

## Отзыв на автореферат диссертации

Помогайло Дарьи Анатольевны

«Определение ориентационной упорядоченности и структурной организации смектических жидких кристаллов методом парамагнитного зонда», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности: 02.00.04 – «Физическая химия».

Диссертационная работа Помогайло Дарьи Анатольевны посвящена исследованию структуры смектических жидких кристаллов (ЖК) на молекулярном уровне методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Актуальность работы не вызывает сомнений ввиду: а) широкого повсеместного использования ЖК и поиска новых жидкокристаллических материалов с заданными свойствами, б) безусловного научного интереса к структуре ЖК на молекулярном уровне и, в частности, к расположению примесных частиц внутри ЖК.

В результате выполнения данной работы автором представлены: а) угловые функции распределения ряда радикалов-зондов в нескольких ЖК, б) коэффициенты вращательной диффузии радикалов-зондов в ЖК (для трех главных осей вращения), в) взаимное расположение молекул в парамагнитном жидком кристалле, г) взаимное расположение радикалов-зондов в диамагнитном ЖК и их положение относительно молекул ЖК. Определение взаимного расположения парамагнитных молекул в жидком кристалле из угловой зависимости спектров ЭПР представлено автором, как новый экспериментальный метод.

Первичными экспериментальными данными работы являлись спектры ЭПР нитроксильных радикалов, использованных в качестве зондовых частиц в диамагнитных ЖК, либо спектры ЭПР жидких кристаллов, молекулы которых содержат нитроксильный фрагмент. Спектры ЭПР моделировались с использованием готовых компьютерных программ. В результате моделирования определялись искомые динамические и структурные параметры.

Объем работы, на мой взгляд, более чем достаточен для квалификационной работы, представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук. По ее результатам опубликованы три статьи в высокорейтинговых научных журналах.

Замечания:

1) Первое замечание касается изложения материала.

- На мой взгляд, изложение материала в автореферате страдает нечеткостью и, в некоторой степени, непоследовательностью. Поэтому работа воспринимается не как единое целое, а,

скорее, как набор отдельных фактов и умозаключений. Не даны определения ряда обозначений.

2) Второе замечание относится к вопросу интерпретации данных.

- Используемые модели содержат ряд подгоночных параметров. Возникает вопрос, является ли однозначным тот выбор набора параметров, который сделан автором?

- Не указаны источники погрешностей. Также ничего не сказано о методе определения погрешностей, приведенных в работе. Некоторые приведенные значения погрешностей вызывают недоумение. Например, ошибка определения коэффициента вращательной диффузии  $D_z$  зонда С11 в 8СВ равная  $\pm 0.02 \text{ с}^{-1}$  (0.6% от полученной величины) выглядит нереальной.

- Наконец, замечу, что достоверность полученных данных никак не может обеспечиваться "использованием современного радиоспектрометра и применением количественного численного моделирования". В любом случае, представлялось бы уместным наличие в работе раздела, в котором был бы проведен критический анализ используемого метода с оценкой возможных ошибок.

Несмотря на приведенные замечания, считаю, что автором выполнен большой объем весьма интересной работы на высоком научном уровне.

Заключение:

Диссертация Помогайло Дарьи Анатольевны по своей актуальности, научной новизне и объему соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842, а автор диссертации, Помогайло Дарья Анатольевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

К. ф.-м. н, н.с.

Сергей Юрьевич Гребенкин

ФГБУН Институт химической кинетики и горения

им. В. В. Воеводского СО РАН

630090, Новосибирск, ул. Институтская, 3

Тел.: 8-383-330-7644

[grebenk@kinetics.nsc.ru](mailto:grebenk@kinetics.nsc.ru)



28 сентября 2016