

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ле Динь Туана
«Адсорбция *L*- и *D*-гистидина на углеродных нанотрубках
из водных растворов»,

представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4. Физическая химия

Актуальность диссертации Ле Динь Туана определяется важностью как выяснения природы и механизма энантиоселекторного действия углеродных нанотрубок (УНТ), так и обеспечения эффективного разделения оптических изомеров гистидина.

Диссертационная работа Ле Динь Туана посвящена установлению закономерностей равновесной адсорбции *L*- и *D*-гистидинов на УНТ в водных растворах при различной концентрации и температуре, а также формированию представлений о хиральных взаимодействиях энантиомеров с нанотрубками. Это является **значимым** для развития физической химии энантиоразделения.

Перечислим некоторые научные результаты автора, представляющие **обширные массивы данных** и отличающиеся **ярко выраженной научной новизной**.

Выявлен перспективный наносорбент для реализации процесса разделения оптических изомеров гистидина и показана возможность количественного разделения *L*- и *D*-гистидинов на УНТ MKN-SWCNT S1.

Анализ изотерм адсорбции показал, что сорбционная ёмкость УНТ марки MKN-SWCNT-S1 к *D*-гистидину выше, чем к *L*-изомеру, что обусловлено различным взаимодействием энантиомеров с хиральными сорбентами.

Установлено, что величина адсорбции обоих энантиомеров гистидина на УНТ снижается по мере увеличения температуры.

Предложены атомно-молекулярные модели структуры сорбата на УНТ.

Доказано, что в изученном интервале значений концентрации и температуры энантиомеры гистидина адсорбируются на поверхности сорбента в форме индивидуальных цвиттер-ионов и кластеров из различного числа цвиттер-ионов.

Квантовохимическое рассмотрение на уровне теории B3LYP/6-31G(*d,p*)GD3 позволило установить большее число точечных взаимодействий атомов азота и кислорода *D*-изомера гистидина с правовращающей УНТ, меньшее расстояние между центрами масс *D*-изомера и УНТ, а также бóльшую величину энергии адсорбции мономера и димера *D*-гистидина на УНТ по сравнению *L*-энантиомером.

L- и *D*-гистидины закрепляются на УНТ посредством сил Ван-дер-Ваальса и π - π стекинговых взаимодействий. Энергия адсорбции индивиду-

ального цвиттер-иона *D*-гистидина на УНТ незначительно выше энергии адсорбции *L*-изомера. Различие в энергии усиливается при ассоциации по мере роста концентрации, что приводит к различной структуре кластеров энантиомеров на УНТ и является причиной большей комплементарности углеродных нанотрубок к *D*-изомеру.

Оценён вклад сорбат-сорбатных взаимодействий в энергию адсорбции. Выяснено, что биполярные ионы в кластерах сорбата связаны водородными связями. Рассчитана средняя энергия межмолекулярных водородных связей.

Достоверность полученных Ле Динь Туаном научных результатов подтверждается их **непротиворечивостью**, использованием **совокупности независимых взаимодополняющих методов исследования**.

Будучи **завершённым**, диссертационное исследование Ле Динь Туана имеет **перспективы дальнейшего развития**. Отметим лишь одно направление. Автор осуществил квантовохимическое моделирование нанотрубок с открытыми концами и адсорбции аминокислоты боковой поверхностью. Впоследствии будет интересно рассмотреть возможность проникновения молекул или цвиттер-ионов внутрь нанотрубки.

В ходе выполнения диссертационной работы Ле Динь Туан обнаружил **владение разнообразными современными методами исследования**, среди которых – ультразвуковое диспергирование водно-кислотных суспензий УНТ, обширный арсенал методов теоретического моделирования и экспериментального изучения адсорбции, спектрофотометрия, методы квантовой химии, включая учёт влияния среды посредством модели поляризуемого континуума, методы математической статистики, в том числе регрессионного анализа.

Также диссертант проявил **умение грамотно использовать** в работе ключевые положения физической химии, экспериментальных и теоретических методов исследования. Это подтверждает **высокую квалификацию и широкий научный кругозор** автора.

Диссертация прошла **широкую апробацию**, результаты доложены и обсуждены на представительных международных и всероссийских конференциях, симпозиумах, семинарах и школах.

Результаты работы **достаточно полно** отражены в публикациях, среди которых – статьи в авторитетных профильных журналах («Journal of Molecular Structure», «Журнал физической химии», «Успехи в химии и химической технологии», «Сорбционные и хроматографические процессы»).

Всё сказанное свидетельствует о **высоком научном уровне** диссертационного исследования.

Судя по автореферату, диссертация Ле Динь Туана «Адсорбция *L*- и *D*-гистидина на углеродных нанотрубках из водных растворов» является законченной научной работой. Диссертационная работа соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия, отвечает требованиям п. 9-

11, 13, 14 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 (со всеми изменениями и дополнениями, в текущей редакции), а её автор Ле Динь Туан заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Фамилия, имя, отчество: Панкратов Алексей Николаевич

Учёная степень: доктор химических наук (02.00.04 – Физическая химия)

Учёное звание: профессор

Место работы: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

Должность: профессор кафедры аналитической химии и химической экологии

Почтовый адрес организации: 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, корп. 1, Институт химии СГУ

Сайт организации: <http://www.sgu.ru>

Телефон: +7 (8452) 51-64-11

Электронная почта: PankratovAN@info.sgu.ru

Даю согласие на обработку персональных данных.

А.Н. Панкратов

29 мая 2023 г.

