

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 посвящена актуальной проблеме современной физической химии, связанной с исследованием переходных фазовых состояний в тонких слоях органических соединений. Актуальность данного исследования определяется как фундаментальной значимостью изучения межфазных явлений, так и перспективами практического применения результатов в области создания новых функциональных материалов и каталитических систем.

В ходе проведенного исследования автором разработана оригинальная методика изучения переходных фазовых состояний с использованием модифицированной ИК-спектральной ячейки переменной толщины. Данная методика характеризуется высокой точностью измерений с погрешностью, не превышающей 2–3%, что позволяет надежно контролировать процесс формирования тонких слоев при стандартных условиях (температура ≈ 298 К, давление 1 атм.).

Экспериментальная часть работы выполнена с применением современного оборудования, включая высокочувствительные ИК-Фурье спектрометры с оптическими ячейками для разных фазовых состояний, сканирующий электронный микроскоп, а также программный комплекс для квантово-химических расчетов Gaussian 09. Использование такого комплекса методов обеспечило высокую достоверность полученных результатов.

Р. В. Капустиным впервые получены убедительные экспериментальные доказательства существования переходных фазовых состояний для трех принципиально различных классов органических соединений: хлоралканов (тетрахлорметан, трихлорметан, дихлорметан), полярных жидкостей (ацетонитрил, метанол, ацетон) и ароматических систем (бензол, тиофен, фуран). Эти результаты существенно расширяют современные представления о поведении веществ в тонких слоях вблизи твердой поверхности.

Особого внимания заслуживает проведенный автором детальный анализ влияния различных типов межмолекулярных взаимодействий на формирование переходных фазовых состояний. Установлены количественные характеристики этих взаимодействий: энергия водородных связей в полярных системах составляет 5–25 кДж/моль, энергия π - π взаимодействий в ароматических соединениях — 8–15 кДж/моль, энергия галогенных связей в хлоралканах — 3–10 кДж/моль.

Теоретическая часть работы включает разработку кластерной модели переходных фазовых состояний, которая подтверждена комплексом квантово-химических расчетов с использованием методов DFT/B3LYP и MP2 с базисом 6-311++G(2d,2p) и учетом дисперсионных поправок по Гримме. Эта модель

представляет собой значительный вклад в развитие теории фазовых превращений.

Практическая значимость исследования подтверждается возможностью применения полученных результатов в различных областях, включая создание мембранных материалов с контролируемыми транспортными свойствами, разработку новых каталитических систем и конструирование сенсорных устройств. Основные результаты работы опубликованы в 8 статьях в высокорейтинговых журналах, реферируемых в базах Scopus и Web of Science.

Вместе с тем, следует отметить, что в работе недостаточно подробно рассмотрено влияние материала твердой поверхности на процесс формирования переходных фазовых состояний. Также требует более детального изучения температурная зависимость свойств исследуемых систем в широком диапазоне температур. Эти аспекты могли бы составить предмет дальнейших исследований.

Диссертационная работа Р. В. Капустина представляет собой завершенное научное исследование, выполненное на высоком академическом уровне. Полученные результаты обладают существенной новизной и имеют важное теоретическое и практическое значение. Работа полностью соответствует всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 "Физическая химия".

02.09.2025 г.

ФГБОУ ВО «Московский
авиационный институт (НИУ)»,
д.х.н., проф. кафедры 903
«Перспективные материалы и
технологии аэрокосмического
назначения»

Кыдралиева Камиля Асылбековна

Адрес: 125993, г. Москва, Волоколамское ш., д. 4
Телефон: +916 5855671; e-mail: kydralievaka@mai.ru

Подпись Кыдралиевой К.А. заверяю:

зам.нач. отдела кадров

