

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ле Динь Туана
"Адсорбция L- и D- гистидина на углеродных нанотрубках из водных
растворов", представленную на соискание ученой степени
кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Цель диссертационного исследования Ле Динь Туана заключалась в установлении основных закономерностей равновесной адсорбции L- и D-гистидина на углеродных нанотрубках (УНТ) в водных растворах для различных концентраций и температур. Актуальность темы диссертации обусловлена существующей проблемой получения гомохиральных лекарственных препаратов при разработке новых лекарств и недостаточной разработанностью теории энантиоразделения.

Получены интересные результаты, научная новизна которых заключается в выявлении более высокого сродства углеродных нанотрубок MKN-SWCNT-S1 к D-гистидину по сравнению с L-изомером, а также интерпретации данного экспериментального результата. Методами квантовой химии установлено, что энергия адсорбции индивидуального цвиттер-иона и димера D-гистидина на УНТ выше энергии адсорбции L-изомера, что автор объясняет большим удалением L-изомера от поверхности УНТ, доказанным сравнением расстояний между атомами сорбента и сорбата в оптимизированных структурах. Экспериментальные изотермы интерпретированы также на основе уравнения изотермы кластерной адсорбции, интересным следствием которого является предложенный автором способ определения атомно-молекулярной структуры сорбата на поверхности сорбента.

В качестве замечания отметим, что для нанотрубок с открытыми концами, используемых автором при моделировании, возможна адсорбция аминокислоты конечным участком нанотрубки, а также проникновение гистидина внутрь нанотрубки, что не проанализировано автором.

Судя по автореферату, диссертационное исследование по объему исследований, актуальности, новизне, научной и практической значимости соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия, отвечает требованиям п. 9-11, 13,14 "Положения о порядке присуждения ученых

степеней", утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. №842 (со всеми изменениями и дополнениями, в текущей редакции), ее автор Ле Динь Туан заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Кузнецов Андрей Михайлович,
доктор химических наук (специальность 02.00.05 – Электрохимия),
профессор по кафедре,
заведующий кафедрой неорганической химии
имени профессора Н.С. Ахметова
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
Высшего образования "Казанский национальный исследовательский
технологический университет", профессор



Кузнецов Андрей Михайлович

Подпись Кузнецова Андрея Михайловича заверяю



Почтовый адрес:

420015, г. Казань, ул. К. Маркса, 68

Тел.+7(843)231-41-22

Адрес электронной почты: am_kuznetsov@kstu.ru

25.05.23

Даю согласие на обработку персональных данных.