

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Василия Сергеевича Новикова  
«СПЕКТРОСКОПИЯ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА  
КАРОТИНОИДОВ И ГЛИКОЛЕЙ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И  
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по  
специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Предметом исследований в диссертационной работе послужили молекулы гликолей и каротиноидов. Органические соединения этого типа выполняют важную роль в обеспечении жизнедеятельности человека, что обуславливает практическую значимость данного исследования. Кроме этого с фундаментальной научной точки зрения представляется интересным установление взаимосвязи между структурой и колебательными спектрами таких молекул. Автореферат содержит формулировку основной цели работы и конкретных задач, направленных на ее достижение, а также достаточное обоснование их актуальности. Также в автореферате приводится обоснование выбора подходов и методик для проведения исследований. В частности, выбор спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) в качестве основного экспериментального метода исследования обусловлен тем, что набор, положение и интенсивности линий в спектрах КРС изучаемых молекул сильно зависят от их химического состава, конформации и других особенностей. Дополнение экспериментальных КРС исследований квантово-химическими расчетами позволяет эффективным образом провести анализ колебательных спектров веществ. В работе проведен тщательный подбор параметров для расчета структуры и спектров КР на примере хорошо исследованного соединения – нормального пентана.

В результате проведенных исследований получены сравнительные данные о спектрах КРС молекул этиленгликоля, 1,2- и 1,3-пропиленгликоля во всех стабильных конформациях. Выявлены линии КРС, отражающие различия в трех типах молекул исследованных гликолей, а также их конформационных состояний. Показано, что для жидких полиэтиленгликолей наиболее выгодной является конформация спирали  $7_2$ , которая ранее методом рентгеноструктурного анализа была определена как конформация, характерная для кристаллической фазы твердых полиэтиленгликолей. В случае каротиноидов установлены качественные зависимости между положениями и интенсивностями линий, соответствующих валентным колебаниям C-C и C=C связей, и структурой молекулы. Эти линии являются наиболее интенсивными в спектрах КРС каротиноидов и резонансно усиливаются при использовании для возбуждения излучения сине-зеленого диапазона. Последнее позволяет, потенциально, использовать выявленные в работе закономерности для разработки высокочувствительных методов анализа содержания и состава каротиноидов в материалах биологического происхождения (сельскохозяйственной продукции, биотканях, биодобавках и т.п.).

В целом представленная в автореферате работа является законченным научным исследованием, выполненным с привлечением современных методов и подходов. Актуальность работы, выбор объектов и методов исследования, научная новизна, достоверность и практическая значимость не вызывают сомнений. Основные результаты работы опубликованы в высокорейтинговых журналах и представлены на российских и международных конференциях. Тематика, число публикаций и докладов соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

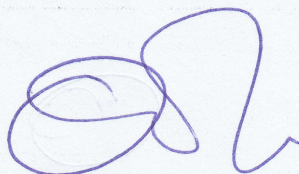
Среди недостатков работы можно отметить то обстоятельство, что для каротиноидов автор исследовал экспериментально только спектры КРС *транс*-изомера бета-каротина, а для *цис*-изомеров бета-каротина и других каротиноидов экспериментальные данные для сравнения с результатами расчетов методом функционала плотности были взяты из литературы. В автореферате также указано, что методы КРС спектроскопии могут быть использованы для анализа каротиноидов в биотканях, лекарственных и косметических

препаратах, но примеры такого анализа с применением разработанных подходов не приведены. При исследовании полиэтиленгликолей автор ограничился рассмотрением только двух стереорегулярных конформаций, однако для жидких полиэтиленгликолей следовало бы исследовать также и возможность нахождения молекул в нестереорегулярных конформациях.

Вышеуказанные недостатки не влияют на в целом высокую оценку диссертационной работы. Представленная в автореферате работа В.С. Новикова удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук,  
Профессор кафедры физики полимеров и кристаллов,  
Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

«05» сентября 2022 г.



А.Н. Образцов

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»  
Адрес: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, физический факультет  
Тел.: +7 (495) 939-4126  
E-mail: obraz@polly.phys.msu.ru

Подпись д.ф.-м.н. Образцова Александра Николаевича удостоверяю  
Ученый секретарь Ученого совета  
физического факультета  
МГУ имени М.В. Ломоносова,

д. ф.-м. н., профессор



В.А. Караваев