ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Зозули Александра Сергеевича «**Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния света и квантово-химическое моделирование систем наночастица – метотрексат**», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 - Физическая химия.

Диссертационная работа Зозули А.С. посвящена экспериментально-теоретическому исследованию комплексов метотрексата (МТХ) с наночастицами серебра методами спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния света (ГКРС) и квантово-химического моделирования. Работа направлена на выявление путей реализации химического механизма усиления ГКРС и оценку его вклада в результирующий спектр.

Актуальность темы не вызывает сомнений. Интерпретация спектров многокомпонентных сред невозможна без привлечения современных методов квантовой химии. Актуальность подтверждается публикацией литературного обзора по теме диссертации в международном рецензируемом журнале (Royal Society Open Science, 2025). Научная новизна работы состоит в том, что автором впервые построены и проанализированы теоретические модели взаимодействия МТХ с кластерами серебра варьируемого размера, рассчитаны количественные термодинамические и электронные характеристики комплексообразования, установлены пути связывания молекулы с поверхностью наночастицы. Показано, что адсорбция МТХ протекает преимущественно через карбоксильные группы с образованием координационной связи. Выявлено влияние ориентации молекулы и размера кластера серебра на формирование спектра ГКРС. Цель и задачи работы полностью соответствуют паспорту специальности 1.4.4-Физическая химия. Несмотря на общее положительное впечатление от работы, по тексту автореферат имеется несколько замечаний/комментариев:

1. Многие аббревиатуры не расшифрованы при первом упоминании: МТХ, МО, ВЗМО, НСМО и другие.
2. Согласно эксперименту (Рис. 2А), средний размер ребра тетраэдров серебра составляет 33 нм, тогда как в атомистических моделях используются кластеры Ag_n, где n = 4, 8, 12, 16. Насколько корректно распространение выводов, сделанных для малых кластеров, на комплексы с частицами размером 33 нм?
3. Показано, что ВЗМО и НСМО кластеров Ag_n при $n \geq 8$ локализованы на серебре. Означает ли это, что химический механизм усиления сигнала ГКРС «выключается» для крупных частиц?
4. Не согласован базисный набор для расчета молекулы МТХ и частицы Ag. На сколько мне известно, базис 6-311G++(2d,2p), использованный для МТХ, включает поляризационные функции, тогда как базис Lanl2Dz для кластера серебра поляризационные функции не содержит. Поэтому возможна недооценка электромагнитного вклада в усиление сигнала ГКРС. Более корректно было бы использовать базисный набор Lanl2Dz(f).
5. Некорректно сформулирован вывод № 3: «... с ростом размера кластера экспоненциально увеличивается поляризуемость моделей». Рисунок 10 показывает линейную зависимость, которая, на сколько мне известно, появляется в классической электродинамике. В случае металлической сферы поляризуемость $\alpha \sim R^3$, и если $R \sim N^{1/3}$, то получается $\alpha \sim N$. Таким образом, возникает линейная зависимость поляризуемости от количества атомов N в сферическом кластере. То есть, полученные автором данные согласуются с общей теорией.

Высказанные замечания носят уточняющий характер и не снижают высокой оценки выполненного исследования. По актуальности, научной новизне, объему экспериментального материала и практической значимости диссертационная работа

«**Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния света и квантово-химическое моделирование систем наночастица – метотрексат**» соответствует требованиям пунктов 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции), а ее автор, Зозуля Александр Сергеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 - Физическая химия (Химические науки).

Кандидат химических наук,
доцент кафедры «Химия и химическая технология»,
Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Омский государственный технический университет»
644050, Сибирский федеральный округ, Омская область, г. Омск, Пр. Мира, д. 11
Тел.: +79069900866
e-mail: vitaly_gorbunov@mail.ru

Горбунов Виталий Алексеевич

«___» _____ 2026 г.

Даю свое согласие на обработку персональных данных и размещение отзыва в открытом доступе (приказ Минобрнауки России от 01.07.2015 № 662).

Подпись: _____

Подпись Горбунова В.А. удостоверяю:

Ученый секретарь А.Г. Алексеева

_____ М.П. «18» 09 2026 г.