, уже был продемонстрирован на Рис. 3. Замена рисунка 6 небольшой таблицей или хотя бы совмещение результатов для разных режимов на одном графике представляются более оптимальным способом сэкономить место в тексте отчета, чем уменьшение других не менее информативных рисунков до размера, не позволяющего их рассмотреть.

- В некоторых местах отчет написан языком, не располагающим к легкому и четкому восприятию. Начиная с названия работы, текст отчета содержит опечатки, неточности и символы в непригодной для чтения кодировке.

Высказанные замечания не умаляют заслуг автора проекта и значимости полученных результатов и в основном носят рекомендательный характер.