

## 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**

Диссертационная работа Е. С. Карташинской посвящена исследованию монослоев нерастворимых поверхностно-активных веществ (ПАВ) на водной поверхности. Нерастворимые монослои на границе между двумя флюидными фазами интенсивно изучаются уже более двух столетий, примерно начиная с работ Б. Франклина в восемнадцатом столетии. Вместе с тем эта тематика остается актуальной и в наше время, прежде всего, из-за возникшей сравнительно недавно возможности детального определения микроскопической и мезоскопической структуры монослоев, а также из-за использования поверхностных пленок в оптике, электронике, медицине и при физическом моделировании процессов в клеточных мембранах. Все это вызывает необходимость разработки методов получения нерастворимых монослоев с заданной структурой, и, следовательно, требует дальнейшего развития этой области физической химии поверхностных явлений. Важно подчеркнуть, что до настоящего времени нерастворимые монослои исследовались в основном экспериментальными методами, и диссертация Е. С. Карташинской представляет одну из немногих работ, где для этой цели использованы методы квантовой химии.

В работе представлены результаты расчетов термодинамических параметров образования пленки (энтальпии, энтропии, энергии Гиббса) на границе вода/воздух для одиннадцати классов неионогенных ПАВ с неразветвленной углеводородной цепью, выполненных с помощью полуэмпирического метода РМЗ. Рассмотрен такой параметр как порог кластеризации – минимально необходимая длина цепи ПАВ, которая обеспечивает образование кристаллического монослоя при заданной температуре. Автор связывает различия в величине порога кластеризации рассматриваемых дифильных соединений с особенностями строения их гидрофильных частей. В диссертации доказывается 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, а также выполнена оценка влияния температуры и длины цепи ПАВ на особенности роста дендритных агрегатов в пленке.

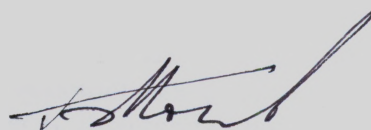
В качестве небольшого замечания можно отметить недостаточное внимание автора к обоснованию возможности свести взаимодействия в монослое к парным взаимодействиям. Современные компьютеры вполне позволяют провести расчеты не только для димеров, но и для тримеров и тетрамеров. Вычисления такого рода были бы полезны для обоснования аддитивности парных взаимодействий, а также для уточнения углов в исследованных молекулярных системах. Остается также неясным, каким образом можно обсуждать морфологию двумерных агрегатов без учета особенностей взаимодействия между молекулами, находящимися в разных поверхностных фазах. Именно такие взаимодействия приводят к возникновению линейного натяжения, и, следовательно, влияют на форму агрегатов. Наконец, было бы полезно учесть также распределение молекул растворителя по нормали к поверхности. Молекулы воды находятся не только в области гидрофильных групп, но и проникают в области между углеводородными хвостами ПАВ.

Сделанные замечания не снижают общего положительного впечатления о диссертационной работе, и скорее представляют рекомендации для дальнейших исследований.

Работа Е.С. Карташинской в целом выполнена на высоком научном уровне. Автором продемонстрировано владение современными методами квантово-химических расчетов, и выполнен большой объем работы, что подтверждается многочисленными публикациями в ведущих международных журналах. Исходя из автореферата, 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, а ее автор заслуживает присуждения ему искомой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Профессор кафедры коллоидной химии  
Санкт-Петербургского государственного  
университета  
д.х.н., Носков Б.А.



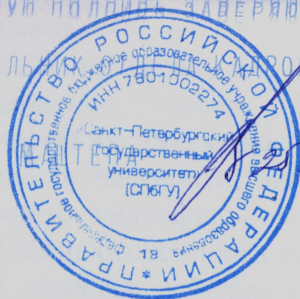
Адрес:  
198504, Россия, Санкт-Петербург, Петергоф,  
Университетский пр., 26, кафедра коллоидной химии  
Институт химии ФГБОУ ВО  
«Санкт-Петербургский государственный университет»  
[borisanno@rambler.ru](mailto:borisanno@rambler.ru)

Подпись Б.А. Носкова заверяю

Личную подпись заверяю

НАЧАЛЬНИК УПРАВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫМ УЧЕБНО-НАУЧНЫМ ЦЕНТРОМ № 3

Н. И.



ДОКУМЕНТ  
ПОДГОТОВЛЕН  
ПО ЛИЧНОЙ  
ИНИЦИАТИВЕ

Текст документа размещен  
в открытом доступе  
на сайте СПбГУ по адресу  
<http://otot.spbu.ru/science/expert.htm>