

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

Работа М.И. Ягофарова посвящена актуальной проблеме химической термодинамики – поиску новых подходов к предсказанию изменений термодинамических функций при фазовых переходах органических неэлектролитов при различных температурах, которые позволили бы сократить затраты, связанные с трудоёмкими экспериментальными измерениями. Несмотря на активное развитие, современные методы расчёта энтальпий сублимации, испарения, плавления органических соединений, давлений пара часто сопровождаются ошибками, неприемлемыми для технологических и исследовательских задач. Диссертантом поставлена цель разработать предсказательные подходы, точность которых сопоставима с современными экспериментальными методами.

Для достижения поставленной цели автором использовался инструментарий и закономерности, известные из термодинамики растворов органических неэлектролитов. Был выполнен значимый объём экспериментальных измерений и собрано впечатляющее количество (более 5000) литературных значений энтальпий фазовых переходов, теплоёмкостей и давлений паров органических соединений. В качестве значимых результатов работы, обладающих несомненной новизной, следует отметить:

– методы оценки энтальпий плавления и испарения при 298,15 К органических соединений, применимые вне зависимости от их склонности к кристаллизации;

– подходы к расчёту температурных зависимостей энтальпий испарения, плавления и сублимации, надёжность которых подтверждена как

сопоставлением с экспериментальными данными о самих энтальпиях фазовых переходов, так и о теплоёмкостях конечного и начального состояний;

– систему представлений о компенсационном соотношении между энергиями Гиббса и энтальпиями сольватации и испарения и разработанный на её основе способ расчёта температурной зависимости давлений насыщенных паров.

Разработанные предсказательные подходы могут найти применение в планировании технологических процессов разделения и очистки химических реактивов, при оценках их термодинамической стабильности и окажутся полезными в дальнейших фундаментальных исследованиях энергетических параметров тяжелолетучих, термически нестабильных органических соединений, поскольку использование прямых экспериментальных методов в этом случае затруднено.

Диссертационная работа прошла широкую апробацию на конференциях международного и Всероссийского уровня. Материалы диссертации изложены в 29 статьях в научных журналах первого и второго квартала в области химической термодинамики, опубликованных с 2020 года.

При прочтении автореферата возникли вопросы:

1) Автор указывает, что разработанные им подходы позволяют рассчитать температурные зависимости давлений насыщенных паров как неассоциированных, так и ассоциированных органических соединений. В качестве примера последних рассмотрены только алифатические спирты. Есть ли ограничения для других классов ассоциированных органических веществ?

2) В работе анализировались стандартные энтальпии парообразования. Они, по всей видимости, соответствуют переносу из конденсированной фазы в идеальный газ при давлении 1 бар. Большинство высокотемпературных значений энтальпий испарения, доступных из

литературы, получены дифференцированием температурных зависимостей давлений насыщенного пара и могут заметно отличаться от определяемых, как указано выше, стандартных энтальпий парообразования. Вводились ли автором поправки для учёта неидеальности паровой фазы?

Эти вопросы не влияют на общую положительную оценку. По моему мнению, диссертационная работа Ягофарова М.И. «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, по своему уровню, актуальности, объему, новизне, научной и практической значимости результатов 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 заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Профессор кафедры химической термодинамики и кинетики Института химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», доктор химических наук по специальности 02.00.01 – Неорганическая химия) (199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9. Тел.: +79043305019, irina.zvereva@spbu.ru)



Зверева Ирина Алексеевна