

## Отзыв

Халилова Леонарда Мухибовича на автореферат диссертационной работы Карташинской Елены Сергеевны, выполненной по теме «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.

В работе представлены результаты теоретических исследований неионогенных поверхностно активных веществ (ПАВ) на межфазной поверхности вода/воздух, представляющих модели пленкообразования. Интерес к подобного рода изысканиям вызван необходимостью моделирования биологических мембран, с возможностями транспорта через них биологически активных веществ, а также перспективами конструирования биосенсоров и регулированием поверхностных слоев с целью придания им определенных физико-химических характеристик. В этой связи поставленная цель в работе, а именно, «теоретическое описание 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», представляется весьма актуальной и имеющей важное практическое значение.

Ключевым достижением автора является установление «квантового эффекта при пленкообразовании на поверхности раздела фаз вода/воздух», наличия пороговой длины цепи ПАВ, обуславливающей пленкообразование, которая определяется энтропийным вкладом в энергию Гиббса. Ею показано, что величина порога пленкообразования обусловлена электронодонорными и электроноакцепторными свойствами функциональных групп, а пороговая длина углеводородной цепи для протекания кластеризации квадратично зависит от констант заместителей и величины порога растворимости.

Автором также предложена интересная теоретическая модель безбарьерного механизма пленкообразования алканов в присутствии алифатических спиртов, где «дифильные вещества действуют в качестве «поплавков», которые своей гидрофильной частью находятся в водной фазе, а гидрофобной – участвуют во взаимодействиях с молекулами алканов паровой фазы», что может быть использовано для активизации контактов алкановых молекул с межфазной поверхностью при адсорбции и пленкообразовании.

Основные результаты работы опубликованы в ведущих высокорейтинговых и профильных журналах (Phys. Chem. Chem. Phys., J. Phys. Chem. B., J. Phys. Chem. C, Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, Colloid Polym. Sci.) широко обсуждались на международных конференциях и приняты научной общественностью.

В итоге, автором решена серьезная научная проблема по теоретическому моделированию термодинамических и структурных параметров пленкообразования неионогенных ПАВ на межфазной поверхности вода/воздух и вода/пар алканов.

В качестве пожелания хотелось бы предложить автору провести в дальнейшем лабораторные и заводские испытания разработанных моделей на конкретных системах с получением новых материалов с практически ценными «моно- и мультислоями с заданными структурными параметрами».

В целом, диссертационная работа **Карташинской Елены Сергеевны**, полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК РФ к докторским диссертациям, и изложенным в п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденном Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, а автор работы - заслуживает присуждения **ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.**

Доктор химических наук 02.00.03 – Органическая химия.

Заведующий лабораторией структурной химии Института нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, профессор **Халилов Леонард Мухибович**  
г. Уфа, 450075, проспект Октября, д. 141  
тел. 8(347)2843527, khalilovlm@gmail.com

04.2.2019

Подпись Халилова Л.М. «Заверяю»

Ученый секретарь ИНК РАН, к.х.н., с.н.с



Спивак А.Ю.