

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

(РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина)

119991, г. Москва, Ленинский просп., д. 65, корп. 1, телефон: (499) 507-88-88 (многоканальный)
ОКПО 02066612; ОГРН 1027739073845; ИНН/КПП 7736093127/773601001
E-mail: com@gubkin.ru; <http://www.gubkin.ru>



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе
К.т.н., доцент

П. К. Калашников **П. К. Калашников**

27» *декабрь* 20 *20* г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу «Образование газо-жидкостных структур в тонких слоях некоторых органических систем» Капустина Ростислава Вячеславовича, 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 экономичных 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 твёрдой поверхности при формировании фазового состояния с газо-жидкостными свойствами. На основании результатов квантовохимических расчётов 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 расчётных 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 газожидкостного 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 газожидкостного 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 газожидкостного 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 дальнодействующего характера этих взаимодействий.

6. При обсуждении результатов квантово-химических 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 газо-жидкостных 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 газо-жидкостных фазовых состояний в тонких слоях органических систем вблизи твёрдой 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, твёрдых 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.

Диссертационная работа «Образование газо-жидкостных структур в тонких слоях некоторых органических систем» Капустина Ростислава Вячеславовича, автореферат и отзыв были рассмотрены, обсуждены и одобрены на заседании кафедры физической и коллоидной химии (протокол № 3 от 22.01.2026).

Ведущий научный сотрудник кафедры
физической и коллоидной химии,
ФГАОУ ВО «РГУ нефти и газа (НИУ) имени
И.М. Губкина», к.т.н. (специальность 05.17.07),
доцент

А.П. Семенов

Заведующий кафедрой физической и
коллоидной химии ФГАОУ ВО «РГУ нефти и газа (НИУ)
имени И.М. Губкина»,
д.х.н. (02.00.13 (1.41.12) «Нефтехимия»),
профессор

В.А. Винокуров
«23» января 2026 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;

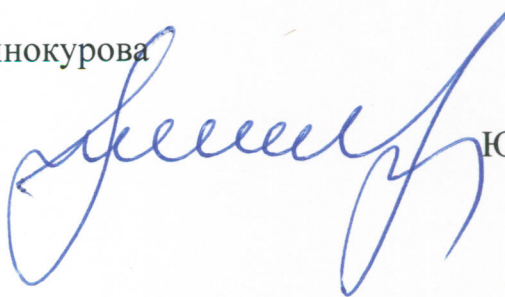
Электронная почта: com@gubkin.ru

Рабочий телефон: +7 (499) 507-85-41

e-mail: semenov.a@gubkin.ru

Подпись А.П. Семенова и В.А. Винокурова
заверяю:

Начальник отдела кадров



Ю.Е. Ширяев

