

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы **Гафаровой Альбины Разитовны** «Конформации солей глюконовой кислоты в условиях гамма-облучения и механохимической обработки по данным ЭПР и квантовой химии», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества»

Работа Гафаровой А.Р. посвящена изучению структуры механоактивированного глюконата кальция и гамма-облученных глюконатов кальция и натрия экспериментальными методами ЭПР и теоретическими методами квантовой химии. Данная тематика тесно связана как с фармацевтикой и медициной в связи с разработкой механоактивированной модифицированной нанодисперсной аморфной формы глюконата кальция с повышенной биодоступностью, так и перспективностью использования данного вещества в качестве ЭПР дозиметров и маркеров облучения и для радиационной стерилизации лекарств. Понимание структурных преобразований и конформационного состава глюконата кальция (натрия) при гамма-облучении и механоактивации позволяет получить информацию о механизме взаимодействий и возможностях управления свойствами.

В работе автором была предложена и обоснована возможность использования метода ЭПР для определения конформаций солей глюконовой кислоты в сочетании с использованием метода DFT для расчета параметров спектра ЭПР. Для квантовохимических расчетов геометрии молекул был выбран уровень теории B3LYP/TZVP, для расчета параметров спектра ЭПР (компоненты тензора сверхтонкого взаимодействия и компонент тензора g-фактора) использовались специальные базисы EPR-II, EPR-III, IGLO. Данная методика позволила определить молекулярные структуры гамма-облученных солей глюконовой кислоты: комбинация из стабильных углерод-центрированных радикалов, локализованных на атомах C2, C3, C4 и C5. Была установлена структура молекул в механоактивированном аморфном глюконате кальция: фрагмент аниона глюконовой кислоты C3-C5 переходит в изогнутую конформацию при сохранении остальной пространственной геометрии.

К наиболее значимым результатам работы с элементами новизны, можно отнести разработанную методику определения параметров конформаций солей глюконовой кислоты, в которой объединены как экспериментальные методы радиоспектроскопии (ЭПР), так и теоретические методы вычислительной химии, а также предложена модель структуры молекулы механоактивированного глюконата кальция. Заслуживают внимания полученные данные о конформациях гамма-облученного глюконата кальция (натрия) и зависимости формы их спектра ЭПР от дозы облучения, что делает данные соединения перспективными для использования их в качестве маркеров облучения.

Работа прошла апробацию на российских и международных конференциях. Достоверность полученных результатов подтверждается

публикацией результатов в 4 статьях в журналах, входящих в «Перечень журналов ВАК». Автореферат диссертационной работы написан хорошо и последовательно, в объеме достаточном для понимания выполненных исследований и полученных результатов. Однако из представленной информации в автореферате не понятно каким именно базисом были проведены расчеты компонент тензора сверхтонкого взаимодействия А и компонент g-тензора (табл. 3 и 4) (в тексте перечислены три базиса) и почему был выбран именно этот базис.

Диссертационная работа Гафаровой А.Р. «Конформации солей глюконовой кислоты в условиях гамма-облучения и механохимической обработки по данным ЭПР и квантовой химии» отвечает критериям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор, Гафарова Альбина Разитовна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Сав

/Савостина Людмила Ивановна

17.01.2025 г.

Кандидат физико-математических наук, 01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Доцент кафедры физики молекулярных систем Института физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет".
420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д.18.

liudmila.savostina@kpfu.ru

+7(843) 231-51-89

Согласна на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

