

О Т З Ы В

на автореферат диссертации Заполоцкого Евгения Николаевича «Изучение молекулярного строения, парамагнитных свойств, молекулярной динамики комплексов лантаноидов с полидентатными O, N, S-донорными лигандами по данным ЯМР в растворе», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия.

Комплексы лантанидов с хелатными лигандами в последнее десятилетие вызывают широкий интерес в связи с их применением в качестве релаксационных реагентов для магниторезонансной томографии (МРТ). При этом диагностический потенциал подобных соединений непрерывно расширяется благодаря изучению их специфических «спектроскопических» свойств, связанных с наличием существенного парамагнитного химического сдвига и уширения сигналов. Химические сдвиги сигналов парамагнитных лантанидных комплексов меняются в зависимости от свойств среды, в которой соединение находится, например, температуры, наличия неорганических солей, полимеров, а также реологических свойств. Количественное описание всех этих особенностей с помощью метода ЯМР является достаточно сложной задачей, требующей фундаментального подхода.

В диссертации Заполоцкого Е.Н. анализируются водорастворимые хелатные комплексы лантаноидов с лигандами ЭДТА и ДОТА. Основной упор в работе был сделан на изучении молекулярной динамики данных соединений, причем было обнаружено и описано два различных типа динамики. Первый из них связан с внутримолекулярными движениями, происходящими в комплексах лантанидов с ЭДТА и ДОТА. Второй тип динамики связан с межмолекулярными процессами обмена лигандами в комплексах иттербия с ЭДТА, причем автор экспериментально обнаружил и описал некоторые кинетические закономерности лигандного обмена в зависимости от pH раствора. Несмотря на то, что комплексные соединения лантаноидов с лигандами типа ЭДТА хорошо известны, обнаружены их новые свойства, обусловленные разнообразием происходящих с ними динамических процессов, таких как обмен лигандами, водный обмен, внутримолекулярные перегруппировки. Значительная часть этих процессов мало изучена, поэтому представленная работа является актуальной, а выбранное направление исследований – вполне перспективным. Следует отметить, что в представленной работе анализ спектров ЯМР водорастворимых соединений лантаноидов был успешно проведен с помощью подхода, ранее используемого для исследования комплексов лантаноидов в неполярных средах.

Представляют интерес также результаты работы, представленные в четвертой главе диссертации. Парамагнитные химические сдвиги могут содержать существенную структурную информацию, однако до сегодняшнего времени большинство исследований подобного рода использовали различные допущения и упрощения, снижающие достоверность и информативность результатов анализа

парамагнитных химических сдвигов. Автор, используя точное аналитическое выражение для разложения псевдоконтактного сдвига, провел оптимизационную процедуру для нахождения компонент тензора магнитной восприимчивости и получил расчетный спектр, практический совпадающий с экспериментальным для нескольких лантанидных комплексов. Тем самым, было доказано подобие структур в растворе и кристаллической фазе. Расчетный метод, применяемый в настоящей работе, представляется вполне корректным. В качестве пожелания хотелось бы дальнейшей проверки данного структурного метода на других классах соединений лантанидов.

Оценивая объем проделанной научно-исследовательской работы, представленной в автореферате, а также качество и количество публикаций в реферируемых журналах, можно заключить, что диссертация соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Заполоцкий Е.Н., заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «физическая химия».

Кандидат химических наук,
научный сотрудник Лаборатории магнитной радиоспектроскопии
ФГБУН Института органической химии имени Н.Н. Ворожцова
Сибирского отделения РАН

Чуйков Игорь Петрович

15.11.2016

630090, г. Новосибирск,
Просп. Академика Лаврентьева 9
Тел. +7 (383) 330 8251
e-Mail: chip@nioch.nsc.ru

Подпись Чуйкова И.П. заверяю
Ученый секретарь Института
органической химии имени Н.Н. Ворожцова
Сибирского отделения РАН
кандидат химических наук



Бредихин Р.А.