

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ЮФУ801.01.06,
созданного на базе Научно-исследовательского института физики ЮФУ,
по диссертации на соискание учёной степени **кандидата наук**

аттестационное дело № _____,
решение диссертационного совета от 22.10.2025 № 63

О присуждении **Наздрачевой** Татьяне Федоровне, гражданину РФ, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Исследование адсорбционных процессов на базальных поверхностях каолинита и монтмориллонита методом инфракрасной спектроскопии»** по специальности **1.3.8. Физика конденсированного состояния**, принятая к защите 11.08.2025 (протокол заседания № **54**) диссертационным советом ЮФУ801.01.06, созданным на базе Научно-исследовательского института физики ЮФУ, приказ № 236-ОД от 20.09.2024.

Соискатель Наздрачева Татьяна Федоровна, 1998 года рождения, окончила очную аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ростовский государственный университет путей сообщения» Федерального агентства железнодорожного транспорта (РОСЖЕЛДОР) по направлению 03.06.01 – Физика и астрономия, по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, в 2025 году и работает ассистентом в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Ростовский государственный университет путей сообщения».

Диссертация выполнена на кафедре «Физика» энергетического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ростовский государственный университет путей сообщения».

Научный руководитель: заведующий кафедрой «Физика» Ростовского государственного университета путей сообщения **Кочур** Андрей Григорьевич, доктор физико-математических наук, профессор.

Официальные оппоненты: **Авакян** Леон Александрович, доктор физико-математических наук, Южный федеральный университет, кафедра теоретической и вычислительной физики, профессор, и **Ершов** Игорь Владимирович, кандидат физико-математических наук, доцент, Донской государственной технической университет (Ростов-на-Дону), кафедра «Физика», доцент, дали **положительные** отзывы о диссертации.

Соискатель имеет семь публикаций по теме диссертации в соавторстве (общий объём 4,1 п. л., из которых соискателю принадлежат 2,05 п. л.), из них в российских и международных рецензируемых изданиях, входящих в базы данных Scopus и/или Web of Science, и в изданиях, входящих в Перечень научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук, представленных для защиты в диссертационные советы Южного федерального университета, **шесть** статей и **один** тезис в трудах конференции.

Наиболее значимые публикации соискателя:

1. Study of the Features of the Formation of Water Films on the Surfaces of Montmorillonite and Kaolinite by Infrared Spectroscopy / **T. F. Nazdracheva**, A. V. Kukharskii, A. S. Kasprzhitskii, G. I. Lazorenko, V. A. Yavna, A. G. Kochur // Optics and Spectroscopy. - 2021. - Vol. 129. - P.-270–275.

2. Study of hydration of kaolinite and montmorillonite mixture by IR spectroscopy / **T. Nazdracheva**, A. Morozov, V. Yavna, A. Kochur // Journal of Molecular Structure. – 2022. – Vol. 1250. – Part 3. – Art. No 131871.

3. Effect of Sodium Chloride on the Profiles of the IR Spectrum Bands of Kaolinite at Moistures under Plastic Limit / A. Morozov, **T. Nazdracheva**, A. Kochur, V. Yavna // Crystals. - 2022. - Vol. 12, Is. 9. – Art. No 1224.

4. Manifestation of hydration of Na⁺ and Cl⁻ ions in the IR spectra of NaCl aqueous solutions in the range of 2750–4000 cm⁻¹ / A. Morozov, **T. Nazdracheva**, A. Kochur, V. Yavna // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. – 2023. – Vol. 287. – Part 2. – Art. No 122119.

На автореферат диссертации поступило 4 положительных отзыва. Замечания и вопросы имеются в отзыве **Короченцева** В. В. (Институт химии ДВО РАН, Владивосток): 1) «На странице 9 и 11 (рис. 2, 3 и 4) приведены результаты теоретических и экспериментальных исследований каолинита и монтмориллонита при значениях влажности, достигающих 200%. Возникает вопрос, возможно ли такое и что из себя представляют вещества при таких значениях влажности».

В отзывах Турищева С. Ю. (ВГУ, Воронеж); Филатовой Е. О. (СПбГУ, Санкт-Петербург) и Яржемского В. Г. (ИОНХ имени Н. С. Курнакова РАН, Москва) об автореферате диссертации замечаний и вопросов не обнаружено.

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что **Авакян Л. А.** является специалистом в теоретической физике конденсированного состояния, в частности, в области изучения структур и физических свойств макро-, микро- и нанообъектов и их моделирования с использованием метода теории функционала плотности и методов спектроскопии, и **Ершов И. В.** является специалистом в теоретической физике, в частности, в области исследования и моделирования структур и электронных свойств различных конденсированных сред с использованием методов спектроскопии.

Диссертационный совет отмечает, что в результате выполненных соискателем исследований экспериментально установлена корреляция между профилем и положением полосы валентных колебаний молекул воды в инфракрасных (ИК) спектрах природных глинистых минералов: каолинита и монтмориллонита, и степенью их увлажнённости водой или водными растворами хлорида натрия, что обусловлено образованием на их базальных поверхностях химической связи с молекулами воды, и на основе этой корреляции разработан новый метод определения пределов пластичности и текучести этих минералов по точкам изменения наклона и максимумам зависимостей вкладов базисных спектров в измеренные спектры от степени увлажнённости образцов; выявлено влияние концентрации увлажняющего раствора хлорида натрия на ИК-спектры каолинита, которое проявляется в изменении ширины полосы валентных колебаний воды и сдвиге частоты её максимума, что связано с изменением концентрации в растворах относительного количества молекул воды, частично и полностью сольватированных в разной степени ионов Na^+ и Cl^- ; показано, что сольватация ионов соли затрудняет адсорбцию молекул воды на базальных поверхностях каолинита, а его высушивание после увлажнения растворами хлорида натрия приводит к адсорбции молекул соли и модификации свойств

базальной поверхности, что отражается в соответствующих ИК-спектрах; в ИК-спектре механической смеси монтмориллонита и каолинита *установлено* значительно большее поглощение влаги частицами монтмориллонита по сравнению с каолинитом, что *объяснено* большей удельной поверхностью и гидрофильностью монтмориллонита.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что впервые в ИК-спектрах каолинита и монтмориллонита *выявлена* и количественно *охарактеризована* взаимосвязь профиля и положения полосы валентных колебаний молекул воды с макроскопическими предельными состояниями их пластичности и текучести; *проведено* квантово-химическое моделирование гидроксильной и силоксановой поверхностей каолинита с адсорбированными на них молекулами воды, подтвердившее высокую гидрофильность гидроксильной поверхности каолинита по сравнению с силоксановой и позволившее интерпретировать экспериментально наблюдаемые изменения в ИК-спектрах при его увлажнении; *доказана* адекватность кластерного подхода в рамках приближения теории функционала плотности для моделирования ИК-спектров сложных гидратированных поверхностных систем, с использованием которого *определены* механизмы влияния сольватации ионов на адсорбцию воды на базальных поверхностях каолинита.

Применительно к проблематике диссертации эффективно использованы современные экспериментальный метод инфракрасной спектроскопии, современных методов теории функционала плотности и метод Хартри - Фока; *проведён* всесторонний анализ ИК-спектров двух минералов отдельно и их смесей в широком диапазоне их влажностей и концентраций соли в увлажняющих растворах; *получены* новые результаты, согласующиеся между собой и с известными литературными данными и *выявлены* ранее не описанные закономерности трансформации ИК-спектров, вызванные переходами из твёрдого в пластичное и из пластичного в жидкое состояние в дисперсных системах минералов при изменении их влажности.

Значение полученных соискателем результатов для практики определяется тем, что *разработаны* научные основы нового, защищённого патентом экспресс-метода определения пределов пластичности и текучести алюмосиликатных минералов по данным ИК-спектроскопии, который можно рекомендовать при оптимизации методов контроля качества и прогнозирования поведения в естественных условиях грунтов, содержащих подобные минералы, в том числе для анализа при подготовке сырья в аэрокосмической отрасли и биоинженерии и при практическом применении его для контроля прочности земляного полотна автомобильных и железных дорог и других целей, и *создан* и реализован в виде компьютерной программы алгоритм разложения спектров исследуемых материалов по базисам спектров стандартных материалов, позволяющий исследовать фазовый состав и макроскопические свойства минералов, подобных исследуемым в диссертации.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что *использованы* современное спектроскопическое оборудование для экспериментального получения ИК-спектров минералов и апробированные программные комплексы для квантово-химических расчётов, а также методы измерений и обработки данных эксперимента, что обеспечило высокую надёжность получаемых экспериментальных и теоретических результатов с хорошей воспроизводимостью, и *применены* методы теоретического моделирования, которые соответствуют современным физическим концепциям физики конденсированного состояния.

Личный вклад соискателя состоит в том, что она выполнила все экспериментальные исследования: получение, обработка и анализ ИК-спектров, участие в квантово-химических расчётах и интерпретации их результатов. Определение направления исследований, постановка цели и задач, формулирование научных положений, выносимых на защиту, обсуждение результатов и выводов, подготовка совместных публикаций проводились

соискателем совместно с научным руководителем и соавторами публикаций по теме диссертации.

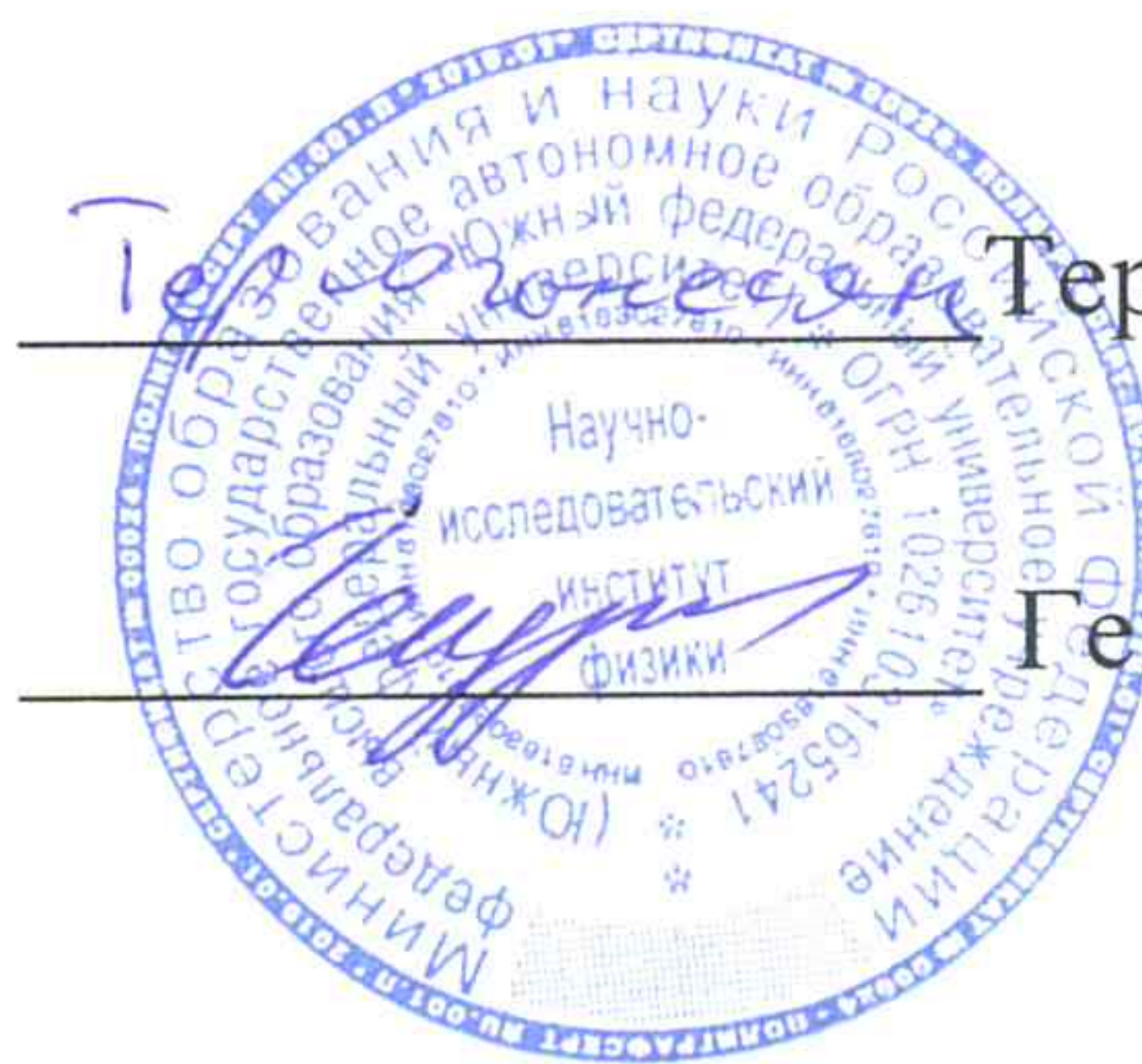
На заседании 22.10.2025 диссертационный совет отметил, что рассматриваемая диссертация соответствует критериям раздела 2 «Положения о присуждении учёных степеней в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Южный федеральный университет», и принял решение присудить **Назрачевой Т. Ф.** учёную степень **кандидата** физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из которых 5 докторов наук по научной специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета (дополнительных членов не вводилось), проголосовали: за – 14, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председателя
диссертационного совета

Учёный секретарь
диссертационного совета

24.10.2025



Тер-Оганесян Никита Валерьевич

Гегузина Галина Александровна