

Рецензія

на дисертаційну роботу Осокіна Євгена Сергійовича

на здобуття ступеня доктор філософії у галузі знань

10 Природничі науки, за спеціальністю 102 Хімія

ЕЛЕКТРОДНІ ТА ХІМІЧНІ РЕАКЦІЇ π -КОМПЛЕКСІВ КУПРУМУ

Актуальність теми дисертаційної роботи. Серед напрямків сучасних хімічних досліджень квантово-хімічне моделювання хімічних сполук та процесів належить до тих, що зараз бурхливо розвиваються та набувають все більшого поширення. Особливо актуально застосування розрахунків за DFT та QTAIM методами до практично важливих систем, фізичне дослідження яких утруднене в силу об'єктивних причин. До подібних систем, безумовно, можна віднести нанодисперсні мідні порошки з інтеркальованою часткою органічного компоненту у вигляді функціонально заміщених алкенів – об'єкт дослідження даної дисертаційної роботи.

Структура роботи. Дисертація Осокіна Є.С. змістовно та логічно поділена на чотири розділи. У першому наведений огляд літературних джерел за темою дослідження та зроблений висновок про недостатній об'єм інформації про будову та утворення у розчинах ацидоаквакомплекси Купруму. Використана література є сучасною та здебільшого опублікована у журналах з високими індексами цитування. Другий розділ присвячений методам та методикам досліджень – як розрахункових, так і експериментальних. Слід відзначити власний внесок автора – програмне забезпечення, що дозволяє прискорити процес моделювання та оригінальні розрахунки іонних рівноваг у розчині. У третій частині – квантово-хімічні розрахунки та їх аналіз, а у четверту зібрані проведені здобувачем експериментальні дослідження, що здатні прямо або непрямо підтвердити результати розрахунків з розділу III. Наведені ілюстративні матеріали доречні, порядок викладання логічно обґрунтований, текст містить одруки, але в невеликій кількості.

Новизна та обґрунтованість висновків. У представленій роботі вперше: з використанням QTAІМ методу продемонстровано особливості $d\pi$ - π -зв'язування у π -комплексах Купруму в низьких ступенях окиснення, включаючи атомарну мідь; висвітлено вплив молекул води внутрішньої координаційної сфери на структуру та енергетику комплексів Купруму з малеїною, фумаровою та акриловою кислотами; виявлені деталі механізму електрохімічних процесів за участі ацидоаквакомплексів Купруму з ненасиченими органічними кислотами; розроблено методики препаративного синтезу π -комплексів Купруму та мідьорганічних дисперсій на їх основі.

Завдяки багаточисленным методам дослідження, задіяним у дисертаційній роботі (квантово-хімічне моделювання за DFT та QTAІМ методами; вольтамперометрія з лінійною розгорткою потенціалу та циклічна вольтамперометрія; спектрофотометрія; седиментаційний аналіз; ІЧ-спектроскопія, термогравіметрія, растрова електронна мікроскопія та енергодисперсійний аналіз), отримані нові оригінальні результати, які мають наукову та практичну цінність для наряду розробки композиційних наноструктурованих матеріалів широкого застосування на основі 3d-металів. Моделлю для експериментальної частини стали тільки комплекси Купруму з малеїною кислотою. На мій погляд, обрання саме цього об'єкта бажано було б обґрунтувати, але на загальне позитивне враження від роботи це не впливає. Обмеженість об'єктів експериментального розгляду не дозволяє повністю перевірити всі розрахунки розділу ІІІ, але дає досить повноцінне уявлення про практичні аспекти даної роботи, якими можуть бути пропрацьовані в дисертаційній роботі методики синтезу π -комплексів Купруму та композитів на їх основі.

Висновки дисертаційної роботи є конкретними та обґрунтованими, повністю відповідають поставленій меті і завданням. Основні результати дослідження викладені у 34 наукових публікаціях, в тому числі у наукових журналах категорії А, пройшли апробацію на багатьох конференціях. У роботі відсутні ознаки порушення академічної доброчесності.

Висновок. Дисертаційна робота Осокіна Є. С. за актуальністю, методичним підходом її виконання, системністю та складністю, науковою новизною, обґрунтованими результатами дослідження, науковим та практичним значенням та оприлюдненням отриманих результатів в наукових працях відповідає вимогам *Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії від 12 січня 2022 р № 44*, а її автор заслуговує на присудження звання доктора філософії у галузі знань «Природничі науки» за спеціальністю 102 «Хімія».

Рецензент:

Доцент кафедри фізичної, органічної
та неорганічної хімії, канд. хім. наук, доц.

Катерина ПЛЯСОВСЬКА

Підпис доц. Плясовської К.А. засвідчую:

Проректор з наукової роботи

Дніпровського національного університету

імені Олеся Гончара

канд. біол. наук, доцент



Олег МАРЕНКОВ