

## ОТЗЫВ

научного консультанта о диссертационной работе

Новикова Василия Сергеевича

«Спектроскопия комбинационного рассеяния света каротиноидов и гликолей:

экспериментальное исследование и численное моделирование»,

представленной на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Новикова Василия Сергеевича представляет собой комбинированное экспериментальное и теоретическое исследование, в котором удачно сочетаются методы лазерной спектроскопии и квантово-химическое моделирование. Это является важным преимуществом диссертационной работы, поскольку позволяет проводить детальный анализ спектров комбинационного рассеяния света больших и сложных молекулярных систем, включая структурно нежёсткие молекулы, в том числе полимеры, а также жидкостей и растворов, в которых имеются сильные межмолекулярные взаимодействия – водородные связи. Такой подход позволяет выделить вклады в спектр, которые вносят отдельные формы изучаемых молекул, например, конформации или *цис/транс*-изомеры, а также предсказать, как изменится вид спектра в случае превращения одной формы в другую.

Актуальность темы диссертационной работы определяется промышленным и биологическим значением исследованных в ней соединений. Среди объектов исследования водные растворы и органические жидкости, жидкие и кристаллические полимеры, ряд каротиноидов и их модифицированные структуры. Несмотря на всё их разнообразие, в рамках диссертационной работы В.С. Новикова все эти объекты связаны единой целью – установить, 1) каким образом особенности структуры сложных и обычно больших молекулярных систем проявляются в их спектрах комбинационного рассеяния и 2) каким образом спектроскопия комбинационного рассеяния света может быть использована для определения особенностей структуры, включая конформационный, изомерный состав, наличие и количество сопряжённых двойных связей углерод-углерод, наличие межмолекулярных водородных связей и вызываемых ими изменений структуры молекул. Всё это позволяет сказать, что работа представляет собой единое фундаментальное исследование.

Разнообразие используемых методов и изучаемых объектов потребовало от автора диссертационной работы приобретения большого числа навыков, включая 1) регистрацию спектров комбинационного рассеяния света образцов в различных агрегатных состояниях и с разными физико-химическими характеристиками, 2) владения современными методами квантовой химии и молекулярного моделирования, 3) освоение методов обработки экспериментальных спектров и 4) одновременно с этим, моделирование спектров тех же веществ на основании результатов квантово-химических расчётов с целью их сравнения с экспериментальными спектрами. Использование всех этих современных методов и подходов свидетельствует о том, что работа выполнена на высоком научном уровне, что также подтверждается публикациями в высокорейтинговых международных научных журналах.

В работе получен ряд важных новых научных результатов. Показано, что по спектру комбинационного рассеяния гликолей можно определять конформационный состав молекул гликолей. В водных растворах гликолей с различным содержанием растворённого вещества этот состав не меняется по сравнению с чистым жидким гликолем, что позволяет также судить о концентрации раствора по его спектру. Показано, что образование межмолекулярных водородных связей приводит к значительным изменениям спектра гликоля по сравнению с тем, который можно наблюдать в условиях, когда таких связей нет. Для большого числа полиэтиленгликолей с различными молекулярными массами, как жидких, так и кристаллических, показано, что молекулы полимера находятся преимущественно в конформации спирали  $7_2$ . Установлено, что в молекулах, содержащих сопряжённые двойные связи, о длине цепи сопряжения можно судить по положению полосы валентных колебаний C=C связей. Кроме того, если в такой цепи происходит *цис-транс*-изомеризация, например, под действием света в каротиноидах, то место изомеризации в полиеновой цепи также можно определить по наблюдаемым изменениям в спектре комбинационного рассеяния. Таким образом, спектроскопия комбинационного рассеяния света является высокоинформативным методом изучения структуры всех перечисленных соединений.

Текст диссертации написан ясно, основные идеи, методы, подходы изложены чётко. Диссертация содержит достаточно подробное описание всех экспериментов и квантово-химических расчётов для того, чтобы можно было судить о справедливости сделанных в работе выводов. Список литературы обширен, охватывает широкий круг научных журналов и включает научную литературу до 2021 года включительно. Количество собственных публикаций по теме работы значительно превышает требуемое для защиты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук. Работа многократно представлялась на международных и российских научных конференциях. Таким образом, уровень представления результатов проведённого научного исследования в статьях, докладах конференций и тексте диссертации является очень высоким.

Всё перечисленное выше позволяет сделать вывод о том, что диссертационная работа В.С. Новикова «Спектроскопия комбинационного рассеяния света каротиноидов и гликолей: экспериментальное исследование и численное моделирование» полностью удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ, а диссертант заслуживает присвоения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Научный консультант,  
старший научный сотрудник  
химического факультета МГУ имени  
М.В.Ломоносова,  
доктор химических наук



Л.Ю. Устынюк



24 мая 2022 г.