

**Протокол № 431**  
заседания диссертационного совета 24.2.288.04  
от 04.07.2023

Состав диссертационного совета утвержден в количестве 17 человек. Присутствовали на заседании 15 человек.

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

**Присутствовали:** д. хим. наук, профессор Введенский Александр Викторович, д. хим. наук, доцент Козадеров Олег Александрович, д. хим. наук, профессор Семенов Виктор Николаевич, к. хим. наук, доцент Хохлова Оксана Николаевна, д. хим. наук, профессор Бобрешова Ольга Владимировна, д. хим. наук, профессор Бутырская Елена Васильевна, 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 Кострюков Виктор Федорович, д. хим. наук, доцент Томина Елена Викторовна, д. хим. наук, доцент Козадерова Ольга Анатольевна, д. хим. наук, профессор Зарцын Илья Давидович.

**Официальные оппоненты по диссертации:**

**Алехина Марина Борисовна** – доктор химических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», факультет технологии неорганических веществ и высокотемпературных материалов, кафедра технологии неорганических веществ и электрохимических процессов, профессор – отсутствует по уважительной причине, положительный отзыв получен.

**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 – присутствует.

**Ведущая организация:**

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» – положительный отзыв получен.

**Слушали:**

Защиту диссертационной работы 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.

В обсуждении диссертационной работы приняли участие: д. хим. наук, профессор Кавченко Т.А., д. хим. наук, профессор Зарцын И.Д., д. хим. наук, профессор, Селеменев В.Ф., д. хим. наук, профессор Введенский А.В.

Вопросы задали: д. хим. наук, профессор Шапошник В.А., д. хим. наук, профессор Кавченко Т.А., д. хим. наук, профессор Зарцын И.Д., д. хим. наук, профессор Хохлов В.Ю., д. хим. наук, профессор Селеменев В.Ф., д. хим. наук, профессор Введенский А.В.

**Постановили:**

На основании протокола № 1 счетной комиссии считать, что диссертация Ле Динь Туана отвечает всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.



**Результаты голосования:** 15 – «за»; «против» – нет; недействительных бюллетеней – нет.

По результатам обсуждения работы принято следующее **заключение:**

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.288.04, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ», МИНОБРНАУКИ РОССИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК**

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 04.07.2023 г., № 431

О присуждении Ле Динь Туану, гражданину Социалистической республики Вьетнам, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Адсорбция L- и D-гистидина на углеродных нанотрубках из водных растворов» по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 25.04.2023 г. (протокол заседания № 428) диссертационным советом 24.2.288.04, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет», Минобрнауки России, 394018, г. Воронеж, Университетская пл., 1, приказ Минобрнауки России № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель Ле Динь Туан, 15.05.1991 года рождения является аспирантом кафедры аналитической химии химического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

В 2017 г. соискатель окончил магистратуру Ханойского государственного университета.

Диссертация выполнена на кафедре аналитической химии химического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Бутырская Елена Васильевна, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный университет», химический факультет, кафедра аналитической химии, профессор.

Официальные оппоненты:

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

- дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», г. Самара, в своем положительном отзыве, подписанном Онучак Людмилой Артемовной, доктором химических наук, профессором, заведующей кафедрой физической химии и хроматографии, указала, что диссертационная работа Ле Динь Туана представляет собой законченную научно-квалификационную работу, выполненную на высоком уровне, в которой содержится решение поставленных актуальных задач разделения энантиомеров аминокислот. Полученные автором результаты, отмеченная перспективность их использования, сделанные выводы в полной мере обоснованы.



По актуальности проблемы, научной новизне, теоретической и практической значимости, достоверности и обоснованности результатов и выводов, диссертационная работа Ле Динь Туана соответствует требованиям Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Ле Динь Туан заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Соискатель имеет 13 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 13 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 5 работ. Основные результаты работы доложены на 8 Международных и Всероссийских конференциях. В диссертации Ле Д.Т. отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации. Авторский вклад составляет 85 %, общий объем научных изданий по теме диссертации – 3,75 п.л.

Наиболее значительные работы по теме диссертации:

1. Ле Д. Т. Сорбционные взаимодействия углеродных нанотрубок с энантиомерами гистидина в водных растворах / Д. Т. Ле, Е. В. Бутырская, Т. В. Елисеева // Журнал физической химии. - 2021. - Т. 95, № 11. - С. 1716- 1723.
2. Ле Д. Т. Кластерная адсорбция L-гистидина на углеродных нанотрубках в водных растворах при различных температурах / Д. Т. Ле, Е. В. Бутырская, Т. В. Елисеева // Журнал физической химии. - 2022. - Т. 96, № 8. - С. 1170-1175.
3. Butyrskaya E. V. Understanding structure of alanine enantiomers on carbon nanotubes in aqueous solutions / E. V. Butyrskaya, E. A. Izmailova, D. T. Le // Journal of Molecular Structure. - 2022. - V. 1259. - № 132616. - P. 1- 9.

На диссертацию и автореферат поступило 8 отзывов: 1) Суханов Павел Тихонович, доктор химических наук, профессор, профессор кафедры физической и аналитической химии ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий»; 2) Дейнека Виктор Иванович, доктор химических наук, профессор, профессор кафедры общей химии института фармации, химии и биологии ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»; 3) Буряк Алексей Константинович, доктор химических наук, член корреспондент РАН, директор федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН»; 4) Кузнецов Андрей Михайлович, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой неорганической химии имени профессора Н.С. Ахметова ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет»; 5) Золотухина Екатерина Викторовна, доктор химических наук, главный научный сотрудник федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук»; 6) Панкратов Алексей Николаевич, доктор химических наук, профессор, профессор кафедры аналитической химии и химической экологии, ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»; 7) Лазарев Сергей Иванович, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный технический университет»; 8) Сырков Андрей Гордианович, доктор технических наук, профессор, и Силиванов Михаил Олегович кандидата химических наук, доцент кафедры общей и технической физики ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский горный университет».

Все отзывы положительные, в них отмечается актуальность работы, научная новизна, теоретическая и практическая значимость, а также достоверность результатов. Замечания носят частный характер и определяют перспективу дальнейших исследований в предложенном диссертантом направлении.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается наличием публикаций в соответствующей сфере исследования и способностью определить научную и практическую ценность диссертации.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**



- **разработана** физико-химическая модель хиральных взаимодействий L- и D-гистидина с углеродными нанотрубками (УНТ), согласно которой аминокислота сорбируется на поверхности сорбента в виде мономеров и водородно-связанных кластеров;

- **предложены** атомно-молекулярные модели структуры сорбата, доказано, что L-гистидин сорбируется на УНТ в виде цвиттер-ионов и кластеров, все кластеры, кроме L-кластера из 13 молекул (25° С), лежат в первом слое.

- **доказано** снижение величины адсорбции энантиомеров на нанотрубках с ростом температуры, что связано с ослаблением взаимодействий сорбент-сорбат;

- **введены** представления о механизме адсорбционного взаимодействия между гистидином и УНТ, включающие фиксацию L- и D-гистидина на нанотрубке за счет сил Ван дер Ваальса и  $\pi$ - $\pi$ -стэкинг-взаимодействий.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

- **доказано** и теоретически обосновано более высокое сродство углеродных нанотрубок к D-гистидину, по сравнению с L-изомером для исследованных концентраций и температур;

- **применительно к проблематике диссертации эффективно использован** комплекс современных методов исследования: спектрофотометрия, ультразвуковое диспергирование, центрифугирование, метод переменных концентраций, квантово-химическое моделирование;

- **изложены** особенности хирального взаимодействия энантиомеров гистидина с правовращающей УНТ, определяющие закономерности равновесной адсорбции энантиомеров гистидина на углеродных нанотрубках MKN-SWCNT-S1 в водных растворах;

- **изучена** температурная и концентрационная зависимость адсорбционной способности нанотрубок к энантиомерам гистидина в водных растворах.

- **раскрыта** причина повышенного сродства УНТ к D-гистидину, обусловленная большим числом точечных контактов атомов D-аминокислоты с поверхностью наносорбента по сравнению с L-изомером.

- **проведен** расчет энергий адсорбции мономеров и димеров энантиомеров гистидина на правовращающей УНТ в водном растворе методами квантовой химии.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

- **разработан** способ определения атомно-молекулярной структуры сорбата на поверхности сорбента из экспериментальной изотермы, позволяющий определить число мономеров в кластере сорбата и число мономеров в его первом слое, что важно для изучения химических процессов, происходящих на поверхности;

- **определен** перспективный наносорбент для реализации процесса разделения оптических изомеров гистидина и показано, что в области исследованных концентраций и температур возможно количественное разделение L- и D-гистидина на углеродных нанотрубках MKN-SWCNT S1;

- **создана** система практических рекомендаций по применению углеродных наночастиц для целей разделения энантиомеров гистидина.

- **представлено** линейное снижение величины максимальной адсорбции с ростом температуры, что может быть использовано для термической регенерации УНТ.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:** достоверность полученных результатов, обоснованность научных положений и выводов работы обусловлена системностью исследования, применением современных методов анализа, использованием сертифицированного оборудования и программного обеспечения, согласованием результатов частных случаев с литературными данными;

**Личный вклад соискателя состоит в:** участии в общей постановке задач и формулировке выводов, анализе и систематизации данных литературы, подготовке, планировании и получении экспериментальных данных, обработке полученных результатов, подготовке публикаций по выполненной работе и формулировке положений, выносимых на защиту совместно с научным руководителем.



В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания и заданы вопросы:

1) Полный процесс включает адсорбцию и десорбцию. Вы изучали десорбцию? 2) Вы получили разумные энергии водородных связей, но использовали поправочный коэффициент. Как его находили? 3) Что вносит больший вклад в величину адсорбции мономеры или кластеры? 4) Все полученные данные направлены на разделение энантиомеров. Можете привести свои данные по разделению? 5) Достаточно ли различий в сорбции для экспериментального разделения изомеров гистидина? 6) Можно ли по Вашим данным полагать, что повышенное сродство к одному энантиомеру будет означать аналогичную асимметрию поверхности, ее хиральность? 7) Пробовали проводить эксперимент, когда Ваши энантиомеры присутствовали в растворе одновременно? 8) вы использовали достаточно высокие температуры. При повышенных температурах происходит ли изменение поверхности УНТ? 9) Как из изотермы адсорбции получили количество мономеров в кластере? 10) В какой форме – катион, анион или биполярный ион находился гистидин в Вашем растворе? 11) Уравнение адсорбции (4) имеет сложный вид из множества слагаемых, а уравнении (13) – короткий вид почему?

Соискатель Ле. Д.Т. ответил на задаваемые ей в ходе заседания вопросы и привела собственную аргументацию: 1) нет не изучали; 2) коэффициент  $k$  - это отношение экспериментальной к рассчитанной величине энергии водородной связи в димере гистидина; 3) при низких концентрациях - мономеры, при больших концентрациях - кластеры; 4) исследовали только адсорбцию индивидуальных растворов L- и D- гистидина нанотрубками; коэффициенты разделения рассчитаны из экспериментальных изотерм и приведены в табл.1 на сл. 12; 5) достаточно; 6) симметрия правовращающих нанотрубок аналогична симметрии D- изомера; 7) нет; 8) на поверхности может образоваться мало карбоксильных групп, они не влияют на адсорбцию и разделение; 9) количество мономеров в кластере является параметром изотермы кластерной адсорбции и определяется методом наименьших квадратов; 10) преимущественно в форме биполярного иона; 11) уравнение (4) – это общее уравнение для всех случаев, а уравнение (12) – это для наших систем.

На заседании 04.07.2023 г. диссертационный совет принял решение: за решение научной задачи, заключающейся в установлении физико-химических закономерностей хиральных взаимодействий энантиомеров гистидина с углеродными нанотрубками, имеющей значение для физической химии энантиоразделения, присудить Ле Динь Туану ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 5 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 17 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» – 15, «против» – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель  
диссертационного совета

Ученый секретарь  
диссертационного совета

04.07.2023 г.



Введенский Александр Викторович

Хохлова Оксана Николаевна