

**Отзыв на автореферат диссертации Карташинской Е. С.
«ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛЕНКООБРАЗОВАНИЯ
НЕИОНОГЕННЫХ ПАВ НА МЕЖФАЗНОЙ ПОВЕРХНОСТИ
ВОДА/ВОЗДУХ. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ ПОДХОД»,
представленной на соискание ученой степени доктора химических наук
по специальности 02.00.04 – физическая химия**

Диссертационная работа Карташинской Е.С. посвящена теоретическому описанию термодинамических и структурных параметров кластеризации неионогенных поверхностно-активных веществ (ПАВ) на межфазной поверхности вода/воздух и вода/пар алканов на основе расчета параметров олигомеров в рамках полуэмпирических квантово-химических методов.

Поведение неионогенных ПАВ на различных межфазных поверхностях весьма разнообразно, что позволяет варьировать свойства их пленок. Монослои Лэнгмюра перспективны для применения в биофизике мембран и биосенсоров, а перенесение монослоев ПАВ на различные твердые поверхности с образованием мультислоев позволяет получать оптические, антикоррозионные, антифрикционные покрытия с заданными свойствами. Поэтому данная работа весьма актуальна. В диссертации впервые проведено систематическое теоретическое исследование влияния особенностей строения гидрофильной части ПАВ на геометрические параметры элементарной ячейки получаемых монослоев, а также влияния температуры и наличия в газовой фазе паров алканов на морфологические особенности пленок. Применение полуэмпирических квантово-химических методов дает быструю оценку указанных свойств и в данном случае оправданно.

В работе впервые проведены комплексные исследования термодинамических и структурных параметров кластеризации неионогенных ПАВ на межфазной поверхности вода/воздух и вода/пар алканов. Оценены величины порога самопроизвольной кластеризации алифатических и монооксиэтилированных спиртов, амидов карбоновых кислот, α -гидроксикислот и N-ацилпроизводных аланина на межфазной поверхности вода/воздух. Сделан вывод о том, что самопроизвольная кластеризация данных ПАВ возможна для соединений, содержащих не менее 11-16 углеродных атомов в алкильной цепи, при стандартных условиях. Получено значительное число других конкретных результатов.

Полученные диссертантом результаты отражены в 28 статьях в рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, RSCI и SCOPUS, и доложены на научных конференциях.

В качестве замечания отмечу, что автор упустил возможность провести неэмпирические численные эксперименты по выяснению того, как результаты расчета зависят от применяемого метода. Это значительно усилило бы работу.

Диссертационная работа Карташинской Е.С. является крупным фундаментальным исследованием по установлению связи между строением и термодинамическими и структурными параметрами пленкообразования неионогенных поверхностно-активных веществ на межфазной поверхности вода/воздух и вода/пар алканов. Работа имеет как научное, так и практическое значение. Исследования отличаются научной новизной и выполнены на хорошем теоретическом уровне. Содержание диссертации соответствует п. 1 «Экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул и пространственной структуры веществ» паспорта специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Считаю, что по актуальности темы, объему проведенных исследований, новизне полученных результатов и научной и практической значимости работа Карташинской Е.С. соответствует всем современным требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, а Карташинская Е.С. заслуживает присуждения искомой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доктор физико-математических наук

(01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества), профессор

Цирельсон Владимир Григорьевич

Организация: ФГБУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Должность: заведующий кафедрой квантовой химии

Адрес: 125047, Москва, Миусская площадь, 9.

Телефон: 7-499-978-9584

Адрес электронной почты: tsirel@muctr.ru

Подпись В.Г. Цирельсона заверяю:



Дата

16.02.2019