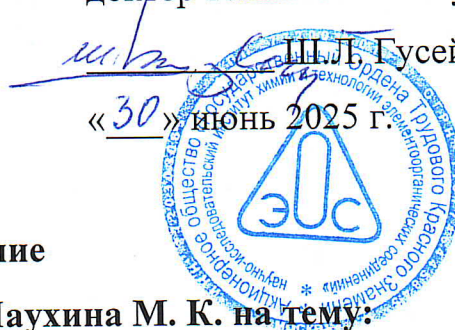


«30» ИЮНЬ 2025 г.



Заключение

о диссертационной работе Шаухина М. К. на тему:

«Синтез хромсодержащих иттрийоксанолюмоксанов, изучение свойств и расчёт молекулярных структур олигомерных молекул – предшественников алюмоиттриевой керамики, модифицированной хромом», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.8. Химия элементоорганических соединений, 1.4.7. Высокомолекулярные соединения.

Выписка: из протокола № 2 заседания секции Учёного совета

«Элементоорганика» АО «ГНИИХТЭОС» от 24 июня 2025 г.

Присутствовали: 14 человек из 15 членов, входящих в состав секции и приглашённые специалисты института.

Слушали: сообщение соискателя Шаухина М. К. о законченной диссертационной работе на тему «Синтез хромсодержащих иттрийоксаналюмоксанов, изучение свойств и расчёт молекулярных структур олигомерных молекул – предшественников алюмоиттриевой керамики, модифицированной хромом», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальностям: 1.4.8. Химия элементоорганических соединений и 1.4.7. Высокмолекулярные соединения.

В ходе обсуждения диссертанту были заданы следующие вопросы:

Лактин В. Г. (д.х.н., ведущий научный сотрудник лаборатории Композиционных кремнийорганических материалов и особо чистых компаундов): «Как определяли процентное содержание олигомерных фрагментов хромсодержащих органоиттрийоксаналюмоксанов?»

Драчев А. И. (к.ф.-м.н., заместитель начальника лаборатории Спектральных методов исследования): «Почему для расчета молекулярных структур был выбран метод самосогласованного поля?»

Городецкая А. В. (научный сотрудник лаборатории Специальных волокон и компонентов композиционных материалов): «При каких условиях проводили соконденсацию хелатированных иттрийоксаналюмоксанов с ацетилацетонатом хрома?»

Жигалов Д. В. (начальник лаборатории Специальных волокон и компонентов композиционных материалов): «Какие исходные данные были взяты для расчёта приведенных органоалюмоксанов, органоиттрийоксаналюмоксанов и хромсодержащих органоиттрийоксаналюмоксанов?»

Драчев А. И. (к.ф.-м.н., заместитель начальника лаборатории Спектральных методов исследования): «Образует ли хром общую структуру с органоалюмоксанами и органоиттрийоксаналюмоксанами или находится в качестве примесных включений?»

Жигалов Д.В. (начальник лаборатории Специальных волокон и компонентов композиционных материалов): «Какими методами определяли содержание С, Н, ОН, Y, Cr?»

Драчев А. И. (к.ф.-м.н., заместитель начальника лаборатории Спектральных методов исследования): «Назовите возможные области применения хромсодержащих органоиттрийоксаналюмоксанов?»

На все заданные вопросы диссертант дал обстоятельные ответы.

По данной работе выступили: научный руководитель – доктор химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории Специальных волокон и компонентов композиционных материалов Г.И. Щербакова.

В обсуждении приняли участие: доктор химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории Композиционных кремнийорганических материалов и особо чистых компаундов В.Г. Лахтин, кандидат физико-математических наук, зам. начальника лаборатории спектральных методов исследования А. И. Драчёв, начальник лаборатории Специальных волокон и компонентов композиционных материалов Д. В. Жигалов, научный сотрудник лаборатории Специальных волокон и компонентов композиционных материалов А. В. Городецкая, кандидат химических наук, начальник лаборатории Азотсодержащих кремнийорганических соединений, полисилазанов С. В. Жукова.

В результате обсуждения диссертационной работы и обмена мнениями установлено:

Актуальность темы

На современном этапе развития науки и техники актуальной задачей является поиск новых материалов технического назначения.

Именно поэтому во всех промышленных странах мира интенсивно ведутся исследования по созданию новых высокотермостойких конструкционных и функциональных керамических материалов. Ведущие развитые страны вкладывают в создание новых высокотермостойких и химически инертных керамических и композиционных материалов значительные средства.

Подобным исследованиям посвящено много публикаций и хорошо продемонстрировано, что путем введения переходного металла в уже известную структуру, возможно, получать основу для материала, обладающего высокими эксплуатационными свойствами.

При этом одним из наиболее перспективных путей решения задачи по созданию новых материалов является разработка направленных методов получения керамических матриц, волокон, покрытий на основе элементоорга-

нических олигомерных предшественников контролируемого строения и состава.

В связи с этим встает вопрос не только об усовершенствовании способов синтеза, исследовании свойств, но и о детальном изучении строения и предсказании наиболее вероятной молекулярной структуры подобных олигомерных предшественников с применением квантово-химических методик расчёта.

В Государственном научно-исследовательском институте химии и технологии элементоорганических соединений (АО «ГНИИХТЭОС») на основе хелатированных алкоксиалюмоксанов были синтезированы гидролитически устойчивые и растворимые в органических растворителях керамообразующие олигомерные органохромоксанииттрийоксаналюмоксаны, которые могут обладать и волокнообразующими свойствами, термохимическая трансформация которых приводит к образованию многокомпонентной оксидной керамики хромсодержащего алюмоиттриевого состава.

Следовательно, подобные олигомеры могут быть использованы в качестве предшественников компонентов (волокна, связующие, порошки и т.п.) для создания нового поколения высокочистой наноструктурной высокотермостойкой и окислительностойкой многокомпонентной керамики на основе оксидов алюминия, иттрия и хрома.

Многокомпонентная керамика на основе оксидов алюминия, иттрия и хрома $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--Y}_2\text{O}_3\text{--Cr}_2\text{O}_3$ химически совместима, достаточно термически стабильна, обладает повышенной стойкостью к окислению и ползучести, поэтому перспективна для высокотемпературного использования.

Известно, что оксид хрома Cr_2O_3 является эффективной спекающей добавкой для повышения плотности керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ и Y_2O_3 , а также значительно увеличивает их тугоплавкость, химическую стабильность, ударную вязкость, механические свойства и препятствует росту зерна.

Именно поэтому детальное изучение процесса соконденсации олигомерных иттрийоксаналюмоксанов с ацетилацетонатом хрома, их свойств и

строения, а также предсказание наиболее вероятной молекулярной структуры хромсодержащих органоиттрийоксаналюмоксанов с применением квантово-химических методик расчёта является актуальным.

Личный вклад автора

Диссертантом осуществлен сбор и анализ данных по теме исследования, выполнен основной объем экспериментальной работы - синтез органоиттрийоксаналюмоксанов с разным мольным отношением Al/Y и исследован процесс соконденсации органоиттрийоксаналюмоксанов с ацетилацетонатом хрома с разным мольным отношением Al/Y и Al/Cr, изучено влияние мольного соотношения Al/Y и Al/Cr на волокнообразующую способность хромсодержащих иттрийоксаналюмоксанов, а также процесс их термохимической трансформации. В программном комплексе «HyperChem» автором выполнены построение и расчёт структур органоалюмоксанов, органоиттрийоксаналюмоксанов и олигомерных органохромоксанииттрийоксаналюмоксанов. Автор принимал непосредственное участие в планировании экспериментов, обсуждении и интерпретации всех полученных результатов, подготовке материалов для публикации в научных журналах и представления на конференциях, включая написание, редактирование текстов рукописей и тезисов.

Достоверность экспериментальных данных и обоснованность положений и выводов диссертации подтверждается всей совокупностью современных физико-химических методов, использованных для характеристики синтезированных соединений [спектроскопия ЯМР и ИК, элементный анализ, термогравиметрический анализ (TGA/SDTA), сканирующая электронная микроскопия, рентгеновский элементный микроанализ, рентгеновская дифракция], а также тем, что описанные методики хорошо воспроизводятся, а полученные данные и выводы согласованы и не противоречат друг другу.

Обоснованность научных положений, выводов и рекомендаций, представленных в диссертации, базируется на экспериментальном материале, тщательной литературной проработке и подтверждается результатами синтезов проведенных на опытной установке в стеклянном реакторе 50 л.

Научная новизна полученных результатов

1. Установлено, что в процессе соконденсации хелатированных иттрийоксаналюмоксанов с ацетилацетонатом хрома, алюминий и иттрий, вследствие одинаковой химической природы, образуют единую пространственную элементоксановую структуру, а хром может встраиваться в подобную элементоксановую структуру при этом, не нарушая ее пространственной конфигурации.

2. Установлено, что органохромоксанииттрийоксаналюмоксаны представляют собой сложные олигомерные структуры, состоящие из органоалюмоксановых, органоиттрийоксаналюмоксановых, органохромоксаналюмоксановых и органохромоксанииттрийоксаналюмоксановых фрагментов, а их процентное содержание в олигомере зависит от мольного отношения Al/Y и Al/Cr .

3. Впервые в программном комплексе «HyperChem» проведены квантово-химические расчёты молекулярного строения и представлена визуализация олигомерных фрагментов наиболее вероятных органохромоксанииттрийоксаналюмоксанов.

Практическая значимость работы

Показано, что органохромоксанииттрийоксаналюмоксаны являются перспективными предшественниками компонентов керамических композиционных материалов: связующие, матрицы, покрытия, волокна.

Установлено, что органохромоксанииттрийоксаналюмоксаны могут обладать волокнообразующими свойствами. На основе волокнообразующих органохромоксанииттрийоксаналюмоксанов, методом расплавного формования, получены непрерывные полимерные волокна – предшественники керамических модифицированных хромом алюмоиттриевых волокон, в частности, хромсодержащих гранатовых волокон.

Показано, что хромсодержащие иттрийоксаналюмоксановые олигомеры хорошо растворимы в углеводородных и спиртовых растворителях и, следовательно, их растворы могут использоваться в качестве связующих для

матриц или пленкообразующих композиций для барьерных и защитных покрытий.

Используя моделирование, сделан расчёт возможных структур исходных органоалюмоксановых и органоиттрийоксаналюмоксановых олигомеров, а также образующихся органохромоксаналюмоксановых и органохромоксанииттрийоксаналюмоксановых фрагментов, проведена их визуализация.

Новизна и практическая значимость работы подтверждены патентом РФ 2767236 (2022).

Полнота опубликования научных результатов. Секция Учёного совета «Элементоорганика» отмечает достаточную полноту публикаций научных результатов диссертационной работы Шаухина М. К., в том числе:

Статьи:

1. Щербакова, Г. И. Квантово-химический расчет геометрии алкокси(гидрокси)(этилацетоацетат)алюмоксана / Г. И. Щербакова, М. К. Шаухин, А. Д. Кирилин, П. А. Стороженко, А. С. Похоренко // Журнал общей химии. – 2021. – Т. 91, № 2. – С. 283-289.
2. Щербакова, Г. И. Особенности молекулярной структуры органохромоксанииттрийоксаналюмоксановых олигомеров / Г. И. Щербакова, М. К. Шаухин, А. Д. Кирилин, П. А. Стороженко // Известия Академии наук. Серия химическая. – 2021. – №7. – С.1275-1280.
3. Shcherbakova, G. I. Condensation of organoyttriumoxanalumoxanes with chromium acetylacetonate / G. I. Shcherbakova, М. К. Shaukhin, N. B. Kutinova, P. A. Storozhenko, A. D. Kirilin, M. S. Varfolomeev, A. I. Drachev, A. A. Ashmarin // Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials. – 2021. – Vol. 31. – P. 3460-3480.
4. Патент РФ № 2767236 С1. Способ получения гранатовых волокон, модифицированных хромом. / Г. И. Щербакова, О. Н. Абрамов, М. К. Шаухин, Н. С. Кривцова, М. С. Варфоломеев, П. А. Стороженко № 2021111612 от 23.04.2021 заявлено 23.04.2021. Опубл. 17.03.2022. Бюл. № 8.

5. Shcherbakova G., Condensation of organoyttriumoxanalumoxanes with chromium acetylacetonate / G. Shcherbakova, N. Kutinova, M. Shaukhin, O. Abramov // International conference "Chemistry of Organoelement Compounds and Polymers 2019", Moscow, Russia, 18-22 November 2019; Book of Abstracts. P. 241.

6. Щербакова Г. И., Особенности молекулярной структуры органо-хромоксанииттрийоксаналюмоксановых олигомеров / Г. И. Щербакова, М. К. Шаухин, А. Д. Кирилин, П. А. Стороженко // II Научная конференция, посвященная 75-летию ИОФХ им. А.Е. Арбузова и Казанского научного центра РАН «Динамические процессы в химии элементоорганических соединений», ИОФХ им. А.Е. Арбузова, г. Казань, 11–13 ноября 2020 г.; Тезисы докладов. С. 194.

7. Шаухин М. К., Квантово-химический расчёт этилацетоацетат-алкоксигидроксиалюмоксана / М. К. Шаухин, Г. И. Щербакова // XIX Всероссийская конференция молодых ученых «Актуальные проблемы неорганической химии: материалы для генерации, преобразования и хранения энергии», МГУ имени М. В. Ломоносова, г. Москва, 13–15 ноября 2020 г.; Тезисы докладов. С. 215.

8. Шаухин М. К., Полимерные волокна на основе хромсодержащих иттрийоксаналюмоксанов / М. К. Шаухин, Г. И. Щербакова, О. Н. Абрамов, А. А. Флотский // Международная научно-техническая конференция молодых ученых «Инновационные материалы и технологии – 2021», Белорусский государственный технологический университет, Республика Беларусь, г. Минск, 2021 г., – С. 37-40. (628 с.) ISBN 978-985-530-920-9.

9. Шаухин М. К., Квантово-химический расчёт этилацетоацетат-алкоксигидроксиалюмоксана, модифицированного хрома / М. К. Шаухин, А. Д. Кирилин, Г. И. Щербакова // Международная научно конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2025». Секция «Химия», Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, г. Москва, 2025 г., – С. 420. (1069 с.) ISBN 978-5-00258-683-7.

Постановили:

1. Считать представленную диссертационную работу отвечающей настоящим требованиям п.9 Положения ВАК о присуждении учёных степеней, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата химических наук.

2. Рекомендовать с учётом замечаний данную работу к защите на диссертационном совете 74.1.001.01 при АО «ГНИИХТЭОС».

Решение принято единогласно.

Председатель секции Учёного совета
«Элементоорганика»,
доктор хим. наук



В.Г. Лахтин

Секретарь секции, канд. хим. наук



О.В. Криволапова

Россия, 105118, Москва, шоссе Энтузиастов, 38

Тел.: (495) 673-44-82

E-mail: ous@eos.su

УТВЕРЖДАЮ:



Первый проректор
д.х.н., профессор Прокопов Н.И.

2025 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

**Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
«МИРЭА – Российский технологический университет»
по диссертационной работе Шаухина Максима Константиновича
«СИНТЕЗ ХРОМСОДЕРЖАЩИХ ИТТРИЙОКСАНАЛЮМОКСАНОВ,
ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ И РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР
ОЛИГОМЕРНЫХ МОЛЕКУЛ – ПРЕДШЕСТВЕННИКОВ
АЛЮМОИТТРИЕВОЙ КЕРАМИКИ, МОДИФИЦИРОВАННОЙ
ХРОМОМ» представленной на соискание ученой степени кандидата
химических наук по специальности: 1.4.8 – «Химия элементоорганических
соединений» и 1.4.7 – «Высокомолекулярные соединений».**

Диссертация Работа «Синтез хромсодержащих иттрийоксаналюмоксанов, изучение свойств и расчет молекулярных структур олигомерных молекул - предшественников алюмоиттритиевой керамики, модифицированной хромом» выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении высшего образования «МИРЭА - Российский технологический университет» (РТУ МИРЭА) и Государственном научном центре Российской Федерации Акционерном обществе «Государственный Орден Трудового Красного Знамени научно-исследовательский институт химии и технологии элементоорганических соединений» (ГНЦ РФ АО «ГНИИХТЭОС»)

В период подготовки диссертации аспирант Шаухин Максим Константинович обучалась в очной аспирантуре РТУ МИРЭА.

В 2018 г. Шаухин М.К. окончил с отличием ФГБОУ ВО «МИРЭА - Российский технологический университет» по направлению подготовки 18.04.01 «Химическая технология». Диплом магистра №107731 0102036.

Диплом об окончании аспирантуры №107724 4895781 по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» выдан 07 июля 2022 года ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет».

Научные руководители:

Доктор химических наук, профессор Кирилин Алексей Дмитриевич, профессор кафедры химии и технологии переработки пластмасс и полимерных композитов ФГБОУ ВО РТУ МИРЭА, Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова.

Доктор химических наук, старший научный сотрудник Щербакова Галина Игоревна, ведущий научный сотрудник лаборатории специальных волокон и компонентов композиционных материалов ГНЦ РФ АО «ГНИИХТЭОС».

Слушали: доклад Шаухина Максима Константиновича о результатах законченной диссертационной работы на тему: «Синтез хромсодержащих иттрийоксаналюмоксанов, изучение свойств и расчет молекулярных структур олигомерных молекул - предшественников алюмоиттриевой керамики, модифицированной хромом», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.8 – «Химия элементо-органических соединений» и 1.4.7 – «Высокомолекулярные соединения».

В ходе обсуждения были заданы следующие вопросы:

Вопрос и.о. зав. кафедрой, д.т.н., проф. И.Д. Симонов-Емельянов: Назовите научную новизну и практическую значимость Вашей работы. Назовите критерии, которые Вы использовали для расчета молекулярных структур олигомерных молекул?

Вопрос профессор, д.т.н. С.В. Резниченко: Какова молекулярная масса полученных Вами олигомеров? Что Вы понимаете под термином «волоконобразование» и назовите основные параметры технологии получения волокон? Почему Вы выбрали для модификации олигомерных структур именно хром и иттрий?

Вопрос доцент, к.х.н. М.В. Плетнева: Какие физико-химические методы Вы использовали при доказательстве состава и строения полученных соединений?

Вопрос профессор, д.т.н. А.В. Марков: Каким образом отверждаются Ваши полимерные волокна?

Вопрос профессор, д.х.н. Л.О. Белова: За счет чего происходит образование координационных связей в полученных Вами олигомерах?

Обсуждение работы.

Выступили:

Профессор, д.х.н. Белова Л.О.

Диссертационное исследование Шаухина М.К. посвящено актуальной задаче – синтезу хромсодержащих иттрийоксаналюмоксанов и изучению свойств полученных олигомеров – предшественников компонентов модифицированной хромом алюмоиттриевой керамики.

Помимо синтеза новых соединений и изучения закономерностей получения хромсодержащих иттрийоксаналюмоксановых олигомеров в работе проведено и моделирование молекулярных структур исходных органоалюмоксанов, органоиттрийоксаналюмоксанов и синтезированных органохромоксанииттрийоксаналюмоксанов с помощью квантово-химических методов компьютерной химии.

Проведенная Шаухиным М.К. работа представляет собой большое по объему, качественное, многоплановое исследование, выполненное на должном теоретическом и практическом уровне, полученные результаты вносят вклад в химию элементоорганических и высокомолекулярных соединений.

Считаю, что данная работа может быть рекомендована к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.8 – «Химия элементоорганических соединений» и 1.4.7 – «Высокомолекулярные соединения».

Профессор, д.т.н. Резниченко С.В.

Важно, что Шаухиным М.К. не только впервые установлено, что органохромоксанииттрийоксаналюмоксаны могут обладать волокнообразующими свойствами, но и показано, что на основе этих волокнообразующих органохромоксанииттрийоксаналюмоксанов, методом расплавного формования можно получать непрерывные полимерные волокна – предшественники керамических модифицированных хромом алюмоиттриевых волокон, в частности, хромсодержащих гранатовых волокон.

Считаю, что данная работа по научной новизне и практической значимости вполне соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям и ее можно рекомендовать к защите по специальности 1.4.8 – «Химия элементоорганических соединений» и 1.4.7 – «Высокомолекулярные соединения».

Ведущий научный сотрудник, д.х.н. Щербакова Г.И.

Шаухиным М.К. впервые проведен и изучен процесс соконденсации олигомерных иттрийоксаналюмоксанов с ацетилацетонатом хрома с подбором условий и подробным описанием методики синтеза; исследованы свойства полученных хромсодержащих иттрийоксаналюмоксановых олигомеров различными физико-химическими методами: – ЯМР, ИК, СЭМ, ТГА, РФА, элементный анализ и влияние мольного соотношения Al/Y и Al/Cr на волокнообразующую способность хромсодержащих иттрийоксаналюмоксанов, а так же термохимическая трансформация хромсодержащих иттрийоксаналюмоксанов с различным мольным соотношением Al/Y и Al/Cr.

Кроме того, им впервые осуществлено моделирование молекулярных

структур исходных органоалюмоксанов, органоиттрийоксаналюмоксанов и синтезированных органохромоксаниттрийоксаналюмоксанов с помощью квантово-химических методов компьютерной химии.

Все это говорит о наличии в представленной работе научной новизны и практической значимости, поэтому, считаю, данная работа может быть рекомендована к защите по специальности – 1.4.8 – «Химия элементоорганических соединений» и 1.4.7 – «Высокомолекулярные соединения».

Профессор, д.х.н. Кирилин А.Д.

Как специалист, много лет проработавший, в области химии элементоорганических соединений, считаю, что работа выполнена на высоком, современном уровне, прекрасно сбалансирована, в ней решены как теоретические вопросы, так и показана практическая значимость. Все разделы связаны между собой и решают единую цель исследования – разработку метода синтеза хромсодержащих иттрийоксаналюмоксановых олигомеров соконденсацией хелатированных иттрийоксаналюмоксанов с ацетилацетонатом хрома; изучение свойств синтезированных олигомеров – предшественников компонентов модифицированной хромом алюмоиттриевой керамики, что является актуальной проблемой и вносит существенный вклад в химию элементоорганических и высокомолекулярных соединений.

Работа соответствует требованиям, предъявляемым к научно-квалификационным работам, что позволяет рекомендовать ее к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности – 1.4.8 - «Химия элементоорганических соединений» и 1.4.7 - «Высокомолекулярные соединения».

Доцент, к.х.н. Плетнева М.В.

Диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и представляет собой законченное научное исследование, содержащее решение актуальной, интересной и практически важной научной задачи. Заявленная Шаухиным М.К. научная новизна диссертационного исследования является обоснованным фактом, выводы достаточно четко сформулированы и строго доказаны, поставленная цель в работе достигнута. Все это позволяет рекомендовать ее к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности – «Химия элементоорганических соединений» и «Высокомолекулярные соединения».

И.О. заведующего кафедрой Симонов-Емельянов И.Д.

Сегодня мы заслушали диссертацию Шаухина М.К. «Синтез хромсодержащих иттрийоксаналюмоксанов, изучение свойств и расчет

молекулярных структур олигомерных молекул - предшественников алюмоиттриевой керамики, модифицированной хромом».

Установили, работа актуальна, имеет научную новизну, практическую значимость и в полной мере отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, представляемым на соискание ученой степени кандидата химических наук. По результатам работы опубликовано 8 публикаций: 3 статьи в российских и зарубежных журналах (рекомендуемых ВАК); 1 патент и тезисы докладов - 5.

Кроме того, выслушали двух его руководителей и можем рекомендовать данную диссертацию к защите на Диссертационный совет 74.1.001.01 при ГНЦ РФ АО «ГНИИХТЭОС»

По итогам обсуждения диссертации «Синтез хромсодержащих иттрийоксаналюмоксанов, изучение свойств и расчет молекулярных структур олигомерных молекул - предшественников алюмоиттриевой керамики, модифицированной хромом» принято следующее заключение.

Актуальность работы. На современном этапе развития науки и техники актуальной задачей является поиск новых материалов технического назначения.

Именно поэтому во всех промышленных странах мира интенсивно ведутся исследования по созданию новых высокотермостойких конструкционных и функциональных керамических материалов.

Подобным исследованиям посвящено много публикаций и хорошо продемонстрировано, что путем введения переходного металла в уже известную структуру, возможно, получать основу для материала, обладающего высокими эксплуатационными свойствами.

При этом одним из наиболее перспективных путей решения задачи по созданию новых материалов является разработка направленных методов получения керамических матриц, волокон, покрытий на основе элементоорганических олигомерных предшественников контролируемого строения и состава.

В связи с этим встает вопрос не только об усовершенствовании способов синтеза, исследовании свойств, но и о детальном изучении строения и предсказания наиболее вероятной молекулярной структуры подобных олигомерных предшественников с применением квантово-химических методик расчёта.

В Государственном научно-исследовательском институте химии и технологии элементоорганических соединений на основе хелатированных алкоксаналюмоксанов были синтезированы гидролитически устойчивые и растворимые в органических растворителях керамообразующие олигомерные органохромоксанииттрийоксаналюмоксаны, которые могут обладать и

волокнообразующими свойствами, термохимическая трансформация которых приводит к образованию многокомпонентной оксидной керамики хромсодержащего алюмоиттриевого состава.

Следовательно, подобные олигомеры могут быть использованы в качестве предшественников компонентов (волокна, связующие, порошки и т.п.) для создания нового поколения высокочистой наноструктурной высокотермостойкой и окислительностойкой многокомпонентной керамики на основе оксидов алюминия, иттрия и хрома.

Многокомпонентная керамика на основе оксидов алюминия, иттрия и хрома $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--Y}_2\text{O}_3\text{--Cr}_2\text{O}_3$ химически совместима, достаточно термически стабильна, обладает повышенной стойкостью к окислению и ползучести, поэтому перспективна для высокотемпературного использования.

Известно, что оксид хрома Cr_2O_3 является эффективной спекающей добавкой для повышения плотности керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ и Y_2O_3 , а также значительно увеличивает их тугоплавкость, химическую стабильность, ударную вязкость, механические свойства и препятствует росту зерна.

Именно поэтому детальное изучение процесса соконденсации олигомерных иттрийоксаналюмоксанов с ацетилацетонатом хрома, их свойств и строения, а также предсказание наиболее вероятной молекулярной структуры хромсодержащих органоиттрийоксаналюмоксанов с применением квантово-химических методик расчёта является актуальным.

Научная новизна работы включает следующие основные научные результаты:

- Установлено, что в процессе соконденсации хелатированных иттрийоксаналюмоксанов с ацетилацетонатом хрома, алюминий и иттрий, вследствие одинаковой химической природы, образуют единую пространственную элементоксановую структуру, а хром может встраиваться в подобную элементоксановую структуру при этом, не нарушая ее пространственной конфигурации.

- Установлено, что органохромоксанииттрийоксаналюмоксаны представляют собой сложные олигомерные структуры, состоящие из органоалюмоксановых, органоиттрийоксан-алюмоксановых, органохромоксаналюмоксановых и органохромоксанииттрийоксаналюмоксановых фрагментов, а их процентное содержание в олигомере зависит от мольного отношения Al/Y и Al/Cr .

- Впервые в программном комплексе «HyperChem» проведены квантово-химические расчёты молекулярного строения и представлена визуализация олигомерных фрагментов наиболее вероятных органохромоксанииттрийоксаналюмоксанов.

Практическая значимость работы

- Показано, что органохромоксанииттрийоксаналюмоксаны являются перспективными предшественниками компонентов керамических композиционных материалов: связующие, матрица, покрытия, волокна.

- Установлено, что органохромоксанииттрийоксаналюмоксаны могут обладать волокнообразующими свойствами. На основе волокнообразующих органохромоксанииттрийоксаналюмоксанов, методом расплавного формования, получены непрерывные полимерные волокна – предшественники керамических модифицированных хромом алюмоиттриевых волокон, в частности, хромсодержащих гранатовых волокон.

- Показано, что хромсодержащие иттрийоксаналюмоксановые олигомеры хорошо растворимы в углеводородных и спиртовых растворителях и, следовательно, их растворы могут использоваться в качестве связующих для матриц или пленкообразующих композиций для барьерных и защитных покрытий.

- Используя моделирование, сделан расчёт структур возможных исходных органоалюмоксановых и органоиттрийоксаналюмоксановых олигомеры, а также образующихся органохромоксаналюмоксановых и органохромоксанииттрийоксаналюмоксановых фрагментов, проведена их визуализация.

Личный вклад автора. Диссертантом осуществлен сбор и анализ данных по теме исследования, а также выполнен основной объем экспериментальной работы - синтез исходных: органоалюмоксанов и органоиттрийоксаналюмоксанов с разным мольным отношением Al/Y; детально исследован процесс соконденсации органоиттрийоксаналюмоксанов с ацетилацетонатом хрома с разным мольным отношением Al/Y и Al/Cr, изучено влияние мольного соотношения Al/Y и Al/Cr на волокнообразующую способность хромсодержащих иттрийоксаналюмоксанов, а также процесс их термохимической трансформации. В программном комплексе «HyperChem» автором выполнены построение и расчёт структур органоалюмоксанов, органоиттрийоксаналюмоксанов и олигомерных органохромоксанииттрийоксаналюмоксанов. Автор принимал непосредственное участие в планировании экспериментов, обсуждении и интерпретации всех полученных результатов, подготовке материалов для публикации в научных журналах и представления на конференциях, включая написание, редактирование текстов рукописей и тезисов.

Достоверность экспериментальных данных и обоснованность положений и выводов диссертации подтверждается всей совокупностью современных физико-химических методов, использованных для характеристики

синтезированных соединений [спектроскопия ЯМР и ИК, элементный анализ, термогравиметрический анализ (TGA/SDTA), сканирующая электронная микроскопия, рентгеновский элементный микроанализ, рентгеновская дифрактометрия], а также тем, что описанные методики хорошо воспроизводятся, а полученные данные и выводы взаимно согласованы и не противоречат друг другу.

Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем ученой степени. Основное содержание диссертации достаточно полно отражено в трех опубликованных статьях в российских и зарубежных научных журналах (рекомендованных ВАК), одном патенте РФ и пяти тезисах докладов.

Обоснованность и достоверность основных положений, выводов и рекомендаций, содержащихся в диссертации. Выносимые автором на защиту научные положения являются результатом эксперимента, совокупностью данных, полученных с помощью комплекса физико-химических методов анализа, а также данных, полученных комплексом современных квантово-химических методов. Полученные данные достоверны, грамотно интерпретированы, выводы обоснованы.

По итогам обсуждения было принято решение, что диссертационная работа Шаухина Максима Константиновича представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая отвечает требованиям пунктов 9–14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842 (ред. от 29.05.2017), предъявляемым к кандидатским диссертациям. Диссертационная работа соответствует паспорту специальности 1.4.8 – «Химия элементоорганических соединений» (пункты 1,2,6,7 Областей исследований) и 1.4.7 – «Высокомолекулярные соединения» (пункты 2,6,9 Областей исследований).

Диссертация «Синтез хромсодержащих иттрийоксанолюмоксанов, изучение свойств и расчет молекулярных структур олигомерных молекул - предшественников алюмоиттриевой керамики, модифицированной хромом» Шаухина Максима Константиновича, рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.8 – «Химия элементоорганических соединений» и 1.4.7 – «Высокомолекулярные соединения».

Заключение принято на заседании кафедры химии и технологии переработки пластмасс и полимерных композитов Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «МИРЭА – Российский технологический

университет» Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова.

На заседании присутствовали 19 человек. Результаты голосования: «за» - 19 чел., «против» - нет, «воздержалось» - нет; протокол №8 от «15» мая 2025 г.

И.о. зав. кафедрой химии и
технологии переработки
пластмасс и полимерных
композитов, д.т.н., профессор

И.Д. Симонов-Емельянов

Ученый секретарь кафедры
химии и технологии переработки
пластмасс и полимерных
композитов, к.х.н.

А.Н. Ковалева