

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Елены Сергеевны Карташинской «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 Е.С. Карташинской посвящена теоретическому моделированию термодинамических и структурных параметров пленкообразования неионогенных ПАВ на межфазной поверхности вода/воздух и вода/пар алканов в рамках полуэмпирического метода РМЗ. Автором разработаны эффективные методы теоретического описания термодинамических и структурных параметров кластеризации неионогенных ПАВ на межфазной поверхности вода/воздух и вода/пар алканов на основе расчета параметров олигомеров в рамках полуэмпирических методов. Полученные результаты составляют теоретическую основу решения крупной научной проблемы по моделированию термодинамических и структурных параметров пленкообразования неионогенных ПАВ на межфазной поверхности вода/воздух и вода/пар алканов. Это будет способствовать поиску новых важных в практическом отношении моно- и мультислоев с заданными структурными параметрами.

В работе представлены результаты расчетов термодинамических параметров образования пленки (энтальпии, энтропии, энергии Гиббса) на границе вода/воздух для ряда классов неионогенных ПАВ с неразветвленной углеводородной цепью. Впервые в рамках теоретической модели оценены величины порогов самопроизвольной кластеризации ряда моно- и дизамещенных алканов. Автором установлена связь величин пороговой длины цепи ПАВ, обуславливающей пленкообразование, с электронодонорными и электроноакцепторными свойствами функциональных групп и константами заместителей. Доказана возможность компьютерного моделирования особенностей упаковки дифильных молекул на водной поверхности, и получена, в частности, зависимость угла наклона молекул ПАВ к межфазной границе от размеров их гидрофильной части. Далее выполнена оценка влияния температуры и длины цепи ПАВ на особенности роста дендритных агрегатов в пленке.

Конечно, при выполнении столь обстоятельных исследований волей-неволей приходится делать предположения, оправданность которых заранее не вполне очевидна. К числу таких допущений относится пренебрежение многочастичными взаимодействиями в монослое, возможной зависимостью распределения молекул растворителя по нормали к поверхности и другие. Это замечание не столь существенно: оно, скорее, является пожеланием для будущих исследований диссертанта.

Оценивая работу Е.С. Карташинской в целом, следует признать, что работа выполнена на весьма высоком научном уровне. Автор в совершенстве владеет современными методами квантово-химических расчетов. Проявлена незаурядная изобретательность как в постановке, так и в решении задач. Результаты диссертанта опубликованы в многочисленных статьях в ведущих международных журналах. Работа Е.С. Карташинской по объему исследований, качеству и значимости полученных результатов удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (с изменениями постановления Правительства Российской Федерации от 21 апреля 2016 г. № 335), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора химических наук. Автор диссертации Елена Сергеевна Карташинская несомненно заслуживает присуждения ей степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 — физическая химия.



Захаров Анатолий Юльевич

08.02.2019

доктор физико-математических наук, профессор  
кафедра общей и экспериментальной физики

Новгородский государственный  
университет им. Ярослава Мудрого

173003, В. Новгород, ул. Б. С. – Петербургская, 41

тел. +7(8162)974269

E-mail: Anatoly.Zakharov@novsu.ru

Подпись А.Ю. Захарова  
Заверяю  
Вед. специалист  
Отдела кадров НовГУ  
08» 02  
20 19г.

