

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы 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.

Квантовая химия в настоящее время становится мощным инструментом в руках химиков как в исследовании структуры различных по природе химических систем (молекул, комплексов, супрамолекулярных соединений и др.), так и прогнозировании их физико-химических свойств. Точность квантово-химических расчетов растет по мере совершенствования теории и методов, а поэтому ширится и спектр проблем, решаемых на квантово-химическом уровне.

Представленная Карташинской Еленой Сергеевной диссертационная работа вскрывает новый пласт применения методов квантово-химического моделирования в такой важной и перспективной области, как исследования структуры и свойств межфазной границы раздела фаз вода/воздух в условиях пленкообразования неионогенных поверхностно-активных веществ. Несмотря на то, что такие системы относятся к макрообъектам, в основе их образования лежат механизмы, изучение которых требует применения молекулярного уровня исследований, а именно, квантово-химического моделирования.

Считаю, что поставленная диссертантом цель исследования, а именно, исследование кластеризации неионогенных ПАВ на межфазной поверхности вода/воздух и вода/пар алканов, достигнута в полной мере. Об этом свидетельствуют фундаментальные результаты выполненной работы. Наиболее значимым результатом можно считать разработанную автором модель безбарьерного механизма пленкообразования, которая позволила объяснить роль спиртов в эффективности контактов алканов с межфазной границей в процессе адсорбции и пленкообразования. В рамках этой модели установлена связь удельных (в пересчете на один мономер) термодинамических параметров кластеризации алканов с длиной цепи спиртов и алканов и других параметров монослоев. Хотя такая связь представляется закономерной, ценность предложенной модели состоит в том, что она позволяет четко установить характер такой связи. В данном случае, как показано в работе, зависимости термодинамических параметров кластеризации могут иметь линейный или ступенчатый характер.

Не останавливаясь на детальном анализе полученных диссертантом результатов, в целом следует сделать вывод, что разработанные автором теоретические модели исследования кластеризации неионогенных ПАВ на межфазной границе вода/воздух позволили получить обширные структурные и термодинамические параметры формирования монослоев. Эти результаты существенно расширяют существующие представления о физико-химической специфике кластеризации и могут служить теоретической основой прогнозирования функциональных монослоев на межфазных границах с заданными физико-химическими характеристиками.

Не вызывает никаких сомнений достоверность полученных автором результатов, что, безусловно, подтверждается впечатляющим списком публикаций в отечественных и зарубежных журналах с высоким импакт-фактором. Однако следует отметить следующее. В качестве расчетного квантово-химического метода используется полуэмпирический метод PM3. В исследованных в работе системах в ассоциации молекул значительную роль играют латеральные (боковые) взаимодействия, обусловленные, прежде всего, дисперсионными взаимодействиями. Поэтому, поскольку метод PM3 не учитывает такие взаимодействия, было бы целесообразным исследовать эти эффекты на примере какой-

нибудь системы минимального размера, используя один из методов функционала плотности с включением, например, дисперсионных поправок Гримме.

Теоретические результаты и закономерности, установленные в работе, представляют практический интерес с точки зрения разработки и совершенствования теоретических фундаментальных представлений о механизмах образования новых фаз на границе раздела фаз вода/воздух и вода/пар алканов для неионогенных поверхностно-активных веществ. Предложенные расчетные модели и физико-химическая интерпретация результатов составляют научную ценность работы. Выводы по работе адекватно отражают основные результаты, описанные в автореферате диссертации.

Из содержания автореферата следует, что диссертационное исследование Карташинской Елены Сергеевны соответствует паспорту специальности 02.00.04 – физическая химия и удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ «О порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, Карташинская Елена Сергеевна, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Заведующий кафедрой неорганической химии
Казанского национального исследовательского
технологического университета,
доктор химических наук, профессор

Кузнецов Андрей Михайлович

420015, Казань, ул. К. Маркса, 68
ФГБОУ «Казанский национальный
исследовательский технологический университет»
Тел.: +7(8917) 293-48-78
<http://www.kstu.ru>
e-mail: am_kuznetsov@kstu.ru

