

## ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора физико-математических наук Паращука Дмитрия Юрьевича на диссертационную работу Кузнецова Сергея Михайловича «Исследование деградации поливинилхлорида методом спектроскопии комбинационного рассеяния света», представленную к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Кузнецова С.М. посвящена развитию методов анализа связей между спектрами комбинационного рассеяния (КР) света и молекулярной структурой образцов алканов и поливинилхлорида (ПВХ), подверженного термо или фотодеградации. Эти соединения широко применяются в практической деятельности человека. Деградация ПВХ при повышенных температурах и в результате облучения ультрафиолетовым (УФ) излучением приводит к образованию в структуре молекул полиеновых последовательностей различной длины, которые могут заметно влиять на свойства ПВХ. В связи с этим, актуальным выступает анализ степени деградации материалов на основе ПВХ. Алканы играют большую роль в нефтехимической промышленности и сельском хозяйстве. Разветвлённые алканы, исследованные в данной работе, ранее не изучались методом спектроскопии КР, и их исследование может быть полезно для разработки новых методов синтеза высококачественных морозостойких машинных масел.

Диссертационная работа состоит из 206 страниц и содержит введение, три главы, заключение, список литературы и приложение. Работа написана логически последовательно, грамотно, тщательно вычитана и почти идеально оформлена. Иллюстративного материала в целом достаточно для обоснования и понимания полученных результатов.

**Введение** содержит все необходимые разделы, необходимые для диссертационных работ.

В **Главе 1** приведён обзор литературы, опубликованной по теме исследования, описаны известные структурные и спектральные особенности алканов и ПВХ. Представлен обзор методов оценки полиенов по спектрам деградированного ПВХ.

В **Главе 2** содержится описание экспериментальных и теоретических методик исследования нормальных и разветвлённых алканов, проведённых автором. В этой главе обсуждаются результаты подбора начальных параметров расчётов структур и спектров КР нормальных алканов на основе теории функционала плотности, здесь подобрана комбинация функционала и



базиса, расчёты с которой дают результаты, которые наилучшим образом соответствуют экспериментальным и литературным данным. Эта комбинация использовалась затем во всей диссертационной работе.

**Глава 3** посвящена исследованиям изменений в структуре и спектрах КР ПВХ, происходящих при нагреве образцов до различных температур и при облучении их УФ излучением. Показано, что по форме этих спектральных полос с использованием различных эмпирических и аналитических формул в принципе можно оценить длины сформировавшихся полиенов. Помимо к экспериментальных исследований проведено квантово-химическое моделирование спектров КР различных структур, содержащих полиеновые последовательности, с целью объяснения поведения характеристических полос спектров КР от длины полиенов, типа изомера и наличия различных боковых и концевых групп.

В **Заключении** приведены основные результаты диссертационной работы.

**Приложение** содержит в себе большое количество таблиц с рассчитанными структурными и спектральными данными молекул исследованных веществ.

Представляется, что полученные основные результаты обладают существенной новизной. Достоверность и обоснованность защищаемых положений и основных результатов основывается на применении общепринятых физических и математических методов и на соответствии с литературными данными. Достоверность представленных в работе экспериментальных результатов обеспечена применением адекватного оборудования, а также подтверждается публикациями в высокорейтинговых изданиях, входящих в перечень ВАК и международные базы данных, а также апробацией на всероссийских и международных конференциях.

К представленной работе Кузнецова С.М. имеются следующие замечания:

1. Название работы не вполне точно отражает содержание работы. Так, примерно половина объема диссертации, отражающего полученные результаты, выполнена для алканов.
2. Выбор базиса  $4z$  для расчетной части работы по полиенам представляется не вполне обоснованным. Его описание было бы уместно привести в работе. Также, было бы полезно провести расчеты с современными расширенными базисами, например  $6-311^{++}G^{**}$  или его аналогами.
3. Неясно насколько полученные результаты применимы для ПВХ различных производителей. Исследование на образцах разных производителей повысило бы значимость результатов работы.



4. Стоило бы привести сравнение частот КР наиболее длинных полиенов и полиацетиленов, например, известны данные для наночастиц полиацетилена размером около 10 нм, см., например, Письма в ЖЭТФ, т.64, с.613, (1996). Кроме того, расчеты не учитывали эффект локального окружения (расчеты приведены в вакууме), в котором находятся предполагаемые полиеновые цепи в ПВХ, что может менять значения колебательных частот сопряженных связей.
5. В целом у оппонента нет уверенности, что изучаемые продукты деградации описываются предложенным набором полиеновых последовательностей. Так, например, хорошо известно, что полиены легко окисляются, что может приводить к огромному разнообразию продуктов деградации, содержащим, в частности, кислород.
6. С.25, не раскрыта аббревиатура LAM.
7. С.78, «Гауссова типа» - первое слово следует писать со строчной буквы.

Указанные замечания не снижают научную ценность работы и существенно не влияют на высокую положительную оценку работы. Представленная диссертационная работа является законченным научным исследованием по важной тематике и обладает практической ценностью. Основные её результаты были представлены в 16 докладах на всероссийских и международных конференциях, опубликованы в 5 статьях в рецензируемых научных журналах. Автореферат соответствует тексту диссертации и в полной мере отражает её содержание и структуру.

Материалы диссертации соответствуют п.1 «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твёрдом, так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления» Паспорта специальности ВАК РФ 01.04.07 Физика конденсированного состояния.

Таким образом, на основании вышеизложенного можно заключить, что диссертация Кузнецова Сергея Михайловича на тему «Исследование деградации поливинилхлорида методом спектроскопии комбинационного рассеяния света» полностью отвечает критериям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук в соответствии с п.9 и п.13 Положения, утвержденного Правительством РФ «О присуждении учёных степеней» от 24.09.2013 г. № 842, а её автор Кузнецов Сергей Михайлович заслуживает присуждения



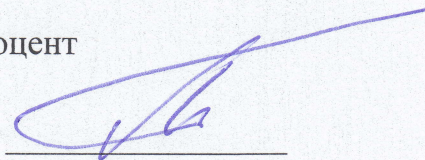
учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

**Официальный оппонент:**

Профессор физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова,

доктор физико-математических наук, доцент

Паращук Дмитрий Юрьевич



E-mail: paras@physics.msu.ru

Телефон: +7 (495) 939-22-28

Адрес: 119991, г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
физический факультет

Декан физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, профессор

Сысоев Николай Николаевич



«9» сентября 2022 г.