

## **ВІДГУК**

офіційного опонента про дисертаційну роботу  
**Корнія Сергія Андрійовича**  
**"Прогнозування механізмів взаємодії металевих систем з корозивним середовищем методами квантової хімії"**,  
подану на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук  
за спеціальністю 05.17.14 – хімічний опір матеріалів та захист від корозії

### **1. Актуальність теми дисертаційної роботи**

Наразі актуальним є розвиток нових підходів до вивчення процесів руйнування металів. Дисертаційна робота Корнія С.А. присвячена їх розгляду на рівні атомно-молекулярних взаємодій корозивного середовища з поверхнею металу методами квантової хімії. Це важливо для більш глибокого розуміння механізму корозії, в тому числі сплавів, наночастинок та ін. матеріалів, прогнозування впливу локальних електродних ділянок на загальну корозію металів, вивчення дії і науково-обґрунтований вибір інгібіторів.

Для практики протикорозійного захисту вивчення детальних механізмів процесів корозійної деградації, зокрема платинових бінарних наночастинок, буде сприяти створенню ефективних каталітичних електродів для електрохімічних джерел струму, що є вкрай необхідним для стабільного економічного розвитку країни.

### **2. Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами**

Доцільність та своєчасність дисертаційної роботи Корнія С.А. підтверджена зв'язком з низкою тем науково-дослідницьких робіт, які виконувалися протягом 2005-2016 рр., у відповідності з замовленням НАН України, проектами цільової комплексної програми фундаментальних досліджень НАН України, проектом державної цільової науково-технічної програми «Нанотехнології та наноматеріали», проектом програми цільових досліджень та розвиваючих ініціатив (УНТЦ–НАН України), в яких автор був відповідальним виконавцем.

### **3. Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків і рекомендацій сформульованих у дисертації та їх достовірність**

Зміст дисертації Корнія С.А. викладено з урахуванням існуючих теорій фундаментальних наук та надбань практики. Наукові положення і висновки, сформульовані у дисертації, є достатньо обґрунтованими, що забезпечено використанням квантово-хімічного методу функціоналу густини в кластерному наближенні із використанням обмінно-кореляційних функціоналів для опису взаємодії між атомами металів та застосуванням ліцензійних програмних пакетів StoBe та NWChem. Для розрахунку адсорбції складників корозивного середовища на поверхні використано напівемпіричні методи квантової хімії, які широко застосовуються та добре описують ці взаємодії.

Про достовірність отриманих результатів квантово-хімічної оцінки корозійної тривкості інтерметалідів алюмінію в середовищі та інгібувальної здатності рамноліпідів і модифікованих цеолітів свідчить їх узгодженість з

експериментальними даними. Про достовірність комплексної методики оцінювання корозійно-морфологічної стабільності бінарних наночастинок платини в середовищі свідчить узгодженість отриманих результатів із розрахунковими та експериментальними даними інших авторів.

Основні положення та висновки дисертації обговорені на авторитетних міжнародних конференціях, таких як «Проблеми корозії і протикорозійного захисту конструкційних матеріалів»; 20<sup>th</sup> International Corrosion Congress & Process Safety Congress – EUROCORR 2017; International Workshop «Materials resistant to extreme conditions for future energy systems»; International Symposium «Methods and Applications of Computational Chemistry» та ін.

Достовірність практичних рекомендацій підтверджена патентами України на корисну модель (№78503 Грунтувальна композиція для антикорозійного покриття; №78529 Спосіб отримання нанорозмірного фосфату цинку) та актами впровадження та перевірки результатів на ДПЦ «Львівантикор», НВК «Галичина», ТОВ «Універсальна бурова техніка» затвердженими у чинному порядку.

#### **4. Структура та зміст дисертації**

Основний зміст дисертації Корнія С.А. викладено за класичною схемою – від аналізу відомої інформації з огляду науково-технічної літератури через теоретичні дослідження шляхом квантово-хімічних розрахунків, експериментальну перевірку зроблених висновків до практичного підтвердження ефективності наукових розробок, формулювання висновків. Загальний обсяг дисертації становить 399 сторінок, в тому числі анотація, вступ, вісім розділів, загальні висновки, список використаних джерел та чотири додатки. Обсяг основного тексту дисертації складає 325 сторінок, робота ілюстрована 60 таблицями та 110 рисунками, список використаних джерел містить 416 найменувань, що відповідає вимогам до обсягу та структури докторських дисертацій.

*У вступі* обґрунтовано актуальність розроблення нових наукових підходів для вивчення корозійних процесів на локальних ділянках поверхні металів і сплавів та розвитку методик теоретичного оцінювання та прогнозування стабільності і корозійної тривкості багатокомпонентних матеріалів у агресивних середовищах із використанням квантово-хімічних методів. Сформульовано мету, основні завдання та напрямки її досягнення.

*У першому розділі* проаналізовано сучасний стан використання методів квантової хімії до розрахунку процесів взаємодії металів та сплавів із корозивним середовищем. Показано недосконалість існуючих квантово-хімічних моделей корозійного руйнування матеріалів. Наведено моделі корозійного розчинення поверхні із використанням атомістичних підходів та здійснено порівняльний аналіз їх можливостей для адекватного опису взаємодії компонентів середовища з поверхнею. Проаналізовані існуючі моделі трибокорозійної взаємодії двох металів. Розглянуті основні фізико-хімічні процеси на поверхні нанорозмірних платинових електродів паливних комірок, які спричиняють їх деградацію та корозійне руйнування. Показано доцільність застосування методів квантової хімії

для оцінювання інгібувальних властивостей різних сполук на поверхні матеріалів на основі встановлення кореляції між їх структурою та протикорозійною активністю.

*У другому розділі* розвинуто методичні підходи для моделювання поверхні металу та квантово-хімічного розрахунку його взаємодії з корозивним середовищем, запропоновано комплексну методику теоретичної оцінки та прогнозування стабільності і корозійної тривкості багатокомпонентних систем. Обґрунтовано вибір кластерних моделей поверхні для алюмінію, інтерметалідів ( $\text{Al}_2\text{Cu}$  та  $\text{Al}_2\text{CuMg}$ ) та бінарних наночастинок платини.

Розвинуто методику квантово-хімічного розрахунку взаємодії корозивного середовища з кластерами на багатокомпонентні системи з урахуванням водного середовища, зарядів корозійно-активних іонів та поверхні.

Виконано порівняльний аналіз методів квантової хімії та акцентовано на необхідності використання методу функціоналу густини для обчислення характеристик хімічних зв'язків на поверхні металу в середовищі з урахуванням електронної кореляції для багатоелектронних атомів. Розроблену методику апробовано для розрахунку взаємодії атомів водню з кластерами заліза. Обґрунтовано вибір квантово-хімічних програм для моделювання систем метал–корозивне середовище.

*У третьому розділі* наведено результати квантово-хімічних досліджень механізмів взаємодії корозивного середовища з локальними електродними ділянками поверхні алюмінієвих сплавів – інтерметалідами  $\text{Al}_2\text{Cu}$  та  $\text{Al}_2\text{CuMg}$ . Методом функціоналу густини оцінено їх корозійну тривкість у водному середовищі із вмістом гідроксид- та хлорид-іонів. Встановлено, що поверхня (110) інтерметаліду найбільш схильна до корозійного руйнування, що зумовлено її ступеневою будовою та вищою енергією зв'язку хлорид-іона з нею. При цьому гідроксид-іон на поверхні кластерів інтерметалідів має меншу реакційну здатність порівняно із хлорид-іоном. В інтерметаліді реакційна здатність шару алюмінію змінюється внаслідок міцнішого зв'язку з хлорид-іонами у міжвузлях, ніж з гідроксил-іонами у місткових положеннях.

Розрахунками доведено селективне корозійне руйнування інтерметалідних сполук  $\text{Al}_2\text{Cu}$  та  $\text{Al}_2\text{CuMg}$ . Встановлено зв'язок між зміною заряду поверхні (100) кластера  $\text{Al}_2\text{Cu}$  та енергією міжатомного зв'язку алюмінію та міді під впливом корозійно-активних складників середовища. Виявлено, що зміна заряду поверхні несуттєво впливає на міжатомні зв'язки в кластері під час взаємодії його з молекулами води, окрім зв'язку Al–Al. Встановлено, що хлорид-іон найвідчутніше впливає на енергію міжатомних зв'язків кластера інтерметаліду.

Встановлено збільшення відносної енергії зв'язку під час адсорбції молекули води на деформованих кластерах. Показано, що вплив деформації на зв'язування хлорид-іонів з поверхнею кластерів значно сильніший, ніж молекул води.

*У четвертому розділі* з використанням квантово-хімічного підходу вивчено інгібувальні властивості поверхнево-активного рамноліпідного біокомплексу на поверхні алюмінієвих сплавів. Експериментально встановлено, що біокомплекс є ефективним в інгібуванні корозії алюмінієвого сплаву Д16Т у дистильованій воді та 0,1%-му розчині натрію хлориду. Більш значний протикорозійний ефект

досягається при використанні синергічної суміші фосфат цинку–рамноліпідний біокомплекс.

Встановлено, що електронні та геометричні характеристики молекули рамноліпиду є важливими параметрами для прогнозування її реакційної здатності на поверхні металу. Показано, що рамноліпід може інгібувати поверхню металу (алюміній або мідь) через адсорбційне зв'язування гідрофільних частин карбоксильних, карбонільних і гідроксильних груп за донорно-акцепторним механізмом. Молекули рамноліпиду здатні утворювати комплексні сполуки з катіонами розчину та солубілізувати слабозрочинні неорганічні речовини, які містять фосфатний залишок.

Одержані результати використано для оптимізації складу нової інгібувальної композиції рамноліпідного біокомплексу, ефективність якої підтверджено дослідно-промисловою перевіркою на НВК «Галичина» (м. Дрогобич).

*У п'ятому розділі* виконано квантово-хімічні розрахунки геометричної та електронної структур іонно-модифікованих цеолітів клиноптилолітового типу та їх синергічних композицій з цинком та кальцієм, оцінено їх інгібувальну здатність на алюмінієвому сплаві. Розраховано характеристики взаємодії поверхневих атомів Оксигену клиноптилоліту з іонами кальцію, цинку, алюмінію та міді. Показано, що перелічені іони суттєво впливають на стабільність кластерів цеоліту  $\text{Ze}(\text{SiO}_2)_{30}$ .

Встановлено, що іони кальцію значно менше впливають на структурний стан кластера зазначеного цеоліту, про що свідчать менші енергії їх зв'язку та віддалі взаємодії. Розраховані геометричні та електронні характеристики кластерів цеолітів зі сорбованими іонами дозволили зробити висновок про суттєвий вплив клиноптилоліту на властивості агресивних середовищ на поверхні металів. Зокрема, цеоліти, які містять надлишок іонів кальцію, більш схильні до сорбції іонів водню і можуть запобігати проникненню цих іонів до поверхні металу, сповільнюючи корозійне руйнування.

На підставі отриманих даних здійснено оптимізацію складу інгібувальних пігментів на основі цеолітів та наноструктурованих фосфатів для лакофарбових покриттів, розроблених за участі ДПЦ «Львівантикор».

*У шостому розділі* наведено результати моделювання впливу корозивного середовища на контактну взаємодію металів та запропоновано методіку квантово-хімічного розрахунку поверхневої енергії та енергії контактної взаємодії.

Виявлено, що поверхнева енергія суттєво залежить від кристалографічної орієнтації поверхні: для ГЦК металів вона найбільша на грані (111), а для ОЦК металів – на грані (110). Встановлено, що молекула води між кластерами спричиняє збільшення енергії адгезії для всіх розглянутих кластерів майже на 9%, тоді як корозійно-активні іони  $\text{Cl}^-$  підвищують її у 1,3–3,8 рази, що зумовлено формуванням гідратованого хлорид-іона, який утворює комплекс з атомами металу, посилюючи так енергію взаємодії. Встановлено, що за наближення різнорідних кластерів існує певний зарядовий максимум, значення якого змінюється залежно від складу середовища. Отримані результати пояснено елементами теорії структурно-термічної активації поверхні під час трибокорозії.

*У сьомому розділі* досліджено корозійно-морфологічну стабільність бінарних наночастинок платини як електродів низькотемпературних паливних комірок у корозивному середовищі, оцінено їх стійкість до окиснення. Квантово-хімічним методом функціоналу густини оптимізовано кубооктаедричні бінарні нанокластери оболонкової структури та розраховано їх енергетику взаємодії з компонентами корозивного середовища. Виявлено, що молекули води впливають на поверхневі властивості бінарних нанокластерів у надатомних адсорбційних положеннях через збільшення електронного заряду на поверхневих атомах платини і атомах підповерхневого шару. Встановлено визначальну роль легувального складника у формуванні підвищеної реакційної здатності поверхневого шару нанокластерів.

Розраховано енергію зв'язку атомарного та молекулярного кисню з поверхнями нанокластерів. Встановлено, що визначальний вплив на адсорбцію молекули кисню на цих структурах мають атоми поверхневого шару нанокластерів. Показано, що іони хлору можуть суттєво впливати на поверхневий стан нанокластерів платини, що проявляється у розчиненні поверхневих атомів платини із утворенням гідратованих хлоридів платини із блокуванням активних центрів поверхні. Комплексні сполуки частково іонізованого атома платини зі складниками середовища, які її стабілізують енергетично, можуть відходити від поверхні у розчин.

*У восьмому розділі* наведено результати квантово-хімічного моделювання деградації бінарних наночастинок платини отруєнням їх поверхні монооксидом вуглецю, сірководнем та діоксидом сірки. Встановлено, що ядро бінарних нанокластерів суттєво впливає на їх стійкість до отруєвання. Показано, що молекула CO зв'язується з поверхнею нанокластера Pt<sub>42</sub>Fe<sub>13</sub> у надатомних положеннях, а з рештою нанокластерів – у міжвузлових зі зростанням довжини зв'язку в CO у ряду Pt<sub>42</sub>Fe<sub>13</sub> < Pt<sub>42</sub>Ni<sub>13</sub> < Pt<sub>42</sub>Co<sub>13</sub>. Встановлено лігандний механізм впливу нікелю на зв'язування Pt–CO. З'ясовано, що сірководень на поверхні нанокластера Pt<sub>42</sub>Co<sub>13</sub> зв'язується міцно у всіх адсорбційних положеннях. Енергія зв'язку діоксиду сірки збільшується на всіх розглянутих нанокластерах аналогічно сірководню. Зроблено висновок, що для підтримання високих функціональних характеристик наночастинок PtCo необхідно очистити середовище паливних комірок від сірковмісних сполук. У роботі запропоновано характеристику адсорбційної здатності бінарного нанокластера – енергетичну активність.

Висновки, зроблені дисертантом з проведених досліджень, охоплюють весь обсяг отриманих результатів і є достовірними.

В додатках роботи представлено акти промислово-дослідної перевірки запропонованих протикорозійних матеріалів (пігментів, інгібувальної композиції на основі рамноліпідного біокомплексу, композиційних додатків до мастильних матеріалів), патенти України на корисну модель, приклади вихідних файлів розрахункових програм.

В цілому за змістом дисертація є завершеною роботою, яка забезпечує суттєвий внесок у теоретичну складову науки та практику хімічного опору матеріалів і захисту від корозії.

Тема та зміст дисертації відповідають паспорту спеціальності 05.17.14 – хімічний опір матеріалів та захист від корозії. Оформлення дисертаційної роботи відповідає чинним вимогам.

### **5. Наукова новизна отриманих в роботі результатів, сформульованих положень та висновків**

До нових наукових результатів, одержаних здобувачем особисто, слід віднести те, що Корнієм С.А. удосконалено методичний підхід для теоретичного оцінювання та прогнозування корозійної тривкості багатокомпонентних металевих систем на атомно-молекулярному рівні із використанням методу функціоналу густини, що дозволяє коректно враховувати ефекти структурної та енергетичної релаксації активних центрів поверхні у корозивному середовищі.

Вперше квантово-хімічними розрахунками встановлені атомно-молекулярний механізм та закономірності руйнування інтерметалідів  $Al_2Cu$  та  $Al_2CuMg$  у лужному та кислому середовищах.

Запропоновано механізм інгібувальної дії поверхнево-активного рамноліпідного біокомплексу на алюмінієвих сплавах, який полягає у формуванні рамноліпідних комплексів з корозійно розчиненими катіонами алюмінію і міді та комплексів, утворених взаємодією рамноліпиду з малорозчинними фосфатами кальцію та цинку з одночасним вивільненням у середовище фосфат-іонів.

Корієм С.А. поглиблено теоретичні уявлення про механізм впливу складників корозивного середовища на поверхні контактуючих металів. Встановлено, що енергія контактної взаємодії металічних кластерів у хлоридовмісному середовищі змінюється внаслідок перерозподілу заряду або електронної густини в енергетично вигідних трьохцентрових та місткових положеннях поверхні.

Встановлено фізико-хімічні закономірності впливу ядра бінарних наночастинок оболонкової структури  $PtMe$  (де  $Me$  –  $Fe$ ,  $Co$ ,  $Ni$ ,  $Cr$ ) на їх взаємодію зі складниками середовища паливних комірок, зокрема  $O_2$ ,  $CO$ ,  $H_2S$  та  $SO_2$ . Показано, що менша реакційна здатність до окиснення бінарних наночастинок  $PtCo$  визначається зміною міжатомних віддалей  $Pt-Pt$  та електронними властивостями атома кобальту підповерхневого шару.

Встановлено закономірності структурно-енергетичної деградації бінарних нанокластерів  $Pt_2Me_{13}$  під впливом іонів  $Cl^-$ ,  $OH^-$ ,  $H_3O^+$ . Виявлено можливість утворення поверхневого комплексу  $[Pt^{n+}(OH^-)(H_2O)_4]^{n-1}$ , енергія активації виходу якого у середовище є більшою для нанокластерів з кобальтом та рутенієм. Показано, що локальна взаємодія хлорид-іонів із гідратованою поверхнею нанокластерів може призводити до блокування активних центрів поверхні через високу їх адсорбційну здатність або до розчинення поверхневих атомів платини з утворенням комплексів  $[(PtCl^-)H_2O]^{n-1}$ .

### **6. Значення одержаних результатів**

В роботі Корнія С.А. на підставі розроблених атомно-молекулярних моделей корозії та побудованих залежності параметрів взаємодії складників середовища з

поверхнею багатоконпонентних металевих систем від їх структури та складу встановлено функціональний взаємозв'язок між розрахованими квантово-хімічними методами характеристиками впливу середовища на метали та їх корозійними властивостями. Це є важливим для удосконалення спрямованого підбіру матеріалів для їх використання в корозивних середовищах.

Запропонована Корнієм С.А. комплексна методика теоретичного оцінювання корозійно-морфологічної стабільності бінарних наночастинок із використанням методу функціоналу густини дала змогу коректно враховувати відгук кристалічного оточення на структурні зміни активних центрів поверхні та застосовувати розвинутий підхід для побудови атомно-молекулярних моделей, які відповідають сучасному рівню деталізації корозійних процесів на нанорівні.

Надані практичні рекомендації до прогнозування властивостей та створення нових ефективних бінарних наноматеріалів на основі платини для низькотемпературних паливних комірок.

Розроблені методичні підходи дозволили встановити енергетично стабільні структури бінарних наночастинок срібло–мідь як додатків до мастильних матеріалів, що використовують у вузлах бурових доліт для зниження коефіцієнту тертя і зменшення трибокорозійного руйнування сталі.

Пояснено механізм дії нових ефективних екологічнобезпечних інгібіторів корозії на основі рамноліпідних біо-ПАР, які опробовані на НВК «Галичина». Створено та оптимізовано склад інгібувальних пігментів на основі модифікованих цеолітів для лакофарбових ґрунтувальних покриттів на поліуретановій основі (патенти України №№ 78503, 78529), які впроваджені на ДППЦ «Львівантикор».

## **7. Повнота викладу основних результатів дисертації в опублікованих працях**

Основні результати дисертації опубліковано в 47 наукових працях. З них 2 розділи у монографіях, 29 статей у наукових фахових виданнях України та інших держав, з яких 13 статей індексовані міжнародними наукометричними базами; два патенти України на корисну модель та 14 публікацій у матеріалах міжнародних конференцій та симпозіумів. Аналіз друкованих праць дозволяє зробити висновок про те, що основні результати дисертації викладені повністю.

## **8. Мова та стиль дисертації**

Дисертаційна робота написана державною мовою, поділ на розділи логічний і обґрунтований. Застосована в роботі наукова термінологія є загально визнаною, стиль викладення результатів теоретичних і практичних досліджень, нових наукових положень, висновків і рекомендацій забезпечує доступність їх сприйняття. Результати достатньо проілюстровані рисунками, діаграмами та графіками.

## **9. Зауваження до дисертаційної роботи**

1. У розділі 2 доцільно було навести кількісний склад рамноліпідного біокомплексу для кращого розуміння наведених у розділі 4 експериментальних даних та запропонованого механізму дії інгібітору.

2. У розділі 3 доцільно було б розвинути запропоновані підходи, зокрема моделювання взаємодії іонів корозивного середовища з поверхнею кластера, на випадок наявності на поверхні алюмінію оксидної плівки, що має місце в корозивних середовищах в широкому інтервалі рН.

3. У розділі 4:

- результати наведені у табл. 4.1 (стор. 191) не відповідають рис. 4.3, зокрема значення потенціалів корозії;
- твердження про синергізм захисної дії органо/неорганічної композиції (стор. 190) не обґрунтовано, зокрема не наведено коефіцієнт синергізму;
- не зрозуміло, чому для обчислення значень функції Фукуї і, відповідно з'ясуванню можливих адсорбційних центрів, табл. 4.2 (стор. 200) вибрані лише дві з 3-х наявних у молекулі гідроксильних груп, карбонільна та карбоксильна. При цьому не розглядаються атоми Оксигену у складі простого ефірного зв'язку та рамнозного циклу. Також відсутній чіткий висновок про характер адсорбції рамноліпиду на поверхні алюмінію, адсорбційно-реакційні центри, які її забезпечують, та їх роль;
- доцільно було спочатку показати переваги застосування теорії функціоналу густини для пояснення дії інгібіторів на більш простих молекулах з встановленим механізмом інгібування, а потім застосовувати його для рамноліпідного комплексу;
- оцінку розчинності органічної речовини у воді більш коректно здійснювати на підставі розрахунку коефіцієнта ліофільності, а не дипольного моменту (стор. 196). Також безпосередньо розчинність сполук можна оцінити з використанням програми ACDlabs/SolDb;
- для підтвердження міркувань, щодо дисоціації рамноліпиду (стор. 202), доцільно було обчислити та навести константу дисоціації;

4. У розділі 5:

- значення теплоти утворення кластерів цеолітів (табл. 5.1. стор 219, табл. 5.4. стор. 220) краще було подати у кДж/моль та використовувати єдині в межах роботи одиниці виміру енергетичних характеристик;
- невіддале за розміром позначення атомів Оксигену (кисню) на рис. 5.2 (стор. 218) не дозволяє проаналізувати результати табл. 5.3 (стор. 220), рис. 5.6 та табл. 5.5 (с. 224);
- при обговоренні експериментальних даних представлених у вигляді рис. 5.8 (стор. 231) доцільно було навести значення струмів корозії та коефіцієнтів інгібування. Твердження про досягнення синергетичного протикорозійного ефекту потребує кількісної характеристики, зокрема обчислення коефіцієнту синергізма. Не обговорено також наявність області пасивації на анодній кривій в інтервалі потенціалів -200...-280 мВ при дослідженні суспензії цеоліту, модифікованого кальцієм;

5. У розділі 6 потребує пояснення використання саме гліцерину (стор. 244) для моделювання корозивного середовища.

6. У тексті зустрічаються окремі друкарські помилки та недоречності, зокрема стор. 119 (формула 2.19), стор. 204 (підпис до рис. 4.11), стор. 194 (зображення молекули рамноліпиду), стор. 212 (посилання на джерело 330), с. 246 (не відповідність позначень на рис. 6.5 підпису до рисунку).



Відмічені недоліки не применшують високої теоретичної та науково-практичної цінності дисертаційної роботи, яка написана грамотно та якісно оформлена.

Одержані в роботі результати можуть бути використані на підприємствах хімічної, металургійної, нафтогазової та переробної промисловості, в машинобудуванні та теплоенергетичній галузі.

#### **10. Відповідність автореферату змісту дисертаційної роботи**

Автореферат за структурою та технічним оформленням відповідає встановленим чинним вимогам. В ньому відображені головні результати дисертаційної роботи та наукові здобутки автора.

#### **11. Висновки щодо відповідності дисертації встановленим вимогам**

Дисертаційна робота **Корнія Сергія Андрійовича "Прогнозування механізмів взаємодії металевих систем з корозивним середовищем методами квантової хімії"** є завершеною науковою працею, в якій отримано нові наукові та практичні результати щодо теоретичного обґрунтування та нового вирішення науково-прикладної проблеми прогнозування корозійної тривкості багатокомпонентних металевих систем та встановлення закономірностей і механізмів їх локального корозійного руйнування на основі розвитку атомно-молекулярних моделей процесів у системі метал–середовище та удосконалення методики їх квантово-хімічного розрахунку із використанням методу функціоналу густини в кластерному наближенні. Автореферат за змістом ідентичний до тексту дисертаційної роботи.

Дисертація Корнія С.А. за своєю актуальністю, науковою новизною, обґрунтованістю та достовірністю наукових положень, за отриманими новими науково обґрунтованими результатами, висновками, практичними рекомендаціями та реалізацією в промисловості сприяє вирішенню проблеми підвищення хімічного опору матеріалів та протикорозійного захисту. Робота відповідає вимогам пп. 9, 10 "Порядку присудження наукових ступенів" затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 р. № 567 (зі змінами внесеними згідно з Постановами Кабінету Міністрів України № 656 від 19.08.2015 р., № 1159 від 30.12.2015 р. та № 567 від 27.07.2016 р.), а її автор Корній Сергій Андрійович заслуговує присудження наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 05.17.14 – хімічний опір матеріалів та захист від корозії.

**Офіційний опонент:**

доктор технічних наук, завідувач кафедри хімії  
Національного університету "Чернігівський  
колегіум" імені Т.Г.Шевченка

І.М.Курмакова

Підпис Курмакової І.М. засвідчую.  
Начальник відділу кадрів Національного  
університету "Чернігівський колегіум"  
імені Т.Г.Шевченка



Л.Ф.Лук'яненко