

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Миронюка Владислава Николаевича «Физико-химические закономерности протонирования и агрегации молекул производного порфирина в составе слоев Ленгмюра и пленок на твердых подложках», представляемой на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Диссертация Миронюка В.Н. посвящена актуальной теме – установлению закономерностей влияния состава и температуры субфаз на протонирование и агрегацию производного порфирина Р-ОН в ленгмюровских слоях и пленках на твердых подложках. Особенности строения молекул замещенных порфиринов, доступность их модификации по периферии макроцикла и в координационном центре делают эти соединения привлекательными для разработки функциональных материалов, которые находят применение в сенсорных и фотоэлектрических устройствах. При этом особое значение приобретают знания о самоорганизации и ориентации молекул порфиринов в пленках и ленгмюровских слоях. Выполненное исследование полностью соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия.

Автор демонстрирует глубокие знания в области химии порфиринов и использует системный подход к решению поставленных задач.

В работе выполнено оригинальное исследование процессов упаковки молекул производного порфирина (5-(4-гидроксифенил)-10,15,20-трис(4-гексадецилоксифенил)порфирина, Р-ОН) на поверхности воды в присутствии кислоты - H_3PO_4 , или поверхностно-активного вещества - додецилсульфата натрия, в водной субфазе. Подобраны условия, позволяющие получать сплошные пленки на твердых подложках, имеющие минимальную шероховатость. Установлено, что в перенесенных пленках присутствуют как протонированные, так и непротонированные молекулы порфирина с преобладанием агрегатов J-типа. Большой интерес представляют результаты экспериментов по изучению возможности управления оптическими, фотоэлектрическими свойствами перенесенных пленок Р-ОН посредством протонирования молекул порфирина в ленгмюровских слоях на поверхности отмеченных выше водных растворов H_3PO_4 и додецилсульфата натрия. Выполнено квантово-химическое моделирование геометрического строения нейтральных и протонированных форм Р-ОН и димеров Р-ОН || Р-ОН; Р-ОН || Р-ОН²⁺; Р-ОН²⁺ || Р-ОН²⁺ J-типа с разным числом дипротонированных форм. Показано, что при протонировании уменьшается разница в энергии граничных орбиталей $\Delta E_{\text{HOMO-LUMO}}$, что согласуется с результатами эксперимента - смещением положения полосы поглощения Q_1^* в длинноволновую область спектра.

Полученные результаты, расширяющие представления о самоорганизации молекул порфиринов и их протонированных форм в пленках и ленгмюровских слоях, могут быть использованы при разработке новых материалов для применения в фотоэлектрических и сенсорных устройствах.

