

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ле Динь Туан

«Адсорбция L- и D-гистидина на углеродных нанотрубках из водных растворов»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по  
специальности 1.4.4 – физическая химия.

Работа посвящена сразу нескольким актуальным направлениям в современной науке о сорбционных процессах на поверхности твердых тел. Во-первых, это относится к крайне актуальной в фармации проблеме адсорбционного разделения энантиомеров, т.е. имеет важное практическое значение. Во-вторых, в качестве адсорбентов исследуются такие новые материалы, как углеродные нанотрубки (особенно с хиральностью поверхности), свойства которых ещё не исследованы до конца. В-третьих, как оказалось при выполнении исследований, работа посвящена развитию нового направления в теории сорбционных процессов – кластерной модели адсорбции, которая описывается не подходящим ни к одному из всемирно признанных типов изотерм адсорбции. Это определяет и научную значимость работы.

В работе впервые установлено, что использованные углеродные нанотрубки (УНТ) имеют большее сродство по отношению к D-гистидину по сравнению с L-гистидином. Применение оптимизации по ранее предложенному алгоритму позволило оценить вклады мономеров сорбата и их кластеров, для которых автоматически получают число молекул в кластере. Полученные значения параметров уравнения кластерной изотермы сорбции позволяют удовлетворительно описать экспериментальные данные, что указывает на адекватность предложенной модели.

Для подтверждения предложенной модели автором использовано квантово-химическое моделирование сорбции энантиомеров гистидина на модельной УНТ в среде поляризационного континуума. Полученные при этом результаты не противоречили экспериментальным данным.

В качестве пожеланий на продолжение исследований по данному направлению желательно учесть следующее:

1. Расчетные методы выполнены на модели правовращающей хиральности УНТ (7,6), для которой подтверждено большее сродство поверхности к D-гистидину по сравнению с L-гистидином. Кажется, логичным бы было исследование сродства УНТ с левовращающей хиральностью для этой же пары сорбатов.
2. В будущем желательно заменить среду континуума на молекулы воды, которые могут образовывать более прочные водородные связи с молекулами гистидина по сравнению с водородными связями между молекулами гистидина и результаты оптимизации геометрии сорбированных кластеров представлять

не только в одной проекции.

3. В работе выполнен эксперимент по сорбции отдельно D- и L-энантиомеров гистидина для установления закономерностей сорбции. Но при этом в будущем желательно провести эксперимент по сорбции рацемата с подтверждением эффективности использования УНТ для разделения энантиомеров из рацемических смесей (если приведенные в табл. 3 данные рассчитаны по данным табл. 1 и табл. 2).

Важный вопрос по выполненной работе – почему исключили из рассмотрения сорбцию молекул гистидина внутри УНТ?

Отмеченные недостатки не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы, подтвержденную убедительным списком опубликованных статей и выступлений на конференциях.

Диссертационная работа Ле Динь Туан представляет собой законченное исследование, соответствующее требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного правительством Постановлением № 824 правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Согласен на обработку персональных данных.

Дейнека Виктор Иванович, доктор химических наук,  
профессор,

Тел. 8 915-573-72--36

Email: deineka@bsu.edu.ru

308015, Белгород, ул. Победы, 85

Кафедра общей химии института фармации, химии и биологии  
Белгородского государственного национального исследовательского  
университета

Подпись заверяю:

Личную подпись  
удостоверяю  
Ведущий специалист  
по кадрам  
департамента управления  
персоналом

«29» 05 2023 г.