

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Митрофанова Артема Александровича
«*In silico* дизайн лигандов для комплексообразования и разделения
трехвалентных лантаноидов и минор-актиноидов», представленной на
соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности
02.00.14 – Радиохимия

Диссертационная работа Артема Александровича посвящена проблеме разделения химически-схожих трехвалентных актиноидов и лантаноидов. В работе предлагается компьютерная модель, способная количественно предсказывать константы устойчивости комплексов произвольных органических лигандов с катионами целевых металлов, а также оценивать радиационную стойкость лиганда. Помимо этого, предложенный вариационный подход позволяет «расшифровать» построенную модель структура-свойство и определить аддитивные вклады отдельных фрагментов молекулы в итоговую величину. Стоит отметить, что экспериментальное определение описанных характеристик лиганда сопряжено со значительными ресурсными затратами, поэтому работа несомненно является актуальной, а ее результаты и выводы значимыми.

Помимо вышеописанного, в работе сформулирован новый подход к конформационному анализу лигандов, а также предложены объяснения эффектам «аномального ароматического упрочения» и радиопротекторным свойствам азотной кислоты, отмеченным в работах по экстракционному разделению трехвалентных лантаноидов и минор-актиноидов.

Результаты работы опубликованы в 4 статьях в международных журналах и представлена на 14 российских и международных конференциях.

Вопросы и замечания к автореферату:

1. Поставленная задача (1) включает построение модели комплексообразования трехвалентных редкоземельных элементов и минорных актинидов, в том числе кюрия, однако в выводе 1 результаты по кюрию не указаны.
2. Глава 3 диссертации в автореферате раскрыта недостаточно, следует пояснить исходные данные и/или допущения к моделированию. Указано, что в главе «рассматривается моделирование поведения катионов металлов в воде», однако приведены данные только для европия, а также, очевидно, корректнее было указать «в водных растворах».
3. Замечание к качеству рисунков в автореферате: некоторые рисунки слишком мелкие, с неразличимыми значениями (например, рис. 8 или 12), выполнены в оттенках серого, при этом очевидно, что в оригинале

эти рисунки цветные (например, в подписи к рис. 14 указано, что связи с наименьшим порядком выполнены красными линиями).

4. Следует пояснить соответствие публикаций автора №1 и 2 изложенным в автореферате результатам

Представленные вопросы и замечания не снижают достоинств представленной к защите работы, выполненной на высоком научном уровне. Работа соответствует 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). Соискатель Артем Александрович Митрофанов заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.14 – «радиохимия».

Винокуров Сергей Евгеньевич, кандидат химических наук
Ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией радиохимии
Федерального государственного бюджетного учреждения науки Ордена
Ленина и Ордена Октябрьской Революции Института геохимии и
аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук
(ГЕОХИ РАН)

119991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 19

www.geokhi.ru

vinokurov@geokhi.ru

+7 (495) 939-70-07



22.11.2019

Подпись: 
удостоверено: 
Зав. кафедрой ГЕОХИ РАН