

О Т З Ы В

на автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора химических наук Ягофарова Михаила Искандеровича
НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ИССЛЕДОВАНИЮ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ОРГАНИЧЕСКИХ НЕЭЛЕКТРОЛИТОВ (1.4.4. Физическая химия)

В условиях возрастающей потребности в исследовании термодинамических характеристик фазовых переходов органических соединений, вызванной как увеличением числа неисследованных соединений, так и ограниченностью кадровых и материальных ресурсов, перспективным является применение предсказательных подходов в качестве альтернативы дорогостоящим экспериментальным методикам. Необходимость в разработке новых подходов для определения энтальпий и энергий Гиббса фазовых переходов в зависимости от температуры подчеркивает **актуальность** данного диссертационного исследования. Несмотря на активное развитие экспериментальных подходов к определению термодинамических параметров фазовых переходов, значительные временные затраты делают их монопольное применение в этом направлении маловероятным. Вероятно, эффективнее передать решение большого объема рутинных, но необходимых задач для накопления критической информации расчетным методикам, основанным на фундаментальных экспериментальных данных.

Диссертационная работа М.И. Ягофарова нацелена на разработку комплекса новых расчетно-экспериментальных методов, основанных на совмещении концепций и инструментов термодинамики растворов и термодинамики фазовых переходов. Цель работы состоит в установлении температурных зависимостей энтальпий и энергий Гиббса фазовых переходов органических неэлектролитов.

В своей диссертационной работе исследователь предложил ряд новых или модифицированных методов расчета и экспериментов, которые позволяют качественно и количественно характеризовать сложные системы, переживающие фазовые переходы при широком диапазоне параметров состояния. Среди разработанных подходов особенно стоит отметить следующие:

- Создание общей схемы исследования температурных зависимостей энтальпий плавления органических неэлектролитов на основе

применения методов калориметрии растворения и сканирующей калориметрии.

- Разработка комплекса методов оценки температурных зависимостей энтальпий и энергий Гиббса испарения, сублимации и плавления органических соединений.

Полученные данные имели сопоставимую с известными экспериментальными методами точность. Кроме того, в процессе исследования было показано, что пересчет энтальпий фазовых переходов крупных молекул по широко применяемой схеме Чикоса в интервале температур шире 100 К может привести к серьезным систематическим ошибкам.

Отмеченные результаты представляют лишь часть значимых и актуальных выводов, представленных в автореферате и диссертации М.И. Ягофарова.

С практической точки зрения результаты данной диссертационной работы обладают особым значением и могут быть применены в различных областях, таких как создание материалов для хранения энергии, проектирование горючих и взрывоопасных соединений, планирование условий вакуумной дистилляции малоизученных соединений, а также изучение смесей органических неэлектролитов. Полученные результаты были проверены на достоверность, воспроизводимость и согласованность данных. Автором была проведена обширная работа с научной литературой для подтверждения достоверности и согласованности результатов по определению энтальпий и энергий Гиббса фазовых переходов. Кроме того, результаты работы были опубликованы в ведущих зарубежных журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus, рекомендованных ВАК РФ. Результаты также были представлены на различных конференциях как на национальном, так и на международном уровнях.

Тем не менее, я считаю важным задать следующие вопросы:

- В работе упоминается аддитивная схема для расчета энтальпий сольватации органических соединений. Какие основные компоненты включены в эту схему и какие факторы могут повлиять на точность ее применения?

- Вы отмечаете, что результаты исследований термохимии плавления ароматических амидов при T_0 имеют потенциал для изучения плавления биологически активных соединений, содержащих амидную группу. Можете ли вы привести примеры таких соединений и объяснить их значимость для практических применений?

Указанные вопросы не умаляют значимости полученных результатов и общего вклада в развитие физической химии.

Все изложенное позволяет сделать вывод, что цели, задачи и результаты диссертационного исследования сформулированы корректно и соответствуют требованиям специальности "1.4.4. Физическая химия", в частности пунктам 2 и 4. Кроме того, диссертационная работа полностью соответствует критериям "Положения о присуждении ученых степеней", утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года № 842, а автор заслуживает присуждения степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Доктор физико-математических наук
по специальности 03.01.02 – Биофизика,
старший научный сотрудник, Научно-
исследовательский отдел №1 «Развитие
подходов и методов физической химии в
исследовании многокомпонентных
супрамолекулярных, молекулярных и ион-
молекулярных систем как перспективных
материалов»

Института химии растворов им. Г.А.
Крестова РАН
153045, Россия, г. Иваново,
ул. Академическая, д. 1

e-mail: iakh@isc-ras.ru
Тел. +7 (4932) 33-62-59
28.03.2024 г.

Ходов Илья Анатольевич