

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 А.С. Зозули посвящена актуальной проблеме современной физической химии и биоаналитики – созданию теоретических и экспериментальных основ для детектирования лекарственного препарата метотрексат (MTX) с использованием эффекта гигантского комбинационного рассеяния света (ГКРС). Актуальность темы обусловлена необходимостью разработки чувствительных и экспрессных методов контроля концентрации MTX в сыворотке крови пациентов с ревматоидным артритом, что имеет прямое клиническое значение. Автореферат написан чётко, логично и отражает все этапы исследования: от синтеза и характеристики серебряных наночастиц (сферических и треугольных) до построения детальных квантово-химических моделей взаимодействия MTX с кластерами серебра различного размера. Особое внимание уделено сопоставлению теоретических расчётов (DFT, TD-DFT) с экспериментальными спектрами ГКРС, что позволяет обоснованно интерпретировать вклад химического механизма усиления сигнала.

Научная новизна и практическая значимость работы не вызывают сомнений. Автором впервые предложены и верифицированы модели адсорбции MTX на серебряные кластеры через карбоксильные группы, количественно оценены термодинамические параметры (энергия адсорбции, энтальпия, поляризуемость) и показано, что наиболее энергетически выгодным является связывание через COO-группы. Важно, что теоретические предсказания подтверждены экспериментально – сдвигом полос в спектрах поглощения и ГКРС. Особого внимания заслуживает систематическое исследование влияния размера кластера серебра (от Ag₄ до Ag₁₆) на электронную структуру, поляризуемость и интенсивность спектров. Установленная экспоненциальная зависимость кросс-секции КРС от поляризуемости и локализация граничных молекулярных орбиталей дают ценную информацию для понимания механизмов ГКРС.

Достоверность результатов обеспечена использованием современных экспериментальных методов (СЭМ, ФКС, UV-Vis, КРС) и квантово-химических подходов (B3LYP, CAM-B3LYP), а также воспроизводимостью данных. Публикационная активность автора (3 статьи в качественных журналах, патент, доклады на конференциях) подтверждает высокий уровень работы.

В качестве **замечаний** можно отметить, что в автореферате не всегда чётко разделены вклады электронного (резонансного) и химического механизмов усиления, особенно при обсуждении моделей с зарядом «2–».

К работе имеется ряд вопросов:

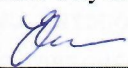
А) В работе показано, что для модели «MTX-COO-Ag₄(–2)» переход между ВЗМО и НСМО запрещён (сила осциллятора равна нулю), однако при возбуждении на длине волны 448 нм возможен перенос электрона на более высокие свободные орбитали. Как, по вашему мнению, этот процесс соотносится с экспериментальным возбуждением на $\lambda=532$ нм, и может ли он вносить вклад в усиление ГКРС при используемой длине волны лазера?

Б) При увеличении размера кластера до Ag16 было отмечено появление Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий между атомами азота и серебра. Планируете ли вы в дальнейшем учитывать эти взаимодействия более строго (например, с помощью методов DFT-D3 или *ab initio* молекулярной динамики) для оценки их влияния на спектральные характеристики?

При этом, указанные замечания не снижают общей высокой оценки работы. Диссертация представляет собой завершённое научное исследование, выполненное на высоком научном уровне и имеющее как фундаментальное, так и прикладное значение.

По актуальности, научной новизне, объёму 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 02.00.04 – физическая химия), доцент,
доцент кафедры химии ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева»
Московское шоссе, д. 34, г. Самара
Тел.: +7(846)267-44-13
e-mail: tupikova.en@ssau.ru


Тупикова Е.Н.

«21» 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: 

