

ОТЗЫВ

на автореферат кандидатской диссертации Капустина Ростислава Вячеславовича на тему: «Образование газо-жидкостных структур в тонких слоях некоторых органических систем», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности
1.4.4 Физическая химия

Диссертационная работа Р. В. Капустина раскрывает новые аспекты поведения органических соединений в тонких слоях вблизи твёрдых поверхностей. Работа выполнена на стыке нескольких научных направлений - физической химии поверхностных явлений, ИК-спектроскопии органических систем и квантовой химии, что определяет ее междисциплинарный характер и особую актуальность. Основное научное достижение автора заключается в экспериментальном обнаружении и всестороннем исследовании нового класса переходных состояний вещества, проявляющих одновременно свойства конденсированной и газовой фаз. Для решения этой сложной задачи была разработана уникальная методика, сочетающая прецизионную ИК-спектроскопию с оригинальным способом формирования тонких слоев. Особенностью методики является возможность контролируемого изменения толщины исследуемого слоя в диапазоне 0,1–6 мм с точностью до 2%, что обеспечивает высокую воспроизводимость результатов. Экспериментальная часть работы отличается комплексным подходом, включающим:

- ИК-спектральные исследования на современных Фурье-ИК-спектрометрах;
- морфологический анализ методом сканирующей электронной микроскопии;
- фундаментальное компьютерное моделирование с использованием методов квантовой химии.

Особую ценность представляют полученные автором новые данные о структурных особенностях переходных состояний для различных классов соединений. В работе впервые показано, что образование таких состояний является универсальным явлением, характерным как для простых галогеналканов, так и для сложных ароматических систем. При этом выявлены существенные различия в механизмах их формирования, обусловленные природой межмолекулярных взаимодействий. Теоретическая часть исследования включает разработку новой кластерной модели, успешно объясняющей наблюдаемые экспериментальные закономерности. Модель базируется на результатах квантово-химических расчётов, выполненных с использованием современных вычислительных методов и учитывающих вклад дисперсионных взаимодействий. Практическая значимость работы подтверждается возможностью применения полученных результатов в различных областях:

- создание новых каталитических систем с управляемой активностью;
- разработка перспективных мембранных материалов;
- конструирование химических сенсоров нового поколения.

Основные положения диссертации нашли отражение в серии публикаций в авторитетных международных изданиях, что свидетельствует об их признании научным сообществом. Отдельно следует отметить высокий методологический уровень исследования, строгую аргументацию выводов и тщательный анализ возможных источников погрешностей. Однако при детальном рассмотрении было выявлено несколько важных аспектов, требующих дополнительного обсуждения.

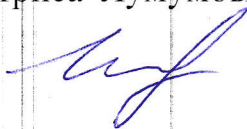
1. В работе не проведено разграничение между известными поверхностными явлениями (адсорбционные и квазижидкие слои) и предлагаемым новым состоянием вещества.

2. В расчётах использованы статические методы квантовой химии, тогда как динамика формирования кластеров (методами молекулярной динамики) не исследована.

Тем не менее, в целом диссертационная работа Р.В. Капустина представляет собой значительный вклад в развитие физической химии поверхностных явлений. Полученные результаты имеют фундаментальное значение и открывают новые перспективы для прикладных исследований. Работа выполнена на высоком профессиональном уровне, соответствует всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 "Физическая химия".

04.09.2025

Директор центра кристаллохимии и
структурного анализа ФГАОУ ВО
«Российский университет дружбы
народов имени Патриса Лумумбы»,
д.х.н., проф.



Цховребов Александр Георгиевич

Адрес: 117198, ул. Миклухо-Маклая, д.6

Телефон: 8-985-0684586

e-mail: tskhovrebov-ag@rudn.ru

Подпись А.Г. Цховребова заверяю:

Зам. декана по научной работе ФФМиЕН ФГАОУ ВО

"Российский университет дружбы
народов имени Патриса Лумумбы"



Голубенкова А.С.