

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Карташинской Елены Сергеевны**
«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.

Разнообразие и возможность варьирования свойств пленок неионогенных ПАВ на различных межфазных поверхностях, что позволяет конструировать оптические, антикоррозионные, антифрикционные покрытия с predetermined свойствами, привлекает особое внимание к исследованию свойств их монослоев. Помимо широкого набора экспериментальных методов их исследования, большое развитие получили расчетные методы молекулярной динамики и квантовой химии. Несмотря на уже достигнутые успехи по разработке теоретической модели, позволяющей описать термодинамические и структурные особенности образования больших и бесконечных 2D-кластеров дифильных веществ, важной задачей является решение вопросов влияния особенностей строения гидрофильной части ПАВ на параметры элементарной ячейки получаемых монослоев, влияния температуры и наличия в газовой фазе паров алканов на морфологические особенности пленок. Поэтому, теоретическое описание термодинамических и структурных параметров кластеризации неионогенных ПАВ на межфазной поверхности вода/воздух и вода/пар алканов, является актуальной задачей, что и явилось основной целью исследования рассматриваемой работы.

На основе разработанной модели, позволяющей описывать термодинамические и структурные параметры пленкообразования неионогенных ПАВ на межфазной поверхности вода/воздух, автором были выявлены зависимости пороговой длины цепи ПАВ, обеспечивающей пленкообразование на межфазной поверхности вода/воздух, от электронодонорной силы заместителей, входящих в гидрофильную часть ПАВ, а также их порога растворимости в воде; определены структурные характеристики дифильных веществ, влияющие на геометрические параметры образующихся монослоев; обнаружены особенности протекания совместной кластеризации неионогенных дифильных и полностью гидрофобных соединений на межфазной поверхности вода/пар.

Полученные в работе результаты позволяют прогнозировать морфологические особенности монослоев при той или иной температуре для соединений с определенной длиной цепи, а также предсказывать величины углов наклона дифильных молекул в кристаллическом монослое лишь на основе известной геометрии гидрофильных частей ПАВ и длины межмолекулярных $\text{CH}\cdots\text{NC}$ -взаимодействий. Таким образом, разработанная модель становится полезной при поиске новых практически ценных моно- и мультислоев с заданными структурными параметрами, что помимо научной новизны определяет практическую значимость работы диссертанта.

Полученные результаты составляют основу решения крупной научной проблемы по теоретическому моделированию термодинамических и структурных параметров пленкообразования неионогенных ПАВ на межфазной поверхности вода/воздух и вода/пар алканов.

В связи с изложенным выше, считаю, что рассматриваемая работа Карташинской Е.С. «Теоретическое моделирование пленкообразования неионогенных ПАВ на межфазной поверхности вода/воздух. Квантово-химический подход» является законченным исследованием и по всем критериям соответствует требованиям п.9, сформулированным в разделе II «Положения о присуждении ученых степеней» (постановление Правительства РФ от 24.09.2013 №842), предъявляемых к диссертациям на соискание ученой степени доктора химических наук, а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Зам. руководителя ИОФХ им. А.Е. Арбузова –
обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН,

д.х.н.

А.Р. Хаматгалимов

ИОФХ им. А.Е.Арбузова –
обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН,
420088, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Ак.Арбузова, 8.

Тел. (843)273-93-65, e-mail: ayrat_kh@iopc.ru

