

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по НИР
ФГБОУ ВО «Саратовский
национальный исследовательский
государственный университет
имени Н. И. Чернышевского»,
д. ф. м. н., профессор
Короновский Алексей Александрович



« 20 » ноября 2020 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

о диссертационной работе Измайловой Екатерины Анатольевны на тему «Адсорбция энантиомеров аланина из водных растворов на углеродных нанотрубках», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Актуальность темы диссертации

Углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой новый тип наноматериалов, имеющих огромный потенциал для разнообразных технологических приложений. Одним из перспективных направлений их практического применения является биомедицина. Это, прежде всего, разработка новых средств адресной доставки лекарственных препаратов, создание биосенсоров, разработка «строительного материала» для тканевой инженерии, визуализация молекулярных, клеточных и тканевых структур и др. Свойство хиральности и высокие адсорбционные свойства УНТ, позволяют рассматривать их в качестве перспективных сорбентов для разделения оптических изомеров. Поэтому диссертационная работа Измайловой Е. А., посвященная построению физико-химической модели сорбционного взаимодействия энантиомеров аланина с углеродными нанотрубками и выявлению причин различного сродства УНТ к данным

оптическим изомерам, является **актуальным исследованием** как с теоретической, так и с практической точек зрения.

Структура диссертационной работы

Диссертационная работа Измайловой Е. А., выполненная в ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», по содержанию и структуре полностью отвечает научно-квалификационной работе на соискание ученой степени кандидата химических наук. Она изложена на 122 страницах, содержат 53 рисунка, 15 таблиц и состоит из введения, литературного обзора, 3-х экспериментальных глав, выводов, списка используемой литературы из 147 наименований.

Основные научные результаты

К наиболее важным результатам диссертационной работы Измайловой Е. А., характеризующим ее **научную новизну**, можно отнести следующие:

1. Установлено, что вследствие свойства хиральности углеродных нанотрубок величина адсорбции D-аланина на углеродных нанотрубках MKN-SWCNT-S1 в 2-3 раза выше, чем для L-аланина в интервале концентраций 0,005-0,060 моль/дм³.

2. Показано, что энантиомеры аланина сорбируются на поверхности УНТ преимущественно в форме мономеров и кластеров из 7 молекул для L-аланина и из 9 молекул для D-аланина, что и объясняет наличие двух плато на изотермах адсорбции.

3. Квантово-химическим расчетом элементарного акта адсорбции оптических изомеров аланина на модели углеродной нанотрубки, установлено, что D-изомер находится ближе к поверхности правовращающейся нанотрубки и имеет большее число контактов функциональных групп сорбата с сорбентом, чем L-аланин. Это обуславливает большую величину энергии адсорбции мономера, димера и кластера D-аланина на УНТ и большее сродство нанотрубки к D-изомеру.

4. На основании экспериментальных изотерм адсорбции и квантово-химических расчетов разработана физико-химическая модель кооперативной адсорбции энантиомеров аланина на углеродных нанотрубках, согласно которой начальная адсорбция мономера сорбата облегчает адсорбцию новых молекул и приводит к образованию кластеров сорбата различных размерностей.

Теоретическая и практическая значимость результатов

Теоретическая значимость работы заключается в выявлении и интерпретации эффекта повышенного сродства углеродных нанотрубок к D-изомеру аланина, а также в определении молекулярной структуры сорбата на поверхности сорбента.

Практическая значимость состоит в разработке методологии подбора наносорбента на основе наноуглеродных трубок для технологического разделения оптических изомеров.

Достоверность полученных результатов обусловлена, во-первых, использованием комплекса современных теоретических и экспериментальных подходов, системной методологии в достижении поставленной цели, во-вторых, корректным сопоставлением полученных результатов с литературными данными, многократным обсуждением на всероссийских и международных конференциях.

Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации.

Результаты диссертационной работы Е. А. Измайловой рекомендуются для расширенного использования в академических учреждениях, занимающихся разработкой сорбентов для биомедицинских приложений: Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН; в высших учебных заведениях: Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Петербургский государственный университет, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королева.

Автореферат и опубликованные работы отражают основные положения диссертации. Диссертационная работа прошла хорошую апробацию. Результаты исследования и отдельные его разделы докладывались и обсуждались на представительных Международных и Всероссийских конференциях. Научные и практические результаты диссертации представлены в достаточном количестве опубликованных работ – 11 печатных работах. Основные положения диссертации опубликованы в

пяти статьях в рекомендованных ВАК РФ рецензируемых научных изданиях (включая 4 публикации, индексируемых базами Scopus и Web of Science), 6 материалов и тезисов конференций. Вклад автора в разработку проблемы в работах, опубликованных коллективно с соавторами, обозначен.

Общие замечания

Принципиальных замечаний нет. Однако при чтении диссертации возникают некоторые **вопросы, замечания и пожелания**:

1. В диссертационном исследовании проведен глубокий квантово-химический анализ элементарного акта адсорбции энантиомеров аланина на модели углеродной нанотрубки, позволивший рассчитать величины энергии адсорбции мономеров, димеров и кластеров сорбатов. Возникает два вопроса:

а) Можно ли было подтвердить эти выводы экспериментально, термодинамически, например, проведя изучение влияния температуры на характер и количественные параметры экспериментальных изотерм процесса адсорбции?

б) В качестве модели углеродной нанотрубки выбрана правовращающая трубка хиральности (7,5), элемент структуры которой приведен на рис. 4.1. Адсорбция аланина в модели в основном происходит на боковой поверхности нанотрубки. Имеются ли какие-то кристаллохимические различия между право- и левовращающей трубками?

2. Положения, выносимые на защиту таковыми не являются. Это перечисление полученных результатов.

Отмеченные недостатки и замечания не снижают общей теоретической и практической значимости выполненных Измайловой Е. А. исследований.

Заключение

Диссертационная работа Измайловой Е. А. на тему «Адсорбция энантиомеров аланина из водных растворов на углеродных нанотрубках» по объему выполненных исследований, актуальности, научной новизне и практической значимости полностью соответствует требованиям пп. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденном постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, является

научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи, имеющей значение для развития научных и прикладных аспектов разделения энантиомеров сорбционными методами, а ее автор, Измайлова Е. А., заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Отзыв на диссертацию и автореферат обсужден и одобрен на заседании кафедры физической химии ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского» 16 ноября 2020 г., протокол № 4.

Отзыв составил:

Фамилия, имя, отчество: Казаринов Иван Алексеевич

Учёная степень: доктор химических наук (02.00.05 - Электрохимия)

Учёное звание: профессор

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

Должность: заведующий кафедрой физической химии

Сайт организации: <http://www.sgu.ru>

Электронная почта: kazarinovia@mail.ru

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

+7 (8452) 51-64-13

Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., профессор

И. А. Казаринов

Подпись профессора Казаринова И. А.

заверяю:

Ученый секретарь СГУ



И. В. Федусенко

Сведения о ведущей организации

по диссертации Измайловой Екатерины Анатольевны на тему
«Адсорбция энантиомеров аланина из водных растворов на углеродных нанотрубках»
по специальности 02.00.04 – физическая химия
на соискание ученой степени кандидата химических наук

Полное наименование организации в соответствии с Уставом	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»
Сокращенное наименование организации в соответствии с Уставом	Саратовский университет, СГУ, ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»
Ведомственная принадлежность	Министерство науки и высшего образования
Почтовый индекс, адрес организации	Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83
Телефон	+7 (8452)26-16-96; +7(8452)27-85-29
Адрес электронной почты	rector@sgu.ru
Веб-сайт	www.sgu.ru

Публикации работников ведущей организации по специальности 02.00.04 – физическая химия

1. Влияние сорбции полиоксиэтилированного нонилфенола-12 на морфологию поверхности полтитаната калия / Макарова Н. М., Кулапина Е. Г., Третьяченко Е. В., Захаревич А. М. // Журнал неорганической химии. 2014. Т. 59. № 6. С. 794.
2. Влияние сорбции полиоксиэтилированных нонилфенолов на структуру поверхности полтитаната калия / Макарова Н. М., Кулапина Е. Г., Третьяченко Е. В., Гороховский А. В., Захаревич А. М. // Журнал физической химии. 2014. Т. 88. № 12. С. 2006.
3. Определение олеаноловой и глицирризиновой кислот методом тонкослойной хроматографии на обращенной фазе в водноорганических и модифицированных мицеллярных подвижных фазах / Сумина Е. Г., Штыков С. Н., Панкратов А. Н., Угланова В. З., Цымбал О. А., Данчук А. И. // Сорбционные и хроматографические процессы. 2014. Т. 14. № 6. С. 948-959.

4. Сорбенты на основе природных бентонитов, модифицированные полигидроксокатионами железа (III) и алюминия методом «золь-гель» / Комов Д. Н., Никитина Н. В., Казаринов И. А. // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология. 2015. Т. 15. № 2. С. 27-34.
5. Pressure influence on the structural characteristics of modified absorptive glass mat separators: a standard contact porosimetry study / Burashnikova M.M., Khramkova T.S., Kazarinov I.A., Shmakov S.L. // Journal of Power Sources. 2015. Т. 291. С. 1-13.
6. Физико-химические свойства сорбентов на основе бентонитовых глин, модифицированных полигидроксокатионами железа (III) и алюминия методом «соосаждения» / Никитина Н.В., Комов Д.Н., Казаринов И.А., Никитина Н.В. // Сорбционные и хроматографические процессы. 2016. Т. 16. № 2. С. 191-199.
7. Тонкослойная хроматография некоторых производных бензола в водных и модифицированных циклодекстриновых подвижных фазах / Сумина Е. Г., Углова В. З., Сорокина Т. Е., Сорокина О. Н. // Бутлеровские сообщения. 2016. Т. 45. № 3. С. 51-59.
8. Сорбенты на основе природных бентонитов, модифицированных полигидроксокатионами циркония(IV), алюминия и железа(III) методом «соосаждения» / Никитина Над. В., Никитина Нат. В., Казаринов И. А., Фартукова Е. В. // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Химия. Биология. Экология. 2018. Т. 18, Вып. 1. С. 20–24.
9. Нановолокна как сорбенты для концентрирования органических токсикантов из водных сред / Махова Т. М., Доронин С. Ю. // Бутлеровские сообщения, 2018. Т.53, №3. С.55-66.
10. Модифицированное нановолокно на основе полиакрилонитрила как сорбент для извлечения некоторых ионов тяжелых металлов / Данчук А. И., Грунова Ю. В., Доронин С. Ю., Лясникова А. В. // Сорбционные и хроматографические процессы. 2018. Т.18, №3. С.404-414.

Проректор по НИР СГУ
д. ф.-м. н., профессор

Ученый секретарь СГУ
к.х.н., доцент

Заведующий кафедрой физической химии
д.х.н., профессор



А. А. Короновский

И. В. Федусенко

И. А. Казаринов