

РІШЕННЯ
разової спеціалізованої вченої ради про присудження ступеня доктора
філософії

Здобувач ступеня доктора філософії Олександр Лагута, 1997 року народження, громадянин України, освіта вища: закінчив у 2020 році Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара за спеціальністю 102 Хімія, виконав акредитовану освітньо-наукову програму Хімія

Разова спеціалізована вчена рада, утворена наказом Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара, Міністерства освіти і науки України, м. Дніпро від "04" червня 2024 року №532с у складі:

Голова разової ради – Віталій Пальчиков, д-р хім. наук, проф., в.о. директора НДІ хімії та геології, Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара.

Рецензенти - Олександр Гапонов, канд. хім. наук, с.н.с., старший науковий співробітник НДІ хімії та геології, Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Андрій Аніщенко, канд. хім. наук, доц., доцент кафедри фізичної, органічної і неорганічної хімії, Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Офіційні опоненти - Олександр Голіченко, д-р хім. наук, проф., в.о. завідувача кафедри неорганічної хімії, Державний вищий навчальний заклад “Український державний хіміко-технологічний університет” (з 11.04.2024 Український державний університет науки і технологій)

Андрій Токар, канд. хім. наук, доц., доцент кафедри хімії, Дніпровський державний аграрно-економічний університет

на засіданні "31" серпня 2024 року прийняла рішення про присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки Олександру Лагуті на підставі публічного захисту дисертації "Мідьорганічні дисперсії на основі π -комплексів. Синтез та властивості" за спеціальністю 102Хімія.

Дисертацію виконано у Дніпровському національному університеті імені Олеся Гончара, Міністерства освіти і науки України, м. Дніпро.

Науковий керівник Варгалюк Віктор Федорович, доктор хімічних наук, професор, професор кафедри фізичної, органічної і неорганічної хімії, Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Дисертацію подано у вигляді спеціально підготовленого рукопису

Здобувач має 10 публікацій, серед яких 3 статті, які входять до наукометричної бази даних Scopus:

1. Synthesis of copper composites containing maleic acid / V. F. Vargalyuk, V. A. Polonsky, Y. S. Osokin, O. V. Lahuta // Journal of Chemistry and Technologies. – 2021. – Vol. 29, No. 3. – P. 400–409. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v29i3.241965>

2. Фізико-хімічні та бактерицидні властивості мідьвмісних композитів на основі малеїнатних комплексів Cu^+ / В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський, Т. В. Скляр, Н. В. Стець, О. В. Лагута // Journal of Chemistry and Technologies. – 2023. – Vol. 31, No. 2. – P. 208–215. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v31i2.275070>

3. Особливості будови мідьвмісних композитів на основі малеїнатних комплексів Cu^+ / О. В. Лагута, В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський, О. І. Кушнерьов // Journal of Chemistry and Technologies. – 2023. – Vol. 31, No. 4. – P. 727–733. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v31i4.290194>

У дискусії взяли участь голова, рецензенти, офіційні опоненти та висловили зауваження:

Пальчиков Віталій Олександрович, доктор хімічних наук, професор (Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, в.о. директора НДІ хімії та геології):

Зауважень немає

Гапонов Олександр Олексійович, канд. хім. наук, с.н.с., старший науковий співробітник НДІ хімії та геології, Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара:

У процесі рецензування принципових зауважень щодо змісту роботи та її оформлення не виникло.

Зауваження:

1. В роботі не наведено список скорочень. Деякі речовини позначаються по різному в різних розділах. Це ускладнює сприйняття матеріалу.

2. На мій погляд, дуже скорочена методика мікробіологічних досліджень. Для розуміння умов проведення дослідів та обробки результатів цю частину необхідно було б розширити.

3. Для кращого аналізу результатів квантово-хімічного моделювання біядерних структур, які можуть утворюватись в мідьвмісних композитах, необхідно продемонструвати також вихідну молекулу малеїнатного комплексу. Її параметри згадуються, але доцільно було б продемонструвати об'єкт у повному вигляді.

Дисертація також містить ряд описок, граматичних помилок та невдалих виразів.

Але у цілому ці зауваження не мають принципового характеру та жодним чином не зменшують наукової і практичної цінності отриманих автором наукових результатів.

Аніщенко Андрій Олександрович, канд. хім. наук, доц., доцент кафедри фізичної, органічної і неорганічної хімії, Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара:

Принципових зауважень щодо змісту і оформлення дисертаційної роботи, а також щодо отриманих результатів немає. В процесі рецензування знайдено деякі недоліки, які не впливають на позитивну оцінку роботи в цілому. Наприклад, заважає сприйняттю матеріалу формульне відображення комплексних сполук. Позначення лігандів в тексті змінюється не завжди «розшифровується». Для деяких сполук автор навіть приводить структури, сформовані, як результати розрахункових методів, але в тексті відсутні спроби саме відтворити структурну формулу комплексу, або його елементів, це дійсно заважає сприйняттю матеріалу.

В порядку наукової дискусії прошу дисертанта відповісти на наступні питання:

На початку третього розділу автор стверджує, що:

- Квантово-хімічний аналіз взаємодії продуктів відновлення іонів Cu^{2+} з ненасиченими органічними кислотами показав [81, 82], що і іони Si^{+} і атоми Si^0 здатні утворювати термодинамічно стійкі комплекси, в яких центральний атом пов'язаний з лігандами не тільки σ -зв'язками, але і π -зв'язками.

Далі, за допомогою методу комплексонометричного титрування автор приходять до наступного висновку:

- Тобто отримані результати однозначно вказують на те, що атомарна мідь в осаді знаходиться не у вигляді π -комплексу, а є індивідуальною речовиною.

Таким чином, стає незрозумілим, стан катіонізованого Купруму в сполуках отриманих автором.

Автор стверджує, що склад отриманих дисперсії змінюється в залежності від мольного співвідношення реагентів $\text{Zn} : \text{Cu}^{2+}$. При цьому максимальне співвідношення $\text{Zn} : \text{Cu}^{2+}$ складає 1:1, чому не використовувався надлишок відновлюючого реагенту?

В роботі постійно фокусується увага на здатності Купруму утворювати π -комплекси з подвійним зв'язком в малеїновій кислоті. Але не обговорюється координація, наприклад катіону Купруму з атомом Оксигену карбоксильної групи. Результати розрахункових даних показують, що така координація має місце.

Голіченко Олександр Анатолійович, д-р хім. наук, проф., в.о. завідувача кафедри неорганічної хімії, Державний вищий навчальний заклад «Український державний хіміко-технологічний університет» (з 11.04.2024 Український державний університет науки і технологій):

Цікава з наукової точки зору робота, на жаль, не позбавлена деяких зауважень:

1. Не зважаючи на те, що, навіть у назві дисертації, є слово «синтез» - у експериментальній частині відсутнє детальне описання методик синтезу (з вказанням мас та об'ємів реагентів), описані лише основні підходи до одержання комплексів та композитів. Так, наприклад, на стор. 70 написано «Синтезовано 6 зразків», точний склад аналізу яких представлений у табл. 3.2, але із тексту неможливо зрозуміти, яка методика одержання більшості цих зразків. Методика представлена лише у літературному огляді при аналізі роботи [7] (стор. 19). Крім того, із тексту (стор. 40) незрозуміло – як

контролювали «повне кількісне протікання реакції» при виборі співвідношення реагентів 0,2.

2. Рівняння 3.4 та 3.5 (стор. 69) по суті дублюють рівняння 3.1 та 3.2 (стор. 57) та відрізняються лише молекулою води, яка присутня у реакційних розчинах для усіх реакцій, описаних представленими рівняннями.

3. Для аналізу термічних властивостей одержаних сполук приводиться лише аналіз TG, хоча наявність DTA дозволяє точніше ідентифікувати процеси, які відбуваються при термічному розкладі. Судячи із тексту (наявність фрази «якщо припустити» - стор. 61) не проводився хімічний аналіз продуктів термічного розкладу, лише припускається утворення CuO та Cu_2C . Крім того, швидкість розгортки $100\text{C}/\text{хв}$ є доволі великою і часто не дозволяє фіксувати усі ефекти.

4. На стор. 71 описаний контроль переходу Cu^+ у Cu^{+2} за допомогою ЕСП, але такий же контроль бажано було б представити і у розділі 3.1 при описанні синтезу комплексних сполук і композитів, щоб була можливість одразу оцінити наявність саме Cu^+ та Cu^{+2} .

5. На стор. 75 вказано «Попередньо очікувалось, що за $x > 1$ в композиті викристалізується помітна кількість нанодисперсної міді, яка принаймні адитивно посилить дію комплексу. Однак спостерігається прямо протилежна картина», але у тексті дисертації недостатньо аргументовано (бажано із літературними посиланнями), чому прогнозувалась адитивність активності одержаних речовин.

6. У «Вимогах до оформлення дисертацій» зазначено, що перелік умовних позначень розташовується одразу після змісту для ознайомлення із скороченнями до початку читання тексту, тому незрозуміло, чому цей перелік приведений лише у додатку В.

7. Особливих претензій до стилістики роботи немає, хоча текст дисертації містить декілька граматичних/друкарських помилок або невдалих виразів, наприклад «була виміряна дериватограма» (стор. 61), «готувався насичений розчин» (стор. 71), «електронні спектри» (стор. 72). Крім того, у тексті дисертацій деякі рисунки розташовані не одразу після абзацу з текстом, а достатньо далеко від посилання на нього (навіть якщо на це є вільне місце), наприклад, рис. 3.5. Не співпадають позначки на рис. 3.12 з підписом (на рисунку немає номерів 1,2,3,4). Крім того, по тексту для Cu застосовуються одночасно різні назви «Купрум», «купрум», «мідь», хоча, згідно діючого ДСТУ 2439:2018 назва елемента пишеться з малої букви і основною назвою елемента є «мідь» із можливістю застосування латинської назви «купрум», але ці назви повинні бути однаковими по тексту.

Легко помітити, що усі зауваження носять дискусійний характер або є побажаннями і принципово не впливають на загальну позитивну оцінку дисертації.

Токар Андрій Володимирович, канд. хім. наук, доц., доцент кафедри хімії, Дніпровський державний аграрно-економічний університет:

До змісту дисертаційної роботи є наступні зауваження та запитання:

1. На початкових етапах дослідження з метою оптимізації умов синтезу металоорганічних дисперсії автором було проведено розрахунки складу вихідного розчину як функції величини рН та встановлено оптимальний рівень кислотності який відповідає майже повному зв'язуванню іонів Cu^{2+} у комплекс складу $[\text{Cu}(\text{HM})]^+$, що досягається при $\text{pH} = 2$. Чи варто вважати такий розчин слабокислим (с. 3, 77) та в якій формі у ньому переважно існуюватимуть молекули малеїнової кислоти з точки зору їх здатності до дисоціації?

2. На рис. 3.4 наведено графічну залежність розрахункових значень адсорбованої води від вмісту атомарної міді у зразках композиту (с. 60), що переконливо свідчить про негігроскопічність металу. Чи не виникає у зв'язку із цим логічна суперечність, пов'язана з подальшим моделюванням процесів утворення комплексних сполук типу $[\text{Cu}_2(\text{HM})(\text{H}_2\text{O})_2]$, що потребують залучення часток $\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})$ в якості атакуючого реагенту (с. 66)?

3. Чи робилися спроби експериментального визначення розмірів кристалів окремих фаз за характеристичними величинами 2θ в умовах проведення рентгеноструктурних досліджень (с. 68) та які критерії, у тому числі й квантово-хімічні, слід віднести до визначальних тд час обговорення особливостей хімічного зв'язування атомів Cu з молекулами комплексної солі?

Вищенаведені зауваження мають дискусійний характер та жодним чином не впливають на належний рівень дисертації на здобуття наукового ступеня доктора філософії. Спірність окремих положень притаманна будь-якій творчій роботі зокрема й науковій. Тому автору пропонується у подальшому здійснити творчий пошук науково аргументованих відповідей на поставлені запитання щодо спірних положень даної роботи. Висловлені зауваження не стосуються основного змісту дисертації, не ставлять під сумнів наукову новизну, теоретичну та практичну цінність роботи, особистий внесок автора, ґрунтовну методологічну базу, глибину та об'єктивність проведеного теоретичного та експериментального аналізу, достовірність отриманих результатів.

Результати відкритого голосування:

"За" 5 членів ради,

"Проти" 0 членів ради.

На підставі результатів відкритого голосування разова спеціалізована вчена рада присуджує Олександрю Лагуті ступінь доктора філософії з галузі знань 10 природничі науки за спеціальністю 102 Хімія

Відеозапис трансляції захисту дисертації додається.

Голова разової спеціалізованої
вченої ради


(підпис)

Віталій ПАЛЬЧИКОВ

