

ЗАКЛЮЧЕНИЕ диссертационного совета **24.1.225.01**,
созданного на базе Федерального государственного бюджетного учреждения
науки «Федеральный исследовательский центр
«Казанский научный центр Российской академии наук»
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени **кандидата наук**

Аттестационное дело № _____

Решение диссертационного совета от 30 ноября 2022 г., протокол № 28

о присуждении **Саматову Айзату Алмазовичу**, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата химических наук.

Диссертация **«Термохимия фазовых переходов и сольватации алифатических соединений при 298,15 К»** по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 27 сентября 2022 г., протокол № 14, диссертационным советом 24.1.225.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (ФИЦ КазНЦ РАН) Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 420111, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Лобачевского, д. 2/31, приказ Минобрнауки РФ № 553/нк от 23.05.2018.

Соискатель **Саматов Айзат Алмазович**, 07.12.1993 года рождения, в 2017 г. окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» (ФГАОУ ВО КФУ) по специальности «Фундаментальная и прикладная химия». В 2017-2021 гг. обучался в очной аспирантуре ФГАОУ ВО КФУ по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки.

Диссертация выполнена на кафедре физической химии Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО КФУ.

Научный руководитель – кандидат химических наук, доцент **Нагриманов Руслан Наильевич**, доцент кафедры физической химии Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО КФУ.

Официальные оппоненты:

Батов Дмитрий Вячеславович, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник научно-исследовательского отдела 1 Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, г. Иваново,

Востриков Сергей Владимирович, кандидат химических наук, начальник лаборатории «Перспективные технологии и материалы водородной энергетики» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Самарский государственный технический университет», г. Самара, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки **Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова** Российской академии наук – в своём положительном заключении, составленном и подписанном главным научным сотрудником лаборатории термодинамики высокоэнергетических систем, доктором химических наук Мирошниченко Евгением Александровичем, указала, что «Диссертация Саматова А.А. является завершённым научным исследованием, посвящена теме, которая является актуальной, имеет высокую теоретическую и практическую значимость. На основании проведённого исследования автору удалось разработать ряд оригинальных способов определения энтальпий фазовых переходов алифатических соединений при 298,15 К. Совокупность представленных в диссертационной работе выводов, научных результатов, их новизна и обоснованность позволяет квалифицировать её как завершённую, самостоятельную и актуальную работу. Диссертация Саматова А.А. удовлетворяет требованиям, установленным п. 9-11 и п. 13,14 «Положения о присуждении учёных»

степеней», утверждённого Постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата химических наук, а ее автор, Саматов Айзат Алмазович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается общностью тематики и областью научных интересов ведущей организации и официальных оппонентов, а именно: исследованиями в области термодинамики фазовых переходов, сольватации и межмолекулярных взаимодействий.

На автореферат диссертации поступило 5 отзывов, все положительные. Отзывы получены от:

- к.х.н. Агеенко В.Н. (Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева), *отзыв содержит замечания по оформлению автореферата;*
- д.х.н. Вережкина С.П. (Университет города Росток (Германия)), *в отзыве приведены замечания по оформлению автореферата, а также по отсутствию обоснования выбора объектов исследования;*
- д.х.н. Махмудияровой Н.Н. (Институт нефтехимии и катализа Уфимского ФИЦ РАН, г. Уфа), *отзыв без замечаний;*
- к.х.н. Дружининой А.И. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва), *в отзыве имеются вопросы по расчету энтальпии сольватации алифатических соединений, обоснованию выбора растворителя для исследования, замечания по представлению результатов;*
- к.х.н. Жериковой К.В. (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, г. Новосибирск), *отзыв без замечаний.*

Соискатель является соавтором 12 статей, 5 из них – по теме диссертации, все опубликованы в журналах, индексируемых в международных информационно-аналитических системах научного

цитирования Web of Science и Scopus. Общий объём опубликованных по теме диссертации работ составляет 36 стр. Работы написаны соискателем в соавторстве с другими исследователями, личный вклад диссертанта заключается в экспериментальном определении энтальпий растворения, энтальпий испарения и сублимации, анализе литературных данных, обобщении полученных результатов и написании статей.

Диссертационная работа не содержит недостоверных сведений об опубликованных соискателем работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Основное содержание диссертации изложено в следующих публикациях:

1) Nagrimanov, R.N. Thermochemical properties of mono- and di-cyanoaromatic compounds at 298.15 K / R.N. Nagrimanov, **A.A. Samatov**, A.V. Buzyurov, A.G. Kurshev, M.A. Ziganshin, D.H. Zaitsau, B.N. Solomonov // *Thermochim. Acta.* – 2018. – Vol. 668. – P. 152-158.

2) Nagrimanov, R.N. Improving the method of solution calorimetry for evaluation of the enthalpies of phase transitions and condensed state enthalpies of formation / R.N. Nagrimanov, **A.A. Samatov**, D.H. Zaitsau, B.N. Solomonov // *J. Chem. Thermodyn.* – 2019. – Vol. 128. – P. 141-147.

3) Nagrimanov, R.N. Additive scheme of solvation enthalpy for linear, cyclic and branched-chain aliphatic compounds at 298.15K / R.N. Nagrimanov, **A.A. Samatov**, B.N. Solomonov // *J. Mol. Liq.* – 2019. – Vol. 292. – Art. 111365.

4) **Samatov, A.A.** Vaporization/sublimation enthalpies of mono- and dimethyl-esters estimated by solution calorimetry method / A.A. Samatov, R.N. Nagrimanov, E.A. Miroshnichenko, B.N. Solomonov // *Thermochim. Acta.* – 2020. – Vol. 685. – Art. 178529.

5) Nagrimanov, R.N. Additive scheme of solvation enthalpy for halogenated aliphatic hydrocarbons at 298.15 K / R.N. Nagrimanov, **A.A. Samatov**, B.N. Solomonov // *Thermochim. Acta.* – 2022. Vol. 710 – Art. 179155.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– **показано**, что энтальпия растворения жидких гомологов алифатических соединений в *n*-гептане может быть описана степенной зависимостью от числа метиленовых групп в молекуле растворяемого вещества;

– **показано**, что для спиртов, кетонов, простых и сложных эфиров, величина вклада функциональной группы в энтальпию сольватации в *n*-гептане не зависит от положения группы в углеродной цепи;

- **показано**, что стандартное отклонение между рассчитанными по предложенному в диссертационной работе способу и литературными величинами энтальпий испарения/сублимации для 58 соединений составляет не более 1,0 кДж/моль;

- **получены** данные по энтальпиям испарения 46 алифатических соединений, которые не были изучены ранее. Рассчитанные величины согласуются в пределах 1,7 кДж/моль с экспериментальными величинами энтальпий испарения, полученными в диссертационной работе методами транспирации и корреляционной газовой хроматографией.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

– **предложена** аддитивная схема расчёта энтальпии сольватации алифатических соединений в *n*-гептане;

– **разработаны** способы определения энтальпий испарения/сублимации алифатических соединений при 298,15 К, основанные на применении аддитивной схемы расчёта энтальпий сольватации и калориметрии растворения.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

– полученные в работе температурные зависимости давления насыщенного пара могут быть использованы при расчёте параметров равновесия «жидкость-газ», необходимых для очистки веществ методами ректификации. Измеренные величины энтальпий растворения алифатических соединений в *n*-гептане могут быть использованы для оценки растворимости твёрдых органических веществ.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что достоверность результатов подтверждается использованием современного оборудования, сопоставлением рассчитанных с помощью предложенных в работе способов определения энтальпий фазовых переходов, с экспериментальными данными, полученными в работе, а также с имеющимися в литературе данными.

Личный вклад соискателя заключается: в осуществлении калориметрических измерений теплот растворения алифатических соединений в *n*-гептане, измерении давления насыщенного пара веществ в широком температурном диапазоне методом транспирации, в газохроматографическом анализе чистоты исследуемых веществ, в математической обработке экспериментальных данных, в сборе и анализе литературных данных, в обобщении полученных результатов совместно с научным руководителем, а также в подготовке публикаций по теме диссертационного исследования.

В ходе защиты Саматов А.А. исчерпывающе ответил на вопросы, заданные в ходе заседания диссертационного совета. Критических замечаний высказано не было.

На заседании 30 ноября 2022 г. диссертационный совет принял решение присудить Саматову Айзату Алмазовичу ученую степень кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия за решение научной задачи, заключающейся в разработке новых способов определения энтальпий фазовых переходов (испарения/сублимации и плавления)

алифатических соединений при 298,15 К с использованием метода калориметрии растворения.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали за – 17, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

30 ноября 2022 года

Заместитель председателя диссертационного совета,

д.х.н., профессор

Игорь Анатольевич Литвинов

Ученый секретарь диссертационного совета,

к.х.н.

Асия Васильевна Торопчина

30 ноября 2022 года