

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Скобина Михаила Игоревича «Физико-химические свойства и строение комплексных соединений гепарина с ионами редкоземельных элементов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Диссертационная работа М.И. Скобина посвящена актуальной теме – исследованию физико-химических свойств и строения комплексных соединений гепарина с ионами редкоземельных элементов. Комплексы ионов лантаноидов с гепарином в целом мало изучены. Особый интерес представляют комплексы лантаноидов с гепарином, имеющим в своем составе трехосновное мономерное звено, так как могут быть использованы в качестве высокоэффективных лекарственных средств. В научной литературе совершенно отсутствуют сведения о физико-химических свойствах и строении комплексов лантаноидов с гепарином, состоящим преимущественно из трехосновных мономерных звеньев. Установление взаимосвязи между химическим составом, строением молекул и физико-химическими свойствами исследуемых комплексов, практически не вызывающих возникновение нежелательных лекарственных реакций, а также обладающих повышенным антикоагулянтным эффектом, является новой научной проблемой, имеющей важное практическое значение.

Необходимо отметить, что интенсивные исследования в указанном направлении на протяжении ряда лет проводятся на кафедре неорганической и аналитической химии в ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет». К ним относится и представленная к защите диссертационная работа Скобина М.И., в которой собраны, систематизированы и интерпретированы результаты по этой тематике, полученные за последнее время.

Прежде всего, хочется отметить новизну и научную значимость работы, заключающуюся в том, что:

1. Впервые исследованы химические равновесия в водных системах $\text{Ln}^{3+}\text{-Hep}^{3-}$ (Ln^{3+} : La^{3+} , Ce^{3+} , Pr^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+} , Eu^{3+} , Gd^{3+} , Tb^{3+} , Dy^{3+} , Ho^{3+} , Er^{3+} , Tm^{3+} , Yb^{3+} , Lu^{3+}) и рассчитаны константы устойчивости комплексных форм ($[\text{LnHep}]$), состоящих из трехосновного мономерного звена гепарина и иона лантаноида;
2. Впервые выделены в твердом виде «островные» комплексные соединения гепарина с рядом ионов РЗЭ, не содержащие внешнесферные ионы натрия; обнаружено, что структура исследуемых комплексов $[\text{Ln}(\text{H}_2\text{O})_x\text{Hep}]_n$ претерпевает стадию «перестройки» при смене комплексообразователя с Ho^{3+} на Er^{3+} ;

К несомненным успехам, достигнутым автором в период работы над диссертацией можно отнести установленные термические характеристики и брутто-формулы исследуемых комплексов, полученные им с применением элементного и термического анализа.

Безусловный интерес вызывают результаты успешного использования Скобиным М.И. данных ИК-спектроскопии и результатов квантовохимического моделирования, на основе которых установлен способ координации функциональных групп и предложены вероятные структурные формулы комплексного соединения мономерного звена гепарина с ионами лантаноидов;

Заслуживает внимания выявленный соискателем оптимальный функционал (M06-HF) для квантовохимического моделирования комплексов гепаринатов и аналогичных им соединений, на основе которого впервые проведено моделирование структуры $[Ln(H_2O)_x\text{Нер}]_n$ методом DFT с использованием функционала M06-HF в сочетании с базисным набором функций CSDZ*+.

Достоверность полученных результатов подтверждается значительным набором методов физико-химического анализа (рН-метрия, ИК-спектроскопия, термический анализ (ТГА и ДСК), рентгеноспектральный электронно-зондовый анализ).

Научная общественность знает работы соискателя по публикациям в ведущих российских изданиях и по докладам на Всероссийских и международных конференциях, в полном объеме раскрывающих содержание диссертации. По теме диссертации опубликовано 5 статей в научных журналах, рекомендованных ВАК РФ, две из которых индексируются в базе «Scopus», а также 10 тезисов докладов на конференциях различного уровня.

К очевидным достоинствам работы и успехам Скобина М.И. можно отнести и два патента РФ, подтверждающие новизну методов синтеза сложных соединений и приоритет автора в этой области.

После ознакомления с авторефератом, можно сделать вывод о том, что диссертация соответствует следующим пунктам паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия: п.1 Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик; п. 2. В части «Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики»; п. 11 в части «Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре».

Принципиальных замечаний по работе нет. Однако, необходимо обозначить неточности, встречающиеся в автореферате:

1. В тексте автореферата часто используются разные аббревиатуры для обозначения одних и тех же металлов-комплексообразователей: Ln, лантаноид и РЗЭ.
2. На странице 2 автореферата для оппонентов название учреждения дано в сокращенном варианте (ФГБОУ ВО), а для ведущей организации – без сокращения.

В заключение, следует отметить, что по актуальности темы, новизне, научной значимости и достоверности полученных результатов, их важности для практики, обоснованности сделанных выводов, высокой степени апробации результатов диссертационная работа «Физико-химические свойства и строение комплексных соединений гепарина с ионами редкоземельных элементов» отвечает всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а её автор – Скобин Михаил Игоревич заслуживает присвоения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Заведующий кафедрой общей и физической химии Ярославского государственного технического университета,
доктор химических наук по специальности
02.00.03 – Органическая химия, профессор

Абрамов
Игорь Геннадьевич

Телефон: +7 (4852) 44–65–25
Адрес электронной почты: abramovig@ystu.ru

« 26 » января 2024 г

Наименование организации:
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Ярославский государственный технический университет»
(ФГБОУ ВО «ЯГТУ»)

Почтовый адрес:
150023, г. Ярославль,
Московский проспект, 88.

Подпись Абрамова И.Г. заверяю:

Начальник УП ЯГТУ

Андрейчева М.А.