

## Протокол № 398

заседания диссертационного совета Д 212.038.08

от 11.10.2018

Состав диссертационного совета утвержден в количестве 23 человек. Присутствовали на заседании 18 человек.

**Председатель:** 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 Сладкопечев Борис Владимирович, д. хим. наук, профессор Бутырская Елена Васильевна, д. хим. наук, профессор Калужина Светлана Анатольевна, д. хим. наук, профессор Котова Диана Липатьевна, д. хим. наук, профессор Кравченко Тамара Александровна, д. хим. наук, профессор Миттова Ирина Яковлевна, д. хим. наук, профессор Селеменев Владимир Федорович, д. хим. наук, профессор Семенова Галина Владимировна, д. хим. наук. Сунцов Юрий Константинович, д. хим. наук, профессор Хохлов Владимир Юрьевич, д. хим. наук, профессор Шапошник Владимир Алексеевич, 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.

**Слушали:** Председателя экспертной комиссии, созданной для предварительного ознакомления с диссертационной работой Трунаевой Евгении Сергеевны «Необменная сорбция ароматических аминокислот полистирольными анионообменниками» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, д.х.н., профессора Бутырскую Е.В.

Работа выполнена в Воронежском государственном университете.

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

Диссертационная работа Трунаевой Е.С. посвящена решению актуальной научной задачи – установлению физико-химических закономерностей, термодинамическому описанию и формированию основ практического применения необменной сорбции ароматических аминокислот и смесей с их участием полистирольными анионообменниками.

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

1. Методом квантово-химического моделирования установлено, что при необменном поглощении аминокислот ионообменниками сорбционными центрами являются функциональные группы ионообменника с противоионами различной природы (хлорид-ионы и ионы аминокислот), а закрепление поглощенных цвиттерлитов происходит преимущественно за счет формирования водородных связей между гидратными оболочками сорбционного центра и функциональных групп аминокислоты. Вклад кулоновских и гидрофобных сил в энергию закрепления сорбата в сорбенте мал. Полученные оптимизированные структуры, отражающие межчастичные взаимодействия в фазе сорбента, позволяют представить необменную сорбцию как стехиометрический процесс – на один сорбционный центр приходится определенное количество поглощенного вещества.

2. На основе представлений о стехиометричности закрепления поглощенного вещества в фазе сорбента предложен термодинамический подход, позволяющий проводить описание необменной сорбции веществ ионообменниками. Рассчитаны коэффициенты равновесия, коэффициенты активности компонентов фазы сорбента, термодинамические константы, интегральные и дифференциальные энергии Гиббса процесса необменной сорбции аминокислот из индивидуальных растворов и их смесей с другими веществами.

Показано, что рассчитанные характеристики определяются растворимостью аминокислот, способностью к образованию ассоциатов в фазе раствора, соотношением количеств сорбционных центров несвязанных и связанных с поглощенным веществом.

3. Установлены закономерности необменной сорбции триптофана, фенилаланина и гистидина полистирольными анионообменниками АВ-17-2П (Cl), АН-251 (HCl) и АН-221 (HCl). Показано, что поглощение в данных системах характеризуется близкими (и невысокими) величинами сорбции, что вызвано поглощением в узком концентрационном интервале, и идентичностью их закрепления в сорбенте. Поглощение аминокислот из их смесей меньше, чем из индивидуальных растворов и определяется гидрофобностью и размером радикала. При сорбции аминокислот из смеси с минеральными веществами поглощение падает из-за протекания протолитических и ассоциативных процессов в растворе – перезарядки цвиттерлита в катион и образования органо-минеральной соли.

4. Предложен безреагентный способ разделения смесей аминокислот и солей на анионообменниках, имеющих общий противоион с минеральным компонентом. Установлено, что данным способом целесообразно проводить обессоливание растворов аминокислот на высокоосновном анионообменнике АВ-17-2П с использованием низкого и широкого слоя мелкодисперсного сорбента при малых скоростях подачи раствора и десорбции поглощенного вещества водой.

Работа выполнена на высоком научном и методическом уровне с использованием современных физико-химических методов исследования, квантово-химических и термодинамических расчетов, систематического анализа экспериментальных данных.

Тема и содержание диссертации соответствует паспорту специальности 02.00.04 – физическая химия в соответствии с паспортом специальностей научных работников.

Полнота изложения материалов диссертации составляет 95%. Список работ, опубликованных по теме диссертации, включает 21 наименование, 11 статей и 10 тезисов докладов на Международных и Всероссийских конференциях.

По результатам прохождения диссертации программы «Антиплагиат» экспертная комиссия установила уровень оригинальности 80 %.

Результаты работы могут быть рекомендованы для использования в Воронежском государственном университете, Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова, Институте физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Институте геохимии и аналитической химии РАН, Институте водных проблем РАН, Институте проблем химической физики РАН, Воронежском государственном университете инженерных технологий, Воронежском государственном аграрном университете.

Рассмотрение диссертации Е.С. Трунаевой входит в компетенцию диссертационного совета Д 212.038.38 при Воронежском государственном университете. Комиссия рекомендует представить ее к защите по специальности 02.00.04 – физическая химия.

В качестве официальных оппонентов предлагаются:

- **Золотухина Екатерина Викторовна**, доктор химических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт проблем химической физики РАН», лаборатория электродных процессов в жидкостных системах, заведующая;

- **Перегудов Юрий Семенович**, кандидат химических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный университет инженерных технологий», кафедра неорганической химии и химической технологии, доцент.

В качестве ведущей организации рекомендуется **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»**.

**Постановили:**

Принять к защите диссертацию Трунаевой Евгении Сергеевны «Необменная сорбция ароматических аминокислот полистирольными анионообменниками» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Утвердить официальными оппонентами

- **Золотухину Екатерину Викторовну**, доктора химических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт проблем химической физики РАН», заведующую лабораторией электродных процессов в жидкостных системах.

- **Перегудова Юрия Семеновича**, кандидата химических наук, доцента, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный университет инженерных технологий», доцента кафедры неорганической химии и химической технологии,

Утвердить ведущую организацию по диссертации Трунаевой Е.В. – **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».**

Назначить дату защиты на 13 декабря 2018 г.

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

**Результаты голосования:**

«за» – 18, «против» – нет, «воздержался» – нет

Председатель совета

Введенский Александр Викторович

Ученый секретарь совета

Сладкопевцев Борис Владимирович

