Заключение диссертационного совета 01.4.004.93

по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от «25» сентября 2025 г. № **93.17**

О присуждении **Архипину Анатолию Сергеевичу**, гражданину РФ, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Структурные и физико-химические свойства некристаллических фаз, образованных оксидами кальция, магния, алюминия и титана» по специальности 1.4.4 – физическая химия принята к защите диссертационным советом 11 июня 2025 года, протокол №.93.15.

Соискатель Архипин Анатолий Сергеевич, 1997 года рождения, в 2020 году окончил Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, затем обучался в очной аспирантуре факультета наук о материалах по кафедре физической химии по специальности 1.4.4 – Физическая химия (по направлению 02.00.04 – Физическая химия) с 01.10.2020 г. по 30.09.2024 г.; а также работал в лаборатории химической термодинамики химического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова в должности ведущего инженера.

Диссертация выполнена в лаборатории химической термодинамики кафедры физической химии Химического факультета Московского Государственного Университета имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель:

- **Успенская Ирина Александровна**, доктор химических наук, доцент, профессор кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»

Официальные оппоненты:

- **Столярова Валентина Леонидовна**, доктор химических наук, академик РАН, профессор Федерального государственного бюджетного

образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

- Князев Александр Владимирович, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой аналитической и медицинской химии химического факультета Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского"

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «**Сибирский федеральный университет**» в своем положительном заключении, подписанном кандидатом химических наук, доцентом, заведующей кафедрой физической и неорганической химии ФГБОУ ВО «НИУ «МЭИ» Денисовой Любовью Тимофеевной и утвержденным проректором по учебной работе ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет» Гуц Денисом Сергеевичем, указала, что диссертация по актуальности, объему проведенных исследований, научной новизне, достоверности полученных результатов, практической и теоретической значимости результатов соответствует паспорту специальности 1.4.4 Физическая химия, отвечает критериям пп. 9-14 Положения о порядке присуждения ученых степеней в редакции Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 и пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова Российской академии наук от 29 марта 2024, а ее автор достоин присуждения искомой степени.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации был продиктован профилем их специализации, близкой к тематике диссертации, наличием публикаций в рецензируемых научных изданиях по теме диссертации, а также возможностью дать объективную оценку всех аспектов диссертационной работы.

Соискатель имеет 24 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации 11 работ, из них 4 статьи, опубликованных в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ и входящих в перечень изданий, утвержденных Ученым советом ИОНХ РАН для опубликования основных научных результатов диссертаций, представленных для защиты в диссертационные советы ИОНХ РАН.

Список работ, опубликованных автором по теме диссертации

Статьи:

1. **A.S. Arkhipin**. Thermodynamic properties of selected glasses in the $CaO–Al_2O_3–TiO_2$ system. / A.S. Arkhipin, A. Pisch, G.M. Zhomin, S.V. Kuzovchikov, A.V. Khvan, N.N. Smirnova, A.V. Markin, N.A. Kovalenko, I.A. Uspenskaya. // *Journal of Non-Crystalline Solids*, 603:122098, 2023. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2022.122098.
2. **A.S. Arkhipin**. A molecular dynamics simulation study of crystalline and liquid MgO. / A.S. Arkhipin, A. Pisch, I.A. Uspenskaya, N. Jakse. // *Ceramics*, 7(3): 1187–1203, 2024. DOI: 10.3390/ceramics7030078
3. **A.S. Arkhipin**. Thermodynamic properties of $(CaO)_{0.5}(Al_2O_3)_{0.1}(SiO_2)_{0.4}$ glass. / A.S. Arkhipin, A. Pisch, S.V. Kuzovchikov, A.V. Khvan, N.N. Smirnova, A.V. Markin, I.A. Uspenskaya. // *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 98(12): 2681–2690, 2024. DOI: 10.1134/s0036024424701899
4. **A.S. Arkhipin**. Structural and physico-chemical properties of selected glasses in the $(Ca_{1-x}Mg_x)O–Al_2O_3$ system. / A.S. Arkhipin, G.M. Zhomin, S.V. Kuzovchikov, A.V. Khvan, I.A. Uspenskaya. // *Chimica Techno Acta*, 12(2):12218, 2025. DOI: 10.15826/chimtech.2025.12.2.18

Тезисы докладов конференций:

1. A.S. Arkhipin, A. Pisch, G.M. Zhomin, I.A. Uspenskaya. **Experimental study and molecular dynamics simulation of physico-chemical properties of glasses in the $CaO–MgO–Al_2O_3–TiO_2$ system**. // *XXIV International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia (RCCT-2024), Book of Abstracts,* 1–5 July 2024, Ivanovo, Russia.
2. A.S. Arkhipin, A. Pisch, I.A. Uspenskaya, N. Jakse, S.V. Kuzovchikov, A.V. Khvan, D.R. Neuville. **Structural and physico-chemical properties of selected glasses in the $(Ca_{1-x}Mg_x)O–Al_2O_3$ system**. *XVIIIth Conference of the European Ceramic Society (XVIII ECERS), 2–*6 July 2023, Lyon, France.
3. А.С. Архипин, A. Pisch, и И.А. Успенская. **Изучение свойств стекол в системе $CaO–Al_2O_3–TiO_2–MgO$**. // *Высокотемпературная Химия Оксидных Систем и Материалов*, 25–28 Сентября 2023, Санкт-Петербург, Россия (дистанционно).

4. Г.М. Жомин, А.В. Кондратьев, А.С. Архипин, и И.А. Успенская. **Влияние добавки TiO_2 на физико-химические свойства аморфного алюмината кальция $Ca_{12}Al_{14}O_{33}$.** // *Высокотемпературная Химия Оксидных Систем и Материалов*, 25–28 Сентября 2023, Санкт-Петербург, Россия.
5. A.S. Arkhipin, A. Pisch, and I.A. Uspenskaya. **Thermodynamic properties of glassy mayenite and the impact of titania additives**. // *DGG-USTV Joint Annual Meeting*, 22–24 May 2023, Orléans, France.
6. A.S. Arkhipin, A. Pisch, I.A. Uspenskaya, N. Jakse, S.V. Kuzovchikov, A.V. Khvan, N.N. Smirnova, A.V. Markin, and D.R. Neuville. **Structural and physico-chemical properties of glasses in the $CaO–Al_2O_3–TiO_2$ system**. // *26th International Congress on Glass (ICG-2022),* 3–8 July 2022, Berlin, Germany.
7. Г.М. Жомин, А.С. Архипин. **Термодинамические свойства майенита в аморфном состоянии**. // *XXIX Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов 2022"*, 11–22 Апреля 2022, Москва, Россия.

Количество цитирований основных публикаций по теме диссертации (и в скобках - всего) в международных базах данных Web of Science **6 (26)**, Scopus **8 (28).** Индекс Хирша WoS **3**, Scopus **3**.

На автореферат диссертации поступило **5** положительных отзывов.

1. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки "Объединенный Институт высоких температур Российской академии наук"(Белов Глеб Витальевич, д.т.н., ведущий научный сотрудник)
2. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (Зверева Ирина Алексеевна, д.х.н., проф., профессор кафедры химической термодинамики и кинетики Института химии);
3. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина» (Черепанов Владимир Александрович, д.х.н., проф., профессор кафедры физической и неорганической химии Института естественных наук и математики);
4. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Московский государственный университет имени

М.В. Ломмоносова" (Огородова Любовь Петровна, к.х.н., в.н.с. кафедры минералогии геологического факультета);

5. Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики имени Б.П. Константинова» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» - Институт химии силикатов имени И.В. Гребенщикова. (Ворожцов Виктор Алексеевич, к.х.н., н.с. лаборатории высокотемпературной химии гетерогенных процессов)

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором систематических исследований структурных, термодинамических и реологический свойств стекол в трехкомпонентных системах $CaO–Al_2O_3–TiO_2$ и $CaO–MgO–Al_2O_3$ установлены закономерности изменения этих свойств в зависимости «состав»–«структура»–«свойство», получены численные значения термодинамических свойств стекол, проведены расчеты классической молекулярной динамики и полученные данные сопоставлены с экспериментальными.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о следующем личном вкладе автора в науку:

1. изменение состава стекол в результате допирования матрицы $Ca_{12}Al_{14}O_{33}$ оксидом титана или замещения алюминия на титан приводит к одинаковым эффектам с точки зрения изменения термохимических свойств, температуры стеклования, вязкости и плотности стекол (отрицательные тепловые эффекты смешения, нечувствительность теплоемкости к изменению состава, увеличение плотности, уменьшение вязкости и температуры стеклования с ростом содержания TiO_2);

2. замена CaO на MgO в стекле состава $Ca_{12}Al_{14}O_{33}$, как и уменьшение соотношения CaO/Al_2O_3 при постоянном количестве TiO_2 приводит к увеличению соотношения числа мостиковых атомов кислорода Q^4/Q^2 и уменьшению плотности; при этом в первом случае температура стеклования снижается, энтальпия образования увеличивается, а теплоемкость практически не изменяется, в то время как во втором случае увеличиваются температура стеклования, вязкость и теплоемкость;
3. с помощью метода классической молекулярной динамики с потенциалом Борна-Майера-Хаггинса можно воспроизвести общие закономерности изменения структурных и физико-химических свойств стекол в системах $CaO–Al_2O_3–TiO_2$ и $CaO–MgO–Al_2O_3$, при этом количественно удается описать только координационные числа Ca и Mg, а также теплоемкость стекол; расчеты дают завышенные значения плотности и энтальпии образования из оксидов, не очень хорошее описание координационного числа Al и плохое – локального окружения Ti.

На заседании 25 сентября 2025 г. диссертационный совет принял решение присудить Архипину Анатолию Сергеевичу ученую степень кандидата химических наук.

При проведении открытого голосования диссертационный совет в количестве **11** человек, из них **10** докторов наук, участвовавших в заседании, из **16** человек, входящих в состав совета (дополнительно введены на разовую защиту **0** человек), проголосовали: за - **11**, против - **нет**, недействительных бюллетеней – **нет**. Протокол счетной комиссии №**93.17а**.

Председатель диссертационного совета Академик РАН, д.х.н. — Еременко Игорь Леонидович

Ученый секретарь диссертационного совета, к.х.н. — Рюмин Михаил Александрович