

ОТЗЫВ

на автореферат Палько Надежды Николаевны «Структура и физико-химические свойства агломератов, включающих атомы переходных металлов», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Диссертационная работа Н.Н. Палько посвящена исследованию комплексов, включающих производные тетразина, осмиеевые кластеры и диоксид титана методами компьютерного моделирования. Актуальность работы обусловлена необходимостью установления строения комплексов, в случаях, когда это затруднительно сделать экспериментальными методами, и прогноза физико-химических свойств для получения новых материалов с заданными свойствами.

Автором определены экспериментальные и расчетные характеристики ИК спектров комплексов производных тетразинов с учетом влияния конформационного состояния и типа межмолекулярного взаимодействия. Установлены конформационные особенности трехосмиеевых кластеров при варьировании растворителей. Установлены важные межмолекулярные взаимодействия в комплексах наночастиц диоксида титана с красителями, аминокислотами и дипептидами. Определены новые дескрипторы, позволяющие прогнозировать адсорбцию, плотность тока короткого замыкания, эффективность преобразования солнечной энергии для систем с наночастицами диоксида титана различного диаметра. Практическое значение работы заключается в том, что проведенные в работе исследования позволили предложить строение комплексов производных тетразинов с солями металлов, установить растворители, которые могут быть использованы при разделении смеси ротамеров трехосмиеевых кластеров, а также установить зависимости, позволяющие прогнозировать адсорбционные и фотоэлектрические свойства наночастиц диоксида титана. Основные результаты и выводы соответствуют поставленным задачам. Публикации автора в полной мере отражают содержание и основные выводы диссертации.

Таким образом, диссертация подготовлена на актуальную тему, содержит новые научные и практические результаты, представляет собой законченную научно-квалифицированную работу и полностью отвечает требованиям п. 9 – 14 Положения о присуждении учёных степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г., а её автор, Палько Надежда Николаевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Полевщикова Елена Евгеньевна

Кандидат биологических наук, 03.01.04 – Биохимия

доцент кафедры фармации и химии фармацевтического факультета ФГБОУ ВО «Южно-Уральский государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации. 454141, г. Челябинск, ул. Воровского, 64, тел.: +79028600155 e-mail: caramella-a@mail.ru

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись заверяю:



Полевщикова Елена Евгеньевна
«06» .12.... 2024 г.

