

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Новикова Василия Сергеевича «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 твердого тела.

Диссертационная работа Новикова Василия Сергеевича посвящена исследованию структуры и спектров комбинационного рассеяния (КР) света каротиноидов и гликолей. Актуальность выбранной темы диссертации обусловлена прежде всего тем, что для сложных органических молекул вообще довольно трудно предсказать колебательные спектры, особенно в области деформационных колебаний, которые сильно зависят как от конформации молекул, так и от межмолекулярных взаимодействий. Установление соответствующих закономерностей в КР спектрах имеет самостоятельное фундаментальное значение. Вместе с тем исследование каротиноидов и гликолей важно для практических задач промышленности, прежде всего, фармацевтической и др.

Большим достоинством работы является изучение большого количества соединений (прежде всего, гликолей) с разной длиной цепи и различными модификациями. Это позволило установить соответствующие закономерности в КР спектрах таких соединений. Достоинством работы также является широкое использование современных методов квантово-химических расчетов для анализа наблюдаемых закономерностей. Автором получен целый ряд новых результатов, таких, как зависимость конформационного состава раствора гликолей от концентрации, зависимость спектров каротиноидов от структуры концевых и боковых групп и т.п.

Достоверность, актуальность и практическая значимость результатов данной работы подтверждена 7 опубликованными по теме диссертации статьями в рецензируемых и входящих в перечень ВАК РФ научных журналах, а также 18 докладами на конференциях. Материал публикаций отражает содержание автореферата.

К автореферату имеется несколько замечаний.

1) В тексте автореферата не указано, какими именно методами проводились квантово-химические расчеты для конкретных молекул, упоминается лишь, что расчеты проводились «различными методами, включая метод функционала плотности». Использованная программа

«Природа» помимо метода функционала плотности содержит еще несколько встроенных методов (ММ2, ММ3 и т.п.), а достоверность расчетов, особенно для сложных молекул, сильно зависит от выбранного метода.

2) В тексте автореферата вообще не упоминается какие именно экспериментальные установки и приборы (и с какими характеристиками) использовались в работе. Традиционно, такие сведения обычно приводятся в авторефератах диссертаций.

Однако, высказанные замечания имеют рекомендательный характер и не ставят под сомнение высокую научную ценность представленной работы, актуальность и достоверность полученных в ней результатов. Таким образом, диссертация «Спектроскопия комбинационного рассеяния света каротиноидов и гликолей: экспериментальное исследование и численное моделирование» является законченной научно-квалификационной работой и полностью отвечает требованиям «Положения о порядке присуждения учёных степеней», а её автор Новикова Василия Сергеевича заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности: 01.04.07 -Физика твердого тела.

Заведующий кафедрой физики

МГТУ «Станкин»

доктор физ.-мат. наук

Ошурко Вадим Борисович

Адрес: 27055, Москва, Вадковский пер., д.3а

Телефон: (499) 973-39-62

e-mail: vbo08@yandex.ru



Подпись руки Ошурко В.Б. удостоверяю
УД ФГБОУ ВО «МГТУ «СТАНКИН»
Начальник отдела
Кабинета
Фудимов М.И.