

ОТЗЫВ на автореферат
диссертационной работы Зозули Александра Сергеевича
на тему: «Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния света
и квантово-химическое моделирование систем наночастица –
метотрексат», представленной на соискание ученой степени кандидата
химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Представленная диссертационная работа посвящена физико-химическим аспектам развития методологии гигантского комбинационного рассеяния света (ГКРС) для обнаружения клинически значимых соединений. Исследование выполнено на стыке квантово-химического моделирования и экспериментальной спектроскопии, что соответствует современным тенденциям в области физической химии. Несмотря на активное внедрение в практику высокочувствительного метода ГКРС, интерпретация его многокомпонентных спектров является нетривиальной задачей. Применение квантово-химического моделирования для установления механизмов адсорбции и химического усиления сигнала ГКРС позволяет дополнить эмпирический подход в анализе. Поэтому диссертационная работа Зозули Александра Сергеевича, направленная на изучение закономерностей и путей реализации химического механизма усиления ГКРС в модельных системах на основе лекарственного препарата «метотрексат» в комплексе с наночастицей серебра с использованием квантово-химических расчетов и экспериментальных данных, является *актуальной*. Возможность применения результатов исследования для создания оптических сенсоров с целью определения лекарственных препаратов в сыворотке крови пациентов определяет практическую значимость работы.

Несомненной *научной новизной* обладают результаты по систематическому квантово-химическому исследованию комплексов метотрексата с кластерами серебра различного размера с расчетом количественных термодинамических и электронных характеристик, расширение представлений о химическом механизме ГКРС путем разработки теоретических моделей связывания молекул лекарственного препарата с поверхностью наночастиц, выявление корреляций между размером кластера серебра и интенсивностью сигнала ГКРС, что вносит вклад в понимание зависимости плазмонных свойств от структуры наночастиц.

Достоверность полученных результатов обеспечивается комплексным подходом, включающим использование современных квантово-химических методов с подтверждением рассчитанных параметров и колебательных спектров путем сравнения с экспериментальными данными, воспроизводимостью полученных экспериментальных и теоретических данных и согласованностью физико-химических характеристик наночастиц с литературными данными.

В тексте автореферата встречаются стилистические погрешности, в частности, в оформлении списка публикаций, что, однако, не снижает общего высокого научного уровня работы.

Представленная работа является законченным квалификационным исследованием, результаты которого представлены публикациями в высокорейтинговых журналах и апробированы на ряде конференций различного уровня.

Диссертационная работа Зозули Александра Сергеевича соответствует требованиям пунктов 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (в действующей редакции), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а также соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки). Таким образом, соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Согласна на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, их дальнейшую обработку и передачу в соответствии с требованием Минобрнауки РФ.

Кандидат химических наук (Специальность, по которой защищена диссертация: 02.00.04 – физическая химия),
доцент кафедры физической и коллоидной химии,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет»

Романова Ксения Андреевна

01.09.2026

Адрес места работы:

420015, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», кафедра физической и коллоидной химии
Тел.: 88432314177; e-mail: romksenia@kstu.ru

