

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Российский государственный университет
нефти и газа (национальный
исследовательский университет)
имени И.М. Губкина»
(ГУБКИНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)



119991, г. Москва, Ленинский просп., д. 65, корп. 1
Телефон: (499) 507-88-88 (многоканальный);
E-mail: com@gubkin.ru; http://www.gubkin.ru
ОКПО 02066612; ОГРН 1027739073845
ИНН/КПП 773609312/773601001

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе
РГУ нефти и газа (НИУ)
имени И.М. Губкина

П.К. Калашников



2025 г.

24 августа 2025 г. № 2/1234
на № _____ от _____

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу Капустина Ростислава Вячеславовича
«Образование газо-жидкостных структур в тонких слоях некоторых органических
систем», представленную на соискание учёной степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4. «Физическая химия»

Общая характеристика работы

Диссертационная работа Капустина Р.В. посвящена исследованию физико-химических особенностей образования тонких слоев с переходными газо-жидкостными свойствами для некоторых органических систем при обычных условиях вблизи твёрдой поверхности и на ней. В рамках диссертационного исследования разработаны подходы к генерированию таких газо-жидкостных состояний с использованием ИК-спектрального мониторинга образования и структуры этих систем. Показано, что переходное фазовое состояние возникает для разных классов органических соединений, а соотношение свойств газовой и жидкой фазы может меняться в зависимости от условий проведения эксперимента. Установлено, что в тонких слоях на твёрдой поверхности происходит существенное изменение физико-химических свойств органических соединений, а именно, реакционной способности, летучести и механизма межмолекулярного связывания. На основе полученных результатов предложена модель образования переходного газо-жидкостного состояния, как единой системы связанных кластеров с инкапсулированными несвязанными молекулами. С использованием квантово-химических расчетов в рамках теории функционала плотности с полной оптимизацией геометрии системы и учётом дисперсионных взаимодействий подтверждена возможность образования в газо-жидкостной системе структурных элементов с двумя, тремя и большим числом связанных молекул. Сформулированные цель и задачи соответствуют выводам диссертации, результаты изложены полно и последовательно.

Актуальность темы

Выбранная автором тема диссертационной работы является актуальной в связи с необходимостью фундаментальных исследований переходных газо-жидкостных состояний органических систем в тонких слоях, образование которых является неизученной до сих пор стадией некаталитической активации подобных систем при их превращениях на твердой поверхности. Выбранные автором соединения, во-первых, представляют собой различные классы, отличающиеся между собой механизмом межмолекулярного связывания, что позволяет выявить природу кластерных взаимодействий в газо-жидкостных состояниях. Во-вторых, выбранные соединения имеют большую практическую значимость, поскольку используются в качестве основных компонентов в различных химических синтезах. Прикладное направление рассматриваемой темы включает в себя подходы к некаталитической активации органических компонентов, что является перспективным для промышленной реализации экономических и экологически безопасных базовых органических синтезов.

Научная новизна

В рамках выполнения диссертации разработаны подходы к генерированию переходных фазовых состояний в тонких слоях вблизи твердой поверхности для органических систем при различных условиях формирования тонкого слоя, ранее не описанные в литературе. Впервые зафиксировано существование переходных фазовых состояний и возможность изменения соотношения газо-жидкостных свойств органических систем в тонких слоях. Также впервые показана возможность изменения свойств органических соединений в тонком слое вблизи твердой поверхности при формировании фазового состояния с газо-жидкостными свойствами. На основании результатов квантовохимических расчетов предложена кластерная модель образования переходных состояний органических систем.

Практическая и теоретическая ценность

Работа представляет собой экспериментальное подтверждение существования для органических жидкостей переходного фазового состояния, подобного сверхкритическому флюиду, сочетающего в себе газо-жидкостные свойства, но не в критических, а при нормальных условиях. Это позволяет расширить представления о фазовых превращениях органических соединений, а также роли межмолекулярных взаимодействий при описании механизма таких процессов. Полученные результаты могут быть использованы для создания подходов к некаталитической активации компонентов при проведении органического синтеза.

Достоверность результатов и выводов

Работа выполнена методологически правильно, диссертация обеспечена высоким теоретическим и экспериментальным уровнем исследований, воспроизводимостью результатов, системным подходом к анализу работ в области физической и органической химии, применением современного высокоточного оборудования, а также традиционных методов и подходов к представлению и обработке экспериментальных и расчетных данных.

Содержание

Структурно диссертация состоит из введения, литературного обзора, экспериментальной части, трех глав обсуждения результатов, выводов и списка

цитируемой литературы, включающего 215 наименований. Основное содержание работы изложено на 142 страницах машинописного текста, содержит 98 рисунков и 19 таблиц.

Во введении дано обоснование актуальности темы, сформулированы цели и задачи теоретического и экспериментального исследования, научная новизна, практическая значимость работы, а также возможные области применения полученных результатов.

Первая глава посвящена аналитическому обзору научной литературы. В ней рассмотрены основные предпосылки для изучения тонких слоёв как физико-химического феномена применительно к органическим системам, выделены классы органических соединений, сложная супрамолекулярная структура которых является следствием особенностей межмолекулярных взаимодействий, изложены результаты работ по применению ИК-спектральных и квантовохимических расчётов для исследования переходных фазовых состояний.

Во второй главе обоснован выбор объектов исследования, представлены ИК-спектральные характеристики, измеренные для рассмотренных систем в газовой и жидкой фазах, описан разработанный подход к генерированию переходных фазовых состояний, а также методы квантовохимических расчётов в рамках теории функционала плотности с использованием программного комплекса «GAUSSIAN».

В третьей главе описаны особенности образования и структуры газо-жидкостного состояния в тонких слоях вблизи твёрдой поверхности, для выбранных органических жидкостей.

В четвертой главе представлены примеры изменения физико-химических свойств органических систем при образовании тонких слоев на твёрдой поверхности.

В пятой главе представлены результаты квантово-химических расчётов кластеров органических молекул в рамках теории функционала плотности с полной оптимизацией геометрии системы и использованием потенциала, учитывающего дисперсионные межмолекулярные взаимодействия. Эти расчеты позволили автору вывести модель образования и структуры газо-жидкостного состояния органических систем.

В конце диссертации представлены выводы, которые обобщают результаты исследования.

Автореферат полностью отражает содержание диссертационной работы.

По диссертационной работе имеется ряд замечаний:

1. В работе при описании теоретической и практической значимости диссертационной работы уделяется недостаточное внимание роли тонких слоев 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 твердой 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 твердой поверхности недостаточно убедительны, поскольку такое поведение систем может быть связано с образованием тонких пленок 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 интерпретации сигналов в спектрах тонких слоев при различных условиях их образования.

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

6. При обсуждении результатов квантовохимических расчетов следовало привести сравнение полученных в диссертации результатов с расчетами подобных систем, описанными в литературе.

Указанные замечания не снижают научной достоверности и практической ценности результатов.

Рекомендации по практическому использованию результатов диссертационной работы

Полученные в диссертации Р. В. Капустина научные результаты могут быть рекомендованы к ознакомлению и практическому использованию в научных и образовательных организациях, где ведутся фундаментальные исследования в области фазовых превращений компонентов органического синтеза, в том числе в ННГУ им. Н.И. Лобачевского, РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, РХТУ им. Д.И. Менделеева, ИМХ РАН и др.

Заключение

Диссертация Капустина Ростислава Вячеславовича на тему «Образование газожидкостных структур в тонких слоях некоторых органических систем» является законченной научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований содержится решение научной задачи по исследованию природы и механизма формирования переходных газожидкостных фазовых состояний в тонких слоях органических систем вблизи твердой поверхности методами ИК-спектроскопии и квантовой химии, что имеет существенное значение для развития физико-химических основ молекулярных превращений органических систем. Диссертация соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки) по 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, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных сред и белковом окружении».

По своей актуальности, уровню проведенных исследований, научной и практической значимости, степени обоснованности научных положений и выводов, а также достоверности, диссертационная работа Капустина Ростислава Вячеславовича полностью соответствует всем требованиям, установленным п. 9–14 «Положения о присуждении ученых степеней» к кандидатским диссертациям (утв. Постановлением

Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842). Автор диссертации, Капустин Ростислав Вячеславович, заслушивает присуждения учёной степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

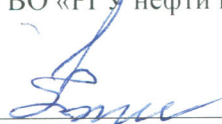
Диссертация и автореферат Р.В. Капустина «Образование газо-жидкостных структур в тонких слоях некоторых органических систем» обсуждены, а отзыв заслушан и утвержден на заседании кафедры физической и коллоидной химии федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина» (протокол № 8 от 02.07.2025 г.).

Ведущий научный сотрудник кафедры физической и коллоидной химии
ФГАОУ ВО «РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина»
Кандидат технических наук (специальность 05.17.07)



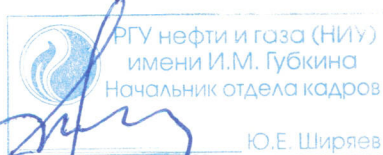
Семенов Антон Павлович

Заведующий кафедрой физической и коллоидной химии
ФГАОУ ВО «РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина»



Винокуров Владимир Арнольдович

«2» июля 2025 г.



Адрес:
119991, г. Москва, проспект Ленинский, дом 65, корпус 1,
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский государственный университет нефти и газа
(национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина»
Телефон: +7 (499) 507-88-88;
Электронная почта: com@gubkin.ru