

Отзыв

на автореферат диссертации Ягофарова Михаила Искандеровича «Новые подходы к исследованию температурных зависимостей термодинамических функций фазовых переходов органических неэлектролитов», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Знание величин изменения энтальпии и энергии Гиббса фазовых переходов органических соединений в широком диапазоне значений температуры требуется в ряде областей химии и, особенно, химической технологии. Экспериментальные методы определения термодинамических параметров процессов требуют использования дорогостоящего оборудования и большого количества человеко-часов; соответственно, надежные методы расчета изменения энтальпии и энергии Гиббса процессов плавления, растворения и сублимации органических неэлектролитов являются крайне востребованными. Таким образом, работа Ягофарова М.И., посвященная разработке новых расчётно-экспериментальных подходов для определения энтальпий и энергий Гиббса фазовых переходов органических неэлектролитов, является в высшей степени актуальной.

Для разработки и совершенствования методологии прогнозирования термодинамических функций автором использован ряд надежных экспериментальных теоретических методов, а также проведена грандиозная работа по сбору и обработке литературных данных.

В диссертации предложены экспериментальные и расчётные методы оценки температурных зависимостей энтальпий плавления, термодинамических свойств органических неэлектролитов в квазиравновесном жидком состоянии между 298.15 К и $T_{пл}$, которые могут быть использованы для критического анализа термодинамических данных, параметризации температурных зависимостей растворимостей, скоростей нуклеации и роста кристаллов, описания термодинамического состояния глубоко переохлаждённых, сверхстабильных стекол. Также предложены способы расчёта энтальпий испарения при 298,15 К и при произвольной температуре, которые могут использоваться при расчёте энтальпий образования в идеальной газовой фазе для изучения стабильности, электронных эффектов в органических молекулах сложного строения и проверки корректности квантово-химических расчётов.

29 статей в рецензируемых научных журналах (в изданиях, относящихся к Q1 и Q2), опубликованные за последние 5 лет, свидетельствуют о достаточной полноте представления материалов диссертации в научной периодике. Результаты, полученные в

диссертации, прошли достойную апробацию на конференциях различного уровня, в т.ч. международного, а также получили положительную оценку Дж. Чикоса, видного специалиста в области химической термодинамики, являющегося разработчиком подхода к теоретической оценке разности теплоемкости фаз, широко используемого для вычисления значений изменения энтальпии фазового перехода при разных температурах.

Есть единственный вопрос по диссертации: установлено ли автором наличие изоравновесного эффекта при исследованиях компенсации изменения энергии Гиббса и энтальпии?

Считаю, что диссертация М.И. Ягофарова «Новые подходы к исследованию температурных зависимостей термодинамических функций фазовых переходов органических неэлектролитов», представленная на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, выполнена на превосходном уровне, и по актуальности темы, новизне, объему, научному и практическому значению полученных результатов, обоснованности сделанных выводов и уровню исполнения соответствует требованиям п. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г.), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, а ее автор, Ягофаров Михаил Искандерович, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Старший научный сотрудник

кафедры общей химической технологии

ФГБОУ ВО «Ивановский государственный

химико-технологический университет»

доктор химических наук (1.4.4. Физическая химия

1.4.1. Неорганическая химия)

153000 Иваново, Шереметевский пр. 7

Телефон: +7(915)821-85-62

e-mail: ggamov@isuct.ru

Гамов Георгий

Александрович