

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 Александра Сергеевича посвящена экспериментально-теоретическому исследованию взаимодействия метотрексата с треугольными наночастицами серебра и анализу вклада химического механизма в формирование спектров ГКРС. Для решения поставленных задач автор сочетает синтез и характеризацию AgNT, регистрацию спектров поглощения и ГКРС, а также DFT- и TD-DFT-моделирование комплексов «МТХ–кластер серебра».

В работе рассмотрены различные модели связывания метотрексата с кластерами серебра, проанализированы их термодинамические и электронные характеристики, а также влияние размера кластера на свойства модельных систем и расчетные спектры. Согласно полученным результатам, наиболее вероятным является взаимодействие МТХ с серебром через карбоксильные группы; его возможным спектральным проявлением рассматривается полоса около 1589 см^{-1} в экспериментальном спектре ГКРС. Результаты имеют значение для развития плазмонных сенсорных систем определения метотрексата в биологических средах.

Работа отличается логичным изложением, последовательной постановкой задач и в целом убедительной интерпретацией полученных экспериментальных и расчетных данных. Полученные результаты представляют интерес для развития методов ГКРС-детектирования биологически активных соединений и создания плазмонных сенсорных систем.

По тексту реферата имеются следующие небольшие замечания и вопросы:

1. Рецензент не ставит под сомнение интерпретацию авторов, согласно которой наблюдаемые изменения в спектрах поглощения и ГКРС согласуются с адсорбцией МТХ на поверхности AgNT. Однако представляется целесообразным несколько смягчить формулировки: спектральные сдвиги, вероятно, следует рассматривать как косвенный признак взаимодействия МТХ с AgNT, но не как однозначное доказательство адсорбции, поскольку они могут быть обусловлены также, например, изменением локального окружения или пр. Для полосы поглощения желательно также указать, превышает ли сдвиг на 4 нм экспериментальную неопределенность определения положения максимума.

2. Метод вычитания фона в ГKR-спектрах, представленных на рисунке 4 автореферата, требует уточнения. Недостаточно ясно, каким именно методом выполнялась коррекция фона: какая функция или алгоритм использовались, по каким участкам спектра задавался базовый уровень и одинаковы ли параметры процедуры для всех приведенных спектров. Это особенно важно, поскольку способ обработки фона может влиять на форму и относительную интенсивность полос.

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-

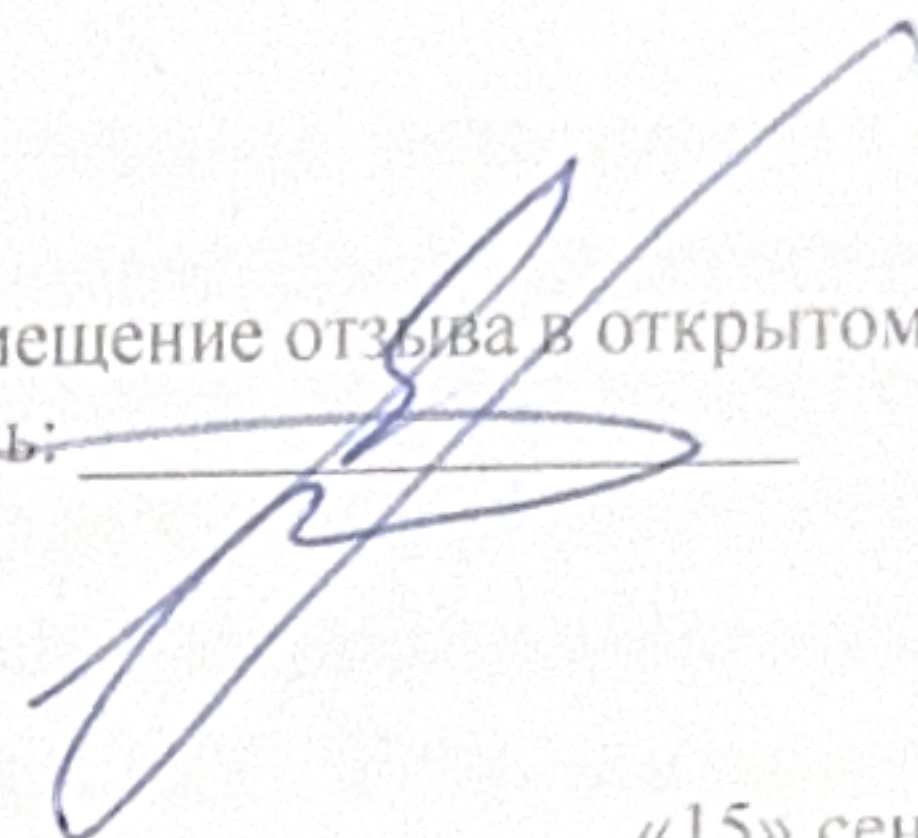
11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции), а ее автор, Зозуля Александр Сергеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 - Физическая химия (Химические науки).

кандидат химических наук
(специальность 25.00.05 – минералогия, кристаллография)
старший научный сотрудник лаборатории Физических и
химических методов исследования
Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого
УрО РАН
620110, г. Екатеринбург, ул. Академика Вонсовского 15
Тел.: +7-919-38-966-94
e-mail: pankrushina@igg.uran.ru

Панкрушина Елизавета
Алексеевна

«15» сентября 2026 г.

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



«15» сентября 2026 г.

Подпись Панкрушина Е.А. заверяю
Зав. общим отделом Пилева А.В.

15.09.2026 г.

