

ОТЗЫВ

научного руководителя, кандидата физико-математических наук
Сагитовой Елены Александровны на диссертационную работу

Кузнецова Сергея Михайловича

«Исследование деградации поливинилхлорида методом
спектроскопии комбинационного рассеяния света»,
представленную на соискание учёной степени кандидата
физико-математических наук по специальности
01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Кузнецов С.М. обучался в очной аспирантуре ИОФ РАН в период с 01.09.2017 по 31.08.2021. После окончания аспирантуры он продолжил работать в ИОФ РАН в должности младшего научного сотрудника.

Его диссертационная работа посвящена актуальнейшей на сегодняшний день проблеме: количественному анализу структуры органических соединений методом спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) света, а исследованные вещества (поливинилхлорид и алканы) имеют важное значение для различных областей промышленности (для авиастроения, производства изделий медицинского назначения, нефтехимии, сельского хозяйства, строительства).

Основными результатами работы Кузнецова С.М. являются определение закономерностей, связывающих характеристики полос КР и характеристики структуры, а также получение новой информации о структуре исследуемых соединений методом спектроскопии КР. Была получена информация о длинах полиенов, образовавшихся в образцах поливинилхлорида при фото- и термодеградаци, изучено влияние концевых групп и типа изомера молекулы на спектр КР полиенов. Для разветвлённых алканов 5-метилундекана и 7-метилпентадекана зарегистрирован и впервые объяснён эффект расщепления полосы, соответствующей валентным колебаниям одинарных углерод-углеродных связей, и получены данные о конформационном составе этих соединений.

Во время подготовки диссертации Кузнецов С.М. проделал большой объём работы. Он провёл анализ литературы по теме исследований, освоил экспериментальные методы спектроскопии КР света, зарегистрировал, обработал и проанализировал большое количество спектров КР. Также Кузнецов С.М. в своей работе активно использовал методы квантово-химического моделирования структур и колебательных спектров изучаемых веществ, которые позволили установить качественные закономерности, связывающие спектры КР и структуру исследованных веществ, и обеспечили высокую достоверность результатов.

Важно отметить, что поливинилхлорид, подвергнутый фото- или термодеградаци, является непростым объектом для экспериментальных исследований, так как приготовление образцов деградированного поливинилхлорида с заранее известным содержанием и распределением

полиенов по длинам невозможно. Это обстоятельство делает квантово-химические расчёты важной частью диссертационного исследования.

Кузнецов С.М. разработал комбинированный подход, включающий экспериментальные исследования и квантово-химические расчёты спектров КР поливинилхлорида и разветвлённых алканов. В частности, Кузнецов С.М. предложил оригинальный способ моделирования цепи атактического поливинилхлорида со случайным расположением атомов хлора относительно основной углеродной цепи. Предварительно было выполнено детальное исследование по подбору функционала и набора базисных функций, т.е. главных параметров, определяющих точность квантово-химических расчётов.

В процессе работы Кузнецов С.М. проявил себя как инициативный, ответственный и работоспособный исследователь, умеющий планировать и выполнять поставленные задачи.

Представленная диссертационная работа является законченным научным исследованием. Полученные Кузнецовым С.М. результаты имеют важное фундаментальное и прикладное значение, опубликованы в высокорейтинговых научных журналах, многократно докладывались на российских и международных конференциях. Во время подготовки диссертации работа Кузнецова С.М. была поддержана РФФИ, проект Аспиранты № 19-32-90209. Результаты диссертационной работы будут использоваться как в ИОФ РАН, так и в других научных организациях.

Высокий уровень результатов, представленных в диссертационной работе Кузнецова С.М., показывает, что он является квалифицированным научным работником, который может самостоятельно вести исследовательскую работу. Считаю, что он заслуживает присвоения степени кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель,
старший научный сотрудник
лаборатории гиперкомбинационных рассеяний
отдела ВКИВ ИОФ РАН,
кандидат физ.-мат. Наук

 / Сагитова Е.А.

Подпись с.н.с. Сагитовой Е.А. заверяю,
заместитель директора по научной работе,
доктор физ.-мат. наук



 / Глушков В.В.
2022