

Протокол № 428

заседания диссертационного совета 24.2.288.04

от 25.04.2023

Состав диссертационного совета утвержден в количестве 17 человек. Присутствовали на заседании 17 человек.

Председатель заседания: д. хим. наук, профессор Введенский Александр Викторович

Присутствовали: д. хим. наук, профессор Введенский Александр Викторович, д. хим. наук, профессор Семенов Виктор Николаевич, к. хим. наук Хохлова Оксана Николаевна, д. хим. наук, профессор Бобрешова Ольга Владимировна, д. хим. наук, профессор Бутырская Елена Васильевна, д. хим. наук, доцент Зарцын Илья Давидович, д. хим. наук, профессор Кравченко Тамара Александровна, д. хим. наук, профессор Селеменев Владимир Федорович, д. хим. наук, профессор Семенова Галина Владимировна, д. хим. наук, профессор Шапошник Владимир Алексеевич, д. хим. наук, профессор Хохлов Владимир Юрьевич, д. хим. наук, доцент Васильева Вера Ивановна, д. хим. наук Завражных Александр Юрьевич, д. хим. наук, доцент Козадеров Олег Александрович, д. хим. наук, доцент Кострюков Виктор Федорович, д. хим. наук, доцент Томина Елена Викторовна, д. хим. наук, доцент Козадерова Ольга Анатольевна.

Слушали: Председателя экспертной комиссии, созданной для предварительного ознакомления с диссертационной работой Ле Динь Туана «Адсорбция L- и D- гистидина на углеродных нанотрубках из водных растворов» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, д.х.н., профессора Кравченко Т.А.

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Воронежский государственный университет».

Диссертация представляется к защите впервые и удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ.

Диссертационная работа Ле Динь Туана посвящена решению актуальной проблемы физической химии – анализу механизма хирального взаимодействия углеродных нанотрубок (УНТ) с энантиомерами гистидина в водных растворах при разных температурах и интерпретации природы различного сродства нанотрубок к данным энантиомерам.

Наиболее существенными научными результатами, представленными в диссертационной работе, могут считаться следующие:

Получены изотермы адсорбции L- и D- гистидина на УНТ из водных растворов, анализом которых установлено, что в интервале температур 25-80°C и концентраций 0.005-0.05 моль/дм³ углеродные нанотрубки MKN-SWCNT-S1 имеют большее сродство к D- гистидину.

Установлено, что величина адсорбции энантиомеров на УНТ снижается с увеличением температуры, что объяснено разрушением наиболее слабых связей сорбент - сорбат при повышении температуры.

Предложена модель структуры сорбата на УНТ. Доказано, что L- гистидин сорбируется на УНТ в виде цвиттер-ионов и кластеров из 13 (25°C), 8 (35°C) и 7 (45, 55, 65, 80°C) молекул, а D- гистидин - в виде цвиттер-ионов и кластеров из 9 (25°C) и 7 (35, 45, 55, 65, 80°C) молекул. Все кластеры, кроме L- кластера из 13 молекул (25°C), лежат в первом слое.

Установлено, что L- и D- гистидин закрепляются на поверхности УНТ за счет сил Ван дер Ваальса и π - π стэкинговых взаимодействий. Энергии адсорбции мономеров L- и D- гистидина на УНТ различаются незначительно, различия в энергиях адсорбции кластеров существенно больше, их формирование на УНТ является причиной большей комплементарности УНТ к D- изомеру.

На основе полученных изотерм адсорбции, результатов квантово-химического моделирования и теории кластерной адсорбции построена физико-химическая модель сорбционных взаимодействий аминокислоты и УНТ, согласно которой индивидуальные цвиттер-ионы аминокислоты фиксируются на более реакционноспособных участках поверхности УНТ, а кластеры - на менее реакционноспособных участках. Устойчивая адсорбция кластеров обусловлена наличием в них сорбат-сорбатных связей, вносящих вклад в понижение энергии системы при адсорбции.

Причиной большей величины энергии адсорбции D- гистидина на УНТ и повышенной комплементарности УНТ к D- изомеру является большее число точечных контактов атомов азота и кислорода D- аминокислоты с адсорбентом и меньшее расстояние между их центрами масс по сравнению с L- изомером.

Работа выполнена на высоком научном и методическом уровне с использованием современных физико-химических и квантово-химических методов исследования. Проведен глубокий анализ экспериментальных данных. Тема и содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия в соответствии с паспортом специальностей научных работников.

По результатам прохождения диссертацией программы «Антиплагиат» экспертная комиссия установила уровень оригинальности 93,56%. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах, в которых изложены основные научные результаты исследования. Соблюдены требования, установленные пунктом 14 Положения о присуждении ученых степеней.

Полнота представления материалов диссертации в печати составляет 90%. Список работ, опубликованных по теме диссертации, включает 13 наименований, из них 5 статей в реферируемых журналах из перечня ВАК (включая 4 публикации, индексируемых базами Scopus и Web of Science) и 8 материалов и тезисов конференций. Требования, предусмотренные пунктами 11 и 13 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», выполнены.

Результаты работы могут быть рекомендованы для использования в Воронежском государственном университете, Самарском национальном исследовательском университете имени академика С.П. Королева, МГУ им. М.В. Ломоносова, ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН, Санкт-Петербургском государственном университете, РХТУ им. Менделеева, Воронежском государственном лесотехническом университете имени Г.Ф. Морозова.

Рассмотрение диссертации Ле Д. Т. входит в компетенцию диссертационного совета 24.2.288.04 при Воронежском государственном университете. Комиссия рекомендует представить ее к защите по специальности 1.4.4. Физическая химия.

В качестве официальных оппонентов предлагаются:

- **Алехина Марина Борисовна**, доктор химических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», факультет технологии неорганических веществ и высокотемпературных материалов, кафедра технологии

неорганических веществ и электрохимических процессов, профессор;

- **Новикова Людмила Анатольевна**, кандидат химических наук, доцент, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный лесотехнический университет имени Г.Ф. Морозова», лесопромышленный факультет, кафедра химии, доцент.

В качестве ведущей организации рекомендуется **федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королева»**.

Оппоненты и ведущая организация выразили свое предварительное согласие.

Постановили:

Принять к защите диссертацию Ле Динь Туана «Адсорбция L- и D- гистидина на углеродных нанотрубках из водных растворов» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Утвердить официальными оппонентами:

- **Алехину Марину Борисовну**, доктора химических наук, профессора, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «РХТУ им. Д.И. Менделеева», факультет технологии неорганических веществ и высокотемпературных материалов, кафедра технологии неорганических веществ и электрохимических процессов, профессор;

- **Новикову Людмилу Анатольевну**, кандидата химических наук, доцента, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный лесотехнический университет имени Г.Ф. Морозова», лесопромышленный факультет, кафедра химии, доцент.

В качестве ведущей организации **федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королева»**, г. Самара.

Назначить дату защиты на 04 июля 2023 г.

Разрешить опубликование автореферата диссертации на правах рукописи и утвердить список его рассылки.

Результаты голосования: «за» – 17, «против» – нет, «воздержался» – нет

Председатель

диссертационного совета



[Handwritten signature]

/ Введенский А.В. /

Ученый секретарь

диссертационного совета

[Handwritten signature]

/ Хохлова О.Н. /