

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Зозули Александра Сергеевича «Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния света и квантовохимическое моделирование систем наночастица – метотрексат», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия

Диссертационная работа А.С. Зозули посвящена экспериментально-теоретическому определению термодинамических и электронных характеристик и параметров взаимодействия лекарственного препарата “метотрексат” (МТ) в комплексе с наночастицей серебра (НЧ) с помощью подходов квантово-химического моделирования и экспериментальных данных гигантского комбинационного рассеяния света (ГКРС). МТ – цитостатик, мониторинг концентрации которого в плазме крови критически важен из-за его высокой токсичности. ГКРС позволяет обнаруживать микро- и наномолярные концентрации лекарства в биологических жидкостях без сложной пробоподготовки. Диссертантом исследованы возможные пути, механизмы и модели адсорбции молекулы на поверхности НЧ, их проявление в спектрах ГКРС, выполнено соотнесение теоретических результатов с экспериментальными данными. На основе проведенных исследований выработаны подходы к созданию оптических сенсоров на базе плазмонного эффекта для определения МТ в сыворотке крови пациентов, проходящих лечение от ревматоидного артрита, что определяет практическую значимость исследования.

Выполненные в работе расчеты методом теории функционала плотности (DFT) позволили провести отнесение полос ГКРС к конкретным колебаниям МТ, определить геометрию связывания МТ с НЧ, выявить вклад переноса заряда (т.н. химического усиления) в общее гигантское усиление спектра, помимо чисто электромагнитного плазмонного эффекта. Эти результаты представляют несомненный теоретический интерес и определяют значимость работы.

Следует отметить, что диссертантом выполнен анализ зависимости результатов расчетов DFT модельных систем МТ-НЧ от размеров кластера атомов серебра, моделирующих НЧ. При этом обнаружились некоторые качественные изменения результатов расчетов для больших кластеров относительно кластера Ag_4 . Не вполне понятно, почему автор строит свои основные выводы на основании моделирования именно малых кластеров Ag_4 .

Несмотря на вышеупомянутое замечание, в целом, чтение автореферата оставляет впечатление о диссертационной работе Зозули А.С. как об оригинальном и целостном исследовании методами спектроскопии ГКРС и квантовой химии систем, представляющих теоретический и практический интерес. Она доставляет новые фундаментальные знания о процессах взаимодействия органических молекул с лазерным излучением и с наноструктурированным металлом.

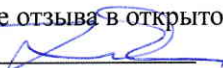
Работа хорошо апробирована. Результаты исследований опубликованы в высокорейтинговых международных рецензируемых журналах, они доложены на множестве международных и всероссийских конференций.

Высказанное замечание носит уточняющий характер и не снижает 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 РФ 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).

д.х.н. по специальности 02.00.04-физическая химия,
профессор
в.н.с. лаборатории физико-химического анализа
Института органической и физической химии им. А.Е.
Арбузова – обособленного структурного подразделения
ФИЦ КазНЦ РАН
420088, г. Казань, ул. Академика Арбузова, дом 8
Тел.: 8(843)273-93-65
e-mail: katsyuba@iopc.ru

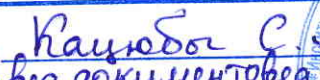
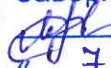

Кацюба Сергей Александрович
« 7 » 09 2026 г.

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

Подпись Кацюбы Сергея Александровича удостоверяю:

_____ М.П.

« ____ » _____ 2026 г.

Подпись 
Заверяю  
« 7 » сентября 2026 г.