

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.340.04,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Н.И.  
ЛОБАЧЕВСКОГО», ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ  
СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 16.09.2025 г., протокол заседания № 5

О присуждении Капустину Ростиславу Вячеславовичу, гражданину РФ, учёной степени кандидата химических наук.

**Диссертация** «Образование газо-жидкостных структур в тонких слоях некоторых органических систем», **в виде рукописи**, по специальности 1.4.4. – Физическая химия (химические науки) принята к защите 02.07.2025 (протокол заседания № 2) диссертационным советом 24.2.340.04, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», Российская Федерация, 603022, Нижегородская область, г. Нижний Новгород, проспект Гагарина, д. 23 (приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 561/нк от 03.06.2021).

Соискатель — Капустин Ростислав Вячеславович, 12 сентября 1996 года рождения. В 2018 году соискатель окончил бакалавриат образовательно-научного института физико-химических технологий и материаловедения федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева» по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология», диплом о высшем образовании №105205 1388480.

В 2020 году с отличием окончил магистратуру образовательно-научного института физико-химических технологий и материаловедения федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева» по направлению подготовки 18.04.01 «Химическая технология», диплом о высшем образовании №105205 0065359.

В 2020 году соискатель поступил в очную аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева» по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки». В 2024 году окончил очную аспирантуру, диплом об окончании аспирантуры от 30.09.2024 №105205 0002799.

В период подготовки диссертации с 1 октября 2020 года по 30 сентября 2024 года проходил обучение в очной аспирантуре на кафедре «Технология электрохимических производств и химия органических веществ» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева».

С 3 августа 2023 года по 30 сентября 2024 года основное место работы — научно-исследовательская лаборатория инженерной химии научно-исследовательского института химии федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского», в должности лаборанта-исследователя.

С 21 октября 2024 года по настоящее время основное место работы — научно-исследовательская лаборатория инженерной химии научно-исследовательского института химии федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского», в должности инженера.

**Диссертация выполнена** на кафедре «Технология электрохимических производств и химия органических веществ» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева» и в научно-исследовательской лаборатории инженерной химии научно-исследовательского института химии федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского».

**Научный руководитель** – доктор химических наук, профессор кафедры «Технология электрохимических производств и химия органических веществ» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева» Гринвальд Иосиф Исаевич.

**Официальные оппоненты:**

1. **Кузнецова Ольга Владимировна**, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник, заведующая лабораторией физико-химических исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт металлоорганической химии им. Г. А. Разуваева Российской академии наук»;

2. **Ягофаров Михаил Искандерович**, доктор химических наук, доцент кафедры физической химии химического института, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией физико-химических основ осаждения тонких органических плёнок Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет»

дали **положительные отзывы на диссертацию.**

**Ведущая организация** – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный университет нефти и газа (Национальный

исследовательский университет) им. И. М. Губкина», кафедра физической и коллоидной химии, в своём положительном отзыве, подписанном Семеновым Антоном Павловичем, кандидатом технических наук (специальность 05.17.07), ведущим научным сотрудником кафедры физической и коллоидной химии Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный университет нефти и газа (Национальный исследовательский университет) им. И. М. Губкина», Винокуровым Владимиром Арнольдовичем, заведующим кафедрой физической и коллоидной химии Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный университет нефти и газа (Национальный исследовательский университет) им. И. М. Губкина», указала, что диссертация Капустина Ростислава Вячеславовича на тему «Образование газо-жидкостных структур в тонких слоях некоторых органических систем» соответствует паспорту специальности 1.4.4. – Физическая химия (химические науки) по следующим пунктам: пп. 1. «Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик», пп. 11. «Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твёрдых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных сред и белковом окружении». По своей актуальности, уровню проведённых исследований, научной и практической значимости, степени обоснованности научных положений и выводов, а также достоверности, диссертационная работа Р.В. Капустина на тему «Образование газо-жидкостных структур в тонких слоях некоторых органических систем» полностью соответствует всем требованиям, установленным п. 9–14 «Положения о присуждении учёных степеней» к кандидатским диссертациям,

утверждённого Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842. Автор диссертации, Капустин Ростислав Вячеславович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Соискатель имеет 69 опубликованных работ, в том числе 23 работы по теме диссертации, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 9 работ.

**Недостоверные сведения в списке трудов, об опубликованных соискателем учёной степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, в диссертации Капустина Р.В. отсутствуют.**

**Наиболее значимые работы по теме диссертации:**

Статьи:

1. Grinvald, I.I. DFT Simulation of Cluster Structures in Organic Systems / I.I. Grinvald, **R.V. Kapustin**, A.I. Agrba, M.D. Agrba // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2023. – Т. 97 – № 12 – С. 2749–2754 – doi:10.1134/S0036024423120129.

2. **Kapustin, R.** Formation of intermediate gas-liquid system in aromatics' thin layers / **R. Kapustin**, I. Grinvald, A. Vorotyntsev, A. Petukhov, V. Vorotyntsev, S. Suvorov, A. Barysheva // Journal of the Serbian Chemical Society. – 2023. – Т. 88 – № 3 – С. 267–281 – doi:10.2298/JSC211003087K.

3. **Kapustin, R.V.** Transient Phase State of Organic Liquids in Thin Layers / **R.V. Kapustin**, I.I. Grinvald, A.V. Vorotyntsev, A.N. Petukhov // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2022. – Т. 96 – № 12 – С. 2606–2611 – doi:10.1134/S0036024422120160.

4. **Kapustin, R.V.** Oxidation of chlorosilanes by atmospheric air in thin layers / **R.V. Kapustin**, I.I. Grinvald, A.V. Vorotyntsev, A.N. Petukhov, V.I. Pryakhina, I.V. Vorotyntsev // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. – 2022. – Т. 135 – № 2 – С. 835–846 – doi:10.1007/s11144-022-02177-y.

5. Grinvald, I.I. The Formation Mechanism and Structure of Organic Liquids in the DFT Challenges / I.I. Grinvald, I.Y. Kalagaev, **R.V. Kapustin** // Density Functional Theory - Recent Advances, New Perspectives and Applications / под ред. D. Glossman-Mitnik. – London: IntechOpen, 2022. – doi:10.5772/intechopen.100429.

6. Grinvald, I.I. IR detection of the methane halides fluid-like state at ambient conditions / I.I. Grinvald, **R.V. Kapustin** // Journal of the Serbian Chemical Society. – 2021. – Т. 86 – № 11 – С. 1067–1074 – doi:10.2298/JSC210426048G.

7. Grinvald, I.I. Self-association of carbon tetrachloride in gas and condensed phase / I.I. Grinvald, I.Y. Kalagaev, A.N. Petukhov, A.V. Vorotyntsev, **R.V. Kapustin** // Structural Chemistry. – 2019. – Т. 30 – № 5 – С. 1659–1664 – doi:10.1007/s11224-019-01349-2.

8. Grinvald, I.I. IR Manifestation of Non-Covalent Interaction in Organic Liquids / I.I. Grinvald, I.Y. Kalagaev, A.N. Petukhov, **R.V. Kapustin** // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2019. – Т. 93 – № 13 – С. 2645–2649 – doi:10.1134/S0036024419130107.

9. Grinvald, I.I. Association of Haloforms in Condensed and Gas Phases. IR Spectroscopy and DFT Calculations / I.I. Grinvald, I.Y. Kalagaev, A.N. Petukhov, A.I. Grushevskaya, **R.V. Kapustin**, I.V. Vorotyntsev // Journal of Structural Chemistry. – 2018. – Т. 59 – № 2 – С. 313–320 – doi:10.1134/S0022476618020087.

**На диссертацию и автореферат поступили отзывы от:**

**Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный университет нефти и газа (Национальный исследовательский университет) им. И. М. Губкина»,** кафедра физической и коллоидной химии, ведущей организации. В качестве **замечаний** отмечено следующее:

1. В работе при описании теоретической и практической значимости диссертационной работы уделяется недостаточное внимание роли тонких слоёв для получения систем с заданными электрофизическими свойствами,

которые являются весьма перспективными для развития современной электроники.

2. Следовало более подробно рассмотреть в диссертационной работе различие и сходство переходного газо-жидкостного состояния в тонких слоях с адсорбционными слоями органических жидкостей на твёрдой поверхности.

3. Доказательства сохранения в течение длительного времени переходного фазового состояния хлорпроизводных кремния, чувствительных к кислороду и влаге воздуха, внутри устойчивых капсул оксида кремния в тонких слоях на твёрдой поверхности недостаточно убедительны, поскольку такое поведение систем может быть связано с образованием тонких плёнок оксида кремния, покрывающих и защищающих от превращений тонкий слой исходных хлорпроизводных.

4. При интерпретации ИК-спектральных результатов в случае хлорпроизводных этана и пропана необходимо было привести более подробное теоретическое обоснование отнесений в спектрах тонких слоёв при различных условиях их образования.

5. Недостаточно обосновано использование метода функционала плотности с приведёнными функционалами для описания механизма межмолекулярного связывания в органических кластерах с точки зрения дальнедействующего характера этих взаимодействий.

6. При обсуждении результатов квантовохимических расчётов следовало привести сравнение полученных в диссертации результатов с выводами расчётов подобных систем, описанных в литературе.

**Кузнецовой Ольги Владимировны**, доктора химических наук, ведущего научного сотрудника, заведующей лабораторией физико-химических исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт металлоорганической химии им. Г. А. Разуваева Российской академии наук», официального оппонента. В качестве вопросов и замечаний отмечено следующее:

1. В тексте диссертации встречаются терминологические неточности, например, «характеристические газовые и жидкостные спектральные полосы...» (стр. 38, 40, 47).

2. В экспериментальной части на стр. 48 при описании разработанной методики диссертант пишет: «По окончании эксперимента ЯПТ (ячейка переменной толщины) оставлялась с открытыми отверстиями на 1–48 часов до полного исчезновения следов вещества из ячейки, что также контролировалось при помощи высокочувствительных ИК-спектральных методов». Необходимо отметить, что инфракрасная спектроскопия является менее чувствительной по сравнению с другими спектроскопическими методами, например, спектроскопией в ультрафиолетовом и видимом диапазонах. Обнаружение следовых количеств вещества представляет собой сложную задачу. Проводилась ли дополнительная очистка поверхности оптических окон ячейки между экспериментами?

3. В экспериментальной части для всех методик генерирования тонких слоёв указаны времена формирования этих слоёв, определённые благодаря ИК-спектральному количественному анализу для исследуемых веществ. К сожалению, в экспериментальной части не указаны характеристики полос поглощения, которые были использованы в качестве критерия сформированного тонкого слоя в каждом эксперименте.

4. Обсуждение результатов: подпись к рисунку 3.3, стр. 71: исходный спектр 1 – не указано расстояние между оптическими окнами в ячейке переменной толщины, для спектра 3 указано ошибочное расстояние между оптическими окнами - 3 мм (возможно 1 мм?). Поэтому обсуждение результатов на стр. 71 – 72 трудно сопоставить со спектрами на рисунке.

5. В качестве оптических окон в ячейке переменной толщины были использованы окна из бромида калия (преимущественно), иодида цезия и селенида цинка. Первые два материала имеют высокую гигроскопичность. Были ли попытки оценить влияние адсорбированной на поверхности оптических окон воды на процессы формирования переходного фазового

состояния? В целом на механизм межмолекулярного связывания при формировании ПФС влияет атмосферная влага? Большинство экспериментов проводилось в течении многих часов в негерметичных кюветах в неинертной атмосфере.

6. На стр. 47-48 диссертант делает вывод об относительной стабильности формирующихся ПФС, не зависящей от внутреннего давления в газожидкостной системе органических соединений. На сколько сильно изменяется внутреннее давление при последовательном сжатии-расширении внутреннего пространства кюветы?

**Ягофарова Михаила Искандеровича**, доктора химических наук, доцента кафедры физической химии химического института, старшего научного сотрудника, заведующего лабораторией физико-химических основ осаждения тонких органических плёнок Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», официального оппонента. В качестве вопросов и замечаний отмечено следующее:

1. Литературный обзор недостаточно структурирован; автор делает акцент на проблемах, имеющих косвенное отношение к диссертации (например, процессы личинга и концепция «коктейля» катализаторов), в то время как существующий опыт в исследованиях газофазных кластеров (Applied Physics B 72 (2001) 507–513; Physical Chemistry Chemical Physics 13 (2011) 5855–5871), тонких плёнок (ChemPhysChem 8 (2007) 2513–2519), их спектральных характеристиках – а именно это основной предмет работы – отражён не в полной мере. С рядом рассуждений, приводимых в обзоре, я не могу согласиться. Так, на страницах 17–18 автор подробно анализирует энергетику межмолекулярных взаимодействий, вследствие которой жидкости могут быть устойчивы по отношению к процессу испарения: «Охлаждённые и сжатые газы становятся жидкими благодаря межмолекулярным взаимодействиям, которые называют взаимодействиями Ван-дер-Ваальса, или ван-дер-ваальсовыми. Энергию этого взаимодействия можно определить как

теплоту испарения жидкости, а точнее – разность между температурой испарения и работой расширения одного моля газа при атмосферном давлении. Величина этого взаимодействия при температуре кипения газов составляет 1–3 кДж/моль». Во втором предложении фрагмента описывается вычитание величин разных размерностей. В третьем предложении автор не учитывает, что мольная величина энергии ван-дер-Ваальсовых взаимодействий зависит от размера молекулы и может быть заметно больше, чем 1–3 кДж/моль в случае, к примеру, циклогексана. Далее автор утверждает, что основной вклад в энтальпию испарения вносят неклассические специфические взаимодействия, включая неклассическую водородную связь в жидких углеводородах, ссылаясь на модель, предложенную в цитируемой работе [66]. Как утверждает автор, согласно результатам [66], величина энтальпии неклассической водородной связи СН-С может достигать 3–10 кДж/моль. Однако этот расчёт в работе [66] напрямую следует из нетрадиционных представлений об участии пятикоординированного атома углерода в межмолекулярных взаимодействиях, отказа от стандартной модели гибридизации и предположения, что энтальпия испарения есть сумма всех энтальпий неклассических водородных/донорно-акцепторных связей (см. положения 1–5 на стр. 31–32 работы [66]). Дальнейшее использование этой модели автором приводит к фактическим ошибкам в интерпретации ИК-спектров, о которых пойдёт речь далее.

2. Не могу согласиться с интерпретацией дублета в области 760–800  $\text{см}^{-1}$  в жидком и газообразном тетрахлометане как следствием изменения симметрии молекулы до  $C_{3v}$  (стр. 55–56 и 70–72). В частности, диссертантом предлагается образование кластеров  $(CCl_4)_n$  в жидкой и газовой фазах из-за образования дополнительной слабой связи С–Сl с пятикоординированным атомом углерода. Аналогичные гипотезы о наличии неклассических водородных и галогеновых связей и искажении тетраэдрической геометрии центрального выдвигаются автором применительно к газообразным и жидким хлорсиланам (стр. 96–99). Структура тетрахлоридов элементов IV группы в

различных фазах подробно изучена экспериментально (нейтронная дифракция) и теоретически (см. *The Journal of Chemical Physics* 114 (2001) 8082–8090; *Molecular Physics* 37 (1979) 1297–1304; *The Journal of Chemical Physics* 130 (2009) 064503). Отклонения от тетраэдрической симметрии вследствие изменения координационного числа центрального атома, описываемые диссертантом, неизвестны. Гипотетические экстремально короткоживущие состояния могут проявлять дополнительные характеристические полосы в ИК-спектре, но их ширина, в соответствии с принципом неопределённости, составляла бы сотни и более  $\text{см}^{-1}$ . Ошибка в интерпретации спектра  $\text{CCl}_4$  в области  $760\text{--}800\text{ см}^{-1}$  обусловлена учётом наличия комбинационного поглощения из-за деформационных и валентных колебаний ( $\nu_1+\nu_4$ ) вдобавок к пику валентных колебаний  $\text{C--Cl}$  ( $\nu_3$ ). Положения и интенсивности пиков дополнительно изменены вследствие резонанса Ферми (*Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 58 (2002) 1013–1023). Усложнение спектральной картины также может быть следствием концентрационной зависимости эффектов, обусловленных резонансом Ферми (*The Journal of Chemical Physics* 73 (1980) 3600–3606), нарушения симметрии из-за наличия нескольких изотопов хлора, ван-дер-Ваальсовыми взаимодействиями между молекулами, которые диссертантом не обсуждаются. Аналогичное замечание касается интерпретации ИК-спектров плёнок ацетонитрила, в случае которого, как известно, дополнительная полоса к валентному колебанию  $\text{C}\equiv\text{N}$  в области  $2260\text{--}2300\text{ см}^{-1}$  также обусловлена комбинационным поглощением (*ChemPhysChem* 8 (2007) 2513–2519). Учёт этих фактов необходим для однозначной интерпретации спектров поглощения, полученных диссертантом.

3. Обсуждая особенности межмолекулярных взаимодействий в жидком дихлорметане на стр. 74, диссертант утверждает: «Наблюдаемые различия в изменениях спектральной картины тонкого слоя ЧХУ и ДХМ могут быть объяснены особенностями межмолекулярных взаимодействий в структуре тонкого слоя этих систем. Как уже упоминалось выше, невалентное

связывание в тонком слое ДХМ существенно ослаблено из-за того, что разделение зарядов на атомах в молекуле уменьшается. Это приводит к ослаблению галогеновой связи, которая по своей природе имеет  $\pi$ -характер и существенно прочнее межмолекулярных  $\sigma$ -связей». Большинство галогеновых связей имеет  $\sigma$ -характер (Chemical Reviews 116 (2016) 5072–5104). Межмолекулярные  $\sigma$ -связи, например водородные связи в димерах карбоновых кислот, зачастую прочнее, чем межмолекулярные  $\pi$ -связи, образующиеся, к примеру, при взаимодействии небольших ароматических систем. Поэтому непонятна ссылка автора на характер связей. Также хотелось бы отметить, что галогеновая связь в традиционном понимании между одинаковыми частицами (например, хлоралкан-хлоралкан) весьма незначительна по величине (см. данные о паре FCl – ClF ( $E_{св} \approx 2$  кДж·моль<sup>-1</sup>) в работе ChemistrySelect 5 (2020) 554–563); электронное окружение донора и акцептора прочной галогеновой связи должны сильно отличаться.

4. В главе 4 обсуждается влияние температуры, при которой происходит генерирование плёнок, и вакуумирования на спектры плёнок при комнатной температуре. Однозначной интерпретации наблюдаемых результатов поспособствовали бы а) измерение давления внутри ячейки и б) измерения ИК-спектров тонких плёнок при различных температурах. Монотонное изменение характеристик флюида с вариацией давления и температуры позволило бы исключить влияние артефактов, рассеяния на микрокаплях, неравновесности процесса формирования плёнок; увеличение температуры должно усиливать проявление газоподобных свойств системы. Отсутствие таких экспериментов является недостатком работы.

5. При вакуумировании, которое должно вести к уменьшению концентрации вещества в ячейке, напротив, уменьшается пропускание в плёнках CCl<sub>4</sub> в области 720–840 см<sup>-1</sup> (стр. 89–90, рис. 4.2). Автор делает единственный вывод: «Таким образом, межмолекулярные взаимодействия в тонком слое ЧХУ приводят к существенному снижению летучести вещества при обычных условиях за счёт образования кластерного слоя в системе». Этот

вывод затем повторяется в вышеуказанном п. 4 Заключения применительно к вопросу о летучести. Строго говоря, термин «летучесть» синонимичен термину «фугитивность». Фугитивность паров не изучалась в работе. По всей видимости, термин «летучесть» используется диссертантом в другом, к сожалению, нерасшифрованном значении, что затрудняет понимание вывода из работы. Уменьшение летучести в «житейском» понимании не объясняет уменьшения пропускания в плёнках  $\text{CCl}_4$  в области  $720\text{--}840\text{ см}^{-1}$  при вакуумировании системы.

6. В главе 5 с помощью методов квантовой химии рассчитаны энергии образования кластеров исследуемых молекул в газовой фазе. Автор подводит её итог следующим образом: «Таким образом, квантовохимические расчёты... предсказывают возможность образования элементов кластерных форм с одной, двумя, тремя и бóльшим числом связанных молекул... При этом их ИК-спектры, полученные в расчёте, соответствуют полученным экспериментально, с небольшими смещениями полос по частоте. Следует отметить, что при увеличении связанных молекул в кластере происходит рост энергии межмолекулярного взаимодействия. Это может означать, что в реальной системе, содержащей большое число молекул, может происходить существенная стабилизация основного состояния. Кроме того, одновременно с ростом энергии связывания, расчёт представляет спектральные характеристики кластеров такими же, как и для изолированных молекул». Увеличение количества взаимодействующих молекул априори приводит к увеличению энергии межмолекулярных взаимодействий. В расчёте на одну молекулу энергия зачастую составляет менее  $2\text{ кДж/моль}$ . В таком случае доля таких кластеров в газовой фазе должна быть слишком мала, чтобы каким-то образом отразиться на ИК-спектрах. Для подтверждения или опровержения гипотезы о существовании кластеров рассматриваемых соединений заданной структуры в экспериментальных условиях и соотнесения расчётов с ИК-спектроскопией было бы разумно оценить не только энергии связей, но и энтропии ассоциации, константы газофазного равновесия, доли кластеров и их

вклад в спектральные характеристики. Для части рассмотренных систем имеются также литературные данные о термодинамике димеризации в газовой фазе – как расчётные, так и экспериментальные (метанол, ацетон, ацетонитрил, пиридин). Диссертант мог провести анализ соответствия между собственными и литературными данными. Так, согласно литературным данным о равновесии ассоциации метанола (The Journal of Physical Chemistry A, 669 (2024) 6382–6391), объёмная доля димеров при давлении насыщенных паров метанола при 298.15 К составляет 0.6 %, тримеров – 0.005 %, тетрамеров – 0.002 %. Для других систем, рассматриваемых диссертантом, энергии межмолекулярных взаимодействий и доли кластеров ниже, а соответствующие сигналы в ИК-спектрах гораздо менее выражены, что ставит под вопрос применимость предложенной кластерной модели, упомянутой в положении 6, выносимом на защиту: «Кластерная модель формирования ПФС, предложенная на основании квантовохимических расчётов в рамках методов ТФП и МП2».

7. Текст диссертации содержит много опечаток, часто встречаются нарушения согласования в числе и падеже, не всегда аккуратно оформлены рисунки. Начиная с рис. 3.10, расшифровки буквенных обозначений полос и цифровых обозначений спектров поглощения присутствуют лишь в тексте, но не в легенде рисунка, что затрудняет анализ результатов.

**Сысоева Алексея Александровича**, доктора физико-математических наук, профессора кафедры «Молекулярная физика» (№10) Института лазерных и плазменных технологий федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ». В качестве вопросов и замечаний отмечено следующее:

1. В автореферате недостаточно представлен сравнительный анализ полученных результатов с известными литературными данными о поведении органических жидкостей в тонких слоях. Было бы полезно добавить краткое

обсуждение сходств и различий с работами других авторов, изучавших аналогичные системы.

2. Практические приложения результатов (например, в катализе) описаны обобщённо; целесообразно конкретизировать примеры внедрения.

**Кыдралиевой Камили Асылбековны**, доктора химических наук, профессора кафедры 903 «Перспективные материалы и технологии аэрокосмического назначения» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский авиационный институт (НИУ)». В качестве вопросов и замечаний отмечено следующее:

1. В работе недостаточно подробно рассмотрено влияние материала твёрдой 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.

**Кузнецова Виталия Владимировича**, доктора химических наук, профессора, главного научного сотрудника федерального государственного бюджетного учреждения науки РАН «Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии Наук», и **Германа Константина Эдуардовича**, доктора химических наук, заведующего лабораторией химии технеция, главного научного сотрудника федерального государственного бюджетного учреждения науки РАН «Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии Наук». В качестве вопросов и замечаний отмечено следующее:

1. В работе исследуются три группы органических соединений, однако в автореферате недостаточно чётко аргументирован именно такой подбор веществ. Было бы уместно привести более развёрнутое обоснование, почему для изучения ПФС были выбраны именно хлоралканы, полярные жидкости и ароматические соединения, а также почему в качестве

контрольных объектов взяты хлорсиланы. Это позволило бы лучше понять логику экспериментальной части работы.

2. Хотя в автореферате указано, что результаты воспроизводимы, отсутствуют конкретные данные о количестве повторений экспериментов и статистической обработке полученных спектральных данных. Добавление этой информации повысило бы доказательную базу работы и убедительность выводов. В частности, было бы полезно указать: количество независимых экспериментов для каждого соединения, диапазон вариаций наблюдаемых характеристик, методы статистической обработки ИК-спектральных данных.

**Цховребова Александра Георгиевича**, доктора химических наук, профессора, директора центра кристаллохимии и структурного анализа ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы». В качестве вопросов и замечаний отмечено следующее:

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.

**Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается** их высоким профессионализмом и компетентностью в соответствующих отраслях науки, наличием у оппонентов и сотрудников ведущей организации современных публикаций в рецензируемых журналах. Оппоненты и сотрудники ведущей организации являются высококвалифицированными специалистами в научных областях, связанных с тематикой диссертации.

**Диссертационный совет отмечает**, что на основании выполненных соискателем исследований:

- **разработана** экспериментальная методика фиксации переходных фазовых состояний методами ИК-спектроскопии, применимая к различным органическим и неорганическим соединениям;

- **предложена** кластерная модель формирования переходных фазовых состояний на основании компьютерного квантовохимического моделирования строения, свойств и спектральных характеристик кластеров некоторых органических жидкостей в рамках методов теории функционала плотности и теории возмущений Мёллера–Плессета второго порядка;

- **доказана** возможность обнаружения переходных фазовых состояний органических систем, сочетающих в себе газовые и жидкостные ИК-спектральные характеристики, для органических жидкостей с различным механизмом межмолекулярных взаимодействий в тонких слоях вблизи твёрдой поверхности экспериментальными методами ИК-спектроскопии;

- **введено** новое понятие переходных газо-жидкостных фазовых состояний в тонких слоях вблизи твёрдой поверхности при обычных условиях для некоторых органических соединений.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

- **доказаны** существование переходных фазовых состояний вблизи твёрдой поверхности для некоторых органических систем и возможность изменения соотношения газо-жидкостных свойств таких систем при нормальных условиях;

- **применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использованы** современные методы исследования, включающие ИК Фурье-спектроскопию, для генерирования переходных фазовых состояний вблизи твёрдой поверхности для некоторых органических систем при различных условиях формирования тонкого слоя;

- **изложены** доказательства изменения физико-химических свойств органической системы в тонком слое вблизи твёрдой поверхности;

- **раскрыта** определяющая роль межмолекулярных взаимодействий при формировании фазового состояния органических систем с газо-жидкостными свойствами;

- **изучены** механизмы формирования переходных фазовых состояний органических систем на основании результатов квантово-химических расчётов;

- **проведена модернизация** существующих представлений о межмолекулярных взаимодействиях для некоторых органических систем в тонких слоях вблизи твёрдой поверхности при обычных условиях.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

- **разработана** экспериментальная методика обнаружения для некоторых органических жидкостей переходного фазового состояния, возникающего в тонких слоях вблизи твёрдой поверхности при нормальных условиях и сочетающего в себе газо-жидкостные свойства;

- **определена** роль условий генерирования переходных фазовых состояний на соотношение и изменение газо-жидкостных ИК-спектральных характеристик некоторых органических систем;

- **созданы** подходы к получению переходных фазовых состояний в тонких слоях для экспериментального определения ИК-спектральных характеристик переходных фазовых состояний, применимые к различным органическим и неорганическим соединениям;

- **представлены** предложения по выбору условий для экспериментального определения ИК-спектральных характеристик переходных газо-жидкостных фазовых состояний некоторых органических соединений в тонких слоях вблизи твёрдой поверхности.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

- **для экспериментальных работ** достоверность результатов подтверждается использованием современного высокочувствительного

метода анализа, их воспроизводимостью, согласованностью с результатами, полученными в квантово-химических расчётах;

- **теория** построена на достоверных, проверяемых данных и согласуется с ранее опубликованными в литературе результатами по теме диссертации;

- **идея базируется** на анализе и обобщении литературных данных и на накопленном к настоящему времени на кафедре «Технология электрохимических производств и химия органических веществ» НГТУ им. Алексеева и в лаборатории инженерной химии НИИ химии ННГУ им. Лобачевского опыте работы в области ИК-спектрального анализа и квантово-химических расчётов органических систем с различными типами межмолекулярного связывания;

- **использованы** научные концепции тонких слоёв вблизи твёрдой поверхности в гетерогенном катализе и переходного фазового состояния в сверхкритических флюидах, которые были ранее описаны в работах других научных групп;

- **установлено**, что полученные автором результаты дополняют и расширяют сведения о межмолекулярных взаимодействиях органических соединений, имеющиеся в научной литературе;

- **использованы** современные методы физико-химического анализа и компьютерного моделирования: ИК Фурье-спектроскопия, сканирующая электронная микроскопия, квантово-химические расчёты в рамках теории функционала плотности и теории возмущений Мёллера–Плессета второго порядка с использованием ПО «GAUSSIAN».

**Личный вклад** соискателя состоит в разработке методики генерирования и ИК-спектрального контроля формирования переходных фазовых состояний в тонких слоях для различных классов соединений, исследовании характеристик переходных фазовых состояний методами ИК-спектроскопии, интерпретации полученных результатов, проведении квантово-химических расчётов в программном комплексе «GAUSSIAN»,

участии в обсуждении экспериментальных данных, в том числе на конференциях различного уровня, и в подготовке к публикации научных статей.

**В ходе защиты диссертации членами диссертационного совета критические замечания высказаны не были. Были заданы вопросы о материале оптических окон, его гигроскопичности и возможном взаимодействии адсорбированной воды с исследуемыми веществами; о терминологическом и методологическом определении переходных фазовых состояний; об анализе ИК-спектральных характеристик фазовых переходов; о разработанных экспериментальных методиках регистрации ИК-спектров тонких слоёв органических систем на твёрдой поверхности; о практическом применении переходных газо-жидкостных структур; об определении толщины исследованных тонких слоёв на твёрдой поверхности; о чистоте реагентов; об использованной в методиках разветвлённой поверхности; о кластеризации бензола и её экспериментальном анализе; о воспроизводимости сверхкритических фазовых эффектов в тонких слоях на твёрдой поверхности при обычных условиях; об анализе температурной зависимости исследованных газо-жидкостных структур; о смачиваемости материала оптических окон; о полиадсорбционных слоях на поверхности оптических окон; о методике генерирования тонких слоёв хлорзамещённых силана; о возможном гидролизе хлорзамещённых силана на воздухе; об анализе кинетики газо-жидкостных фазовых переходов.**

Соискатель Капустин Р.В. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привёл собственную аргументацию, основанную на изученных литературных данных, личном экспериментальном опыте и фундаментальных основах физической и органической химии.

На заседании 16 сентября 2025 г. диссертационный совет принял решение: за разработку подходов к получению и выявление основных свойств и механизма формирования переходных газо-жидкостных фазовых состояний в тонких слоях некоторых органических систем присудить Капустину Р.В.

учёную степень кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия (химические науки).

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из которых 6 докторов наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящего в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 15, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель диссертационного  
совета 24.2.340.04

д.х.н., проф



*Княз*

Князев Александр Владимирович

Учёный секретарь диссертационного  
совета 24.2.340.04

д.х.н.

*Андрей*

Созин Андрей Юрьевич

16 сентября 2025 г.