

УТВЕРЖДАЮ:

и.о. декана химического факультета
имени М.В. Ломоносова
чл.-корр. РАН, профессор
Калмыков С.Н.

«04»

2019 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Кафедры радиохимии химического факультета
Федерального государственного бюджетного образовательного высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Диссертационная работа Митрофанова Артема Александровича на тему «In silico дизайн лигандов для комплексообразования и разделения трехвалентных лантаноидов и минор-актиноидов» по специальности 02.00.14 — радиохимия (хим. науки) выполнена на кафедре радиохимии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» (МГУ).

Митрофанов А.А. окончил магистратуру факультета наук о материалах Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» по направлению «Химия» в 2014 году. В том же году поступил в аспирантуру ФНМ МГУ. Обучение проходил по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» направленности «Радиохимия».

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2019 г. Федеральным государственным бюджетным учреждением высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Научный руководитель: доктор химических наук Калмыков Степан Николаевич, Федеральное государственное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», химический факультет, профессор, член.-корр. РАН.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Диссертационная работа посвящена компьютерному дизайну новых комплексообразователей для селективного выделения трехвалентных f-элементов. Их выделение и разделение являются одним из ключевых этапов переработки отработавшего ядерного топлива. Использование компьютерного моделирования могло бы серьезно ускорить процесс разработки новых экстрагентов и снизить сопутствующие расходы. Однако не существует единой теории, объясняющий экстракционные свойства в целевой система. Также не существует способов теоретически оценивать радиационную стойкость экстрагентов. Таким образом, заявленная тема исследования является актуальной.

Целью диссертационной работы А.А. Митрофанова является построение предсказательной модели, способной как рассчитывать устойчивость комплекса лиганда с целевым металлом, так и оценивать радиационную стойкость лиганда на основе его структуры. Для этого отдельно решались задачи по построению моделей типа «структура-свойско» методами машинного обучения; определения влияния типа образуемой

химической связи и конформационной подвижности лиганда на устойчивость комплекса; построения квантово-химической модели радиационной стойкости лиганда. Существенная часть работы посвящена проблемам выбора расчетных методов и приближений.

Объектом исследования являлся процесс комплексообразования с участием более 300 различных органических лигандов и трехвалентных f-элементов.

Для решения поставленных задач использовались различные методы вычислительной химии. Численные модели устойчивости комплексов были получены с использованием методов машинного обучения. Для анализа использовался вариационный подход. Исследование природы образуемой связи проводилось с использованием квантово-химических расчетов с полноэлектронными базисами и релятивистскими гамильтонианами. Для оценки конформационной подвижности и построения модели радиационной устойчивости был разработан гибридный подход, сочетающий стохастическую генерацию конформеров и квантово-химические расчеты. Полученные автором результаты являются воспроизводимыми и достоверными.

Наиболее важным результатом работы являются разработанные модели расчета константы устойчивости комплекса и константы радиолитического разложения лиганда. Первая существенно расширяет список металлов, для которых подобные исследования уже проводились и на порядки увеличивает точность расчета. Аналогов второй не существует.

Основные результаты, содержащиеся в диссертации, опубликованы в 3 статьях в международных научных изданиях и 18 тезисах докладов. В работах рассмотрены вопросы актуальности и современного состояния обсуждаемых проблем, результаты и выводы, входящие в диссертационную работу, и они отражают содержание диссертации.

В основу диссертационной работы положены результаты научных исследований, полученные непосредственно автором или при его участии в период 2014-2019 гг. Автор самостоятельно ставил задачи, планировал расчетные работы и принимал участие в планировании экспериментальной работы. Автором была проведена большая часть расчетов, приведенных в данной работе и написан программный код для их осуществления. Автор участвовал в подготовке и представлении устных и стендовых докладов на научных конференциях, написании публикаций для международных рецензируемых научных журналов.

Содержание диссертации соответствует специальности 02.00.14 — радиохимия (хим. науки). По актуальности темы, достоверности экспериментальных данных и практической значимости полученных результатов диссертация А.А. Митрофанова в полной мере отвечает критериям, предъявляемым к кандидатским диссертациям в «Положении о присуждении учёных степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова».

Диссертация Митрофанова Артема Александровича на тему «*In silico* дизайн лигандов для комплексообразования и разделения трехвалентных лантаноидов и минор-актиноидов» на соискание степени кандидата химических наук по специальности 02.00.14 радиохимия (хим. науки) рекомендуется к рассмотрению и защите на Диссертационном Совете МГУ .02.11.

Заключение принято на заседании кафедры радиохимии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Присутствовали на заседании — 27 чел. Результаты голосования: «за» — 27 чел., «против» — 0 чел., «воздержалось» — 0 чел., протокол № 89 от 18 сентября 2019 г.



С.В. Волкова, учёный секретарь кафедры радиохимии
химического факультета Федерального
государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования «Московский
государственный университет имени М.В.
Ломоносова»



С.Н. Калмыков, д.х.н., профессор, заведующий кафедрой
радиохимии химического факультета Федерального
государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования «Московский
государственный университет имени М.В.
Ломоносова»