

ОТЗЫВ

**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 учёной степени кандидата химических наук по
специальности
02.00.04 – физическая химия**

Работа автора реферата посвящена актуальному направлению физической химии и химической кинетики – развитию экспериментальных и теоретических методов динамической ЯМР спектроскопии. В литературе по экспериментальной ЯМР спектроскопии до сих пор плохо изучены реакции и внутримолекулярная динамика с участием комплексов лантаноидов в водных растворах, притом что эта проблема детально разработана для органических растворов. Между тем, именно применение парамагнитных комплексов лантаноидов имеет перспективу применений в магниторезонансной томографии, а также в качестве меток-люминофоров в медицине и биологии. Итак, постановка задач представляет несомненный фундаментальный и практический интерес.

Автореферат достаточно подробно освещает проведенные исследования.

В первых двух главах сделан литературный обзор и описана методика исследований

Глава 3, согласно автореферату, изложены основные результаты ЯМР-исследования комплексов лантаноидов с лигандами в водных растворах. Помимо обширного анализа спектральных экспериментов для различных значений водородного показателя рD среды, автор приводит кинетическую модель обратимого лигандного обмена комплексов лантаноидов и делает оценку параметров этой модели

В главе 4 описано теоретическое исследование комплексов лантаноидов на основе структурной математической модели, ранее применявшейся для комплексов иттрия в кристаллической фазе. Впервые для лантаноидов рассмотренного типа была реализована оптимизация параметров модели. По найденным параметрам теоретически рассчитаны лантанид-индуцированные химические сдвиги, которые хорошо соответствуют экспериментальным значениям и это свидетельствует об адекватности модели.

К недостатку автореферата можно отнести отсутствие объяснения многочисленных специальных обозначений и недостаточное описание проведённых расчётов. Непонятно, как связаны параметры основной кинетической схемы рис.7 с содержимым таб.1, которая по смыслу их описывает. Нет и естественного сравнения экспериментальных данных с результатом применения этой кинетической модели, что могло бы послужить дополнительным критерием контроля её адекватности. Но это не снижает качества выполненной работы, а доработку возможно сделать в будущем. Итак, работа Заполоцкого Е.Н. представляет собой исследование, которое вносит существенный вклад в приложения динамического ЯМР.

Все изложенное позволяет заключить, что диссертационная работа Заполоцкого Е.Н. соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а сам он является, как следует из автореферата, активным научным работником и заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04

Дубовицкий Владимир Абрамович

Кандидат физ.-мат. наук, зав. лаборатории

Институт проблем химической физики РАН, Теоретический отдел,
лаб. Математической Физики

1412432, Московская обл., Ногинский р-н, г. Черноголовка, Институтский просп.,
д. 4, кв. 63

Моб. +79150512144

dubv@icp.ac.ru

22 ноября 2016 г.

Дубовицкий В.А.

Подпись Дубовицкого В.А. заверяю

Ученый секретарь ИПХФ РАН
Доктор химических наук



Психа Б.Л.