

ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата химических наук Митрофанова Артема Александровича
на тему: «In silico дизайн лигандов для комплексообразования и
разделения трехвалентных лантаноидов и минор-актиноидов»
по специальности 02.00.14 – Радиохимия

Диссертационная работа А.А. Митрофанова посвящена разработке методов *in silico* дизайна новых комплексообразователей для трехвалентных f-элементов. Их разделение является наиболее сложным этапом в процессе переработки отработавшего ядерного топлива. Одним из наиболее перспективных решений данной проблемы представляется использование наиболее селективных и эффективных лигандов. Использование методов компьютерного моделирования существенно ускоряет процесс разработки новых типов лиганзов и уменьшает его стоимость, что определяет практическую значимость работы. Отдельным преимуществом данной диссертации является разработанная модель оценки радиационной стойкости, как одной из критически важных характеристик лиганда. Отсутствие предсказательной теории комплексообразования трехвалентных лантаноидов и минор-актиноидов определяет **актуальность** работы.

Работа состоит из введения, обзора литературы, описания проведенных расчетов, обсуждения результатов и выводов. Представлена на 101 странице, включает 53 рисунка и 9 таблиц. Список литературы включает 191 источник.

Обзор литературы начинается с обзора экспериментальных подходов к разделению, перечисления наиболее перспективных классов лигандов, описания лигандов, использующихся в промышленности в текущее время.

Далее в обзоре литературы рассмотрены физико-математические основы используемых методов моделирования; вопросы учета релятивизма в квантово-химических расчетах. Отдельная глава диссертации посвящена примерам использования описанных выше подходов для решения основной задачи работы – разделения трехвалентных лантаноидов и минор-актиноидов.

В расчетной части описаны использованные теоретические подходы и расчетные методы, описаны расчетные программные пакеты и библиотеки, использованные для написания программного кода автором работы.

Обсуждение результатов подтверждает успешность выполнения поставленных в работе задач. Приводятся результаты расчетов констант устойчивости методами машинного обучения и сравнение их с экспериментальными данными. Отдельно описывается «начинка» модели, с использованием вариационных подходов, определяются структурные фрагменты, влияющие на итоговое решение. Рассматриваются вопросы природы химической связи. Предлагается оригинальный подход к вопросу конформационного анализа и проблеме оценки радиационной устойчивости. Для каждого пункта приводится сравнение рассчитанных и экспериментальных данных.

Полученные теоретические результаты и **выводы обоснованы** и подтверждены экспериментальными данными. **Новизна и значимость** полученных результатов и выводов подтверждается сравнением с современными работами в данной области и не вызывает сомнений.

По содержательной части работы имеются следующие замечания:

1. На странице 64 делается «вывод, что модель образования комплекса не закончена». Подобное утверждение в контексте того, что модель структура-свойство выносится на защиту в качестве одного из положений, нуждается в развернутом пояснении границ применимости модели.

2. В работе описано большое число промежуточных результатов, однако в заключительной части не хватает понятно и кратко сформулированных принципов *in silico* дизайна новых комплексообразователей для трехвалентных f-элементов, которые и являются основной целью диссертационного исследования (например, была бы уместна таблица с перечислением теоретических методов, программных средств и приближений, сочетание которых по определенным в работе принципам позволяет решать поставленную задачу).
3. В работе ничего не сказано об анализе температурных эффектов на связывание и селективность рассматриваемых комплексов органических лигандов с трехвалентными f-элементами.

Указанные замечания не умаляют качества диссертационного исследования А.А. Митрофанова. Диссертация отвечает всем требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 02.00.14 – «Радиохимия» (по химическим наукам), а также критериям, определенным п.п. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Таким образом, соискатель Митрофанов Артем Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.14 – «Радиохимия».

Официальный оппонент

доктор физико-математических наук, заведующий отделом
многомасштабного суперкомпьютерного моделирования, Федеральное

государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт
высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН)

Стегайлов Владимир Владимирович



Контактные данные: тел. +7 (925) 846-40-56, e-mail: stegailov@gmail.com

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена
диссертация: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Адрес места работы:

104556, Россия, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный
институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН)
тел. (495) 485-83-45

Подпись Стегайлова Владимира Владимировича заверяю

Ученый секретарь ОИВТ РАН

д.ф.-м.н.



Р.Х. Амиров

М.П.

