

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д002.063.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА
«ИНСТИТУТА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ ИМ. А.М. ПРОХОРОВА РОССИЙСКОЙ
АКАДЕМИИ НАУК»
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 26 сентября 2022 г. № 176

О присуждении Новикову Василию Сергеевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Спектроскопия комбинационного рассеяния света каротиноидов и гликолей: экспериментальное исследование и численное моделирование», по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния по физико-математическим наукам принята к защите 27 июня 2022 года (протокол заседания № 172) диссертационным советом Д002.063.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Института общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» (119991 Москва, ул. Вавилова, 38, совет создан приказом Рособнадзора № 2048-1308 от 19 октября 2007 г.).

Соискатель Новиков Василий Сергеевич 1992 года рождения. В 2017г. соискатель окончил Физический факультет Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

В 2021 году соискатель окончил аспирантуру Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального

исследовательского центра «Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдано ИОФ РАН в 2022 г.

В настоящее время работает в отделе колебаний института общей физики им. А.М. Прохорова РАН в должности младшего научного сотрудника.

Работа выполнена в Отделе взаимодействия когерентного излучения с веществом Лаборатории гиперкомбинационных рассеяний Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Института общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук».

Научный руководитель – Николаева Гульнара Юрьевна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, лаборатория гиперкомбинационных рассеяний, Отдел взаимодействия когерентного излучения с веществом, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук»;

Научный консультант – Устынюк Лейла Юрьевна, доктор химических наук, старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории молекулярной спектроскопии кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Официальные оппоненты:

Попов Владимир Карпович, доктор физико-математических наук, профессор заведующий лабораторией сверхкритических флюидных технологий Федерального государственного учреждения «Федерального научно-исследовательского центра «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук, Института фотонных технологий РАН,

Гончуков Сергей Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор Отделения лазерных и плазменных технологий офиса

образовательных программ Института лазерных и плазменных технологий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ»

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский педагогический государственный университет» в своем положительном заключении, подписанном Наумовым Андреем Витальевичем, доктором физико-математических наук, членом-корреспондентом РАН, заведующим кафедрой теоретической физики им. Э.В. Шпольского, руководителем лаборатории физики перспективных материалов и наноструктур и Васильевой Ириной Александровной, доктором физико-математических наук, профессором кафедры общей и экспериментальной физики, и утвержденном Первым проректором Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского педагогического государственного университета», Академиком РАО, доктором географических наук, профессором Дроновым Виктором Павловичем, указала, что диссертация Новикова Василия Сергеевича «Спектроскопия комбинационного рассеяния света каротиноидов и гликолей: экспериментальное исследование и численное моделирование», являясь законченным научным исследованием, полностью удовлетворяет требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Новиков Василий Сергеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

В отзыве указаны четыре замечания:

1. Для физико-математической диссертации описание экспериментальной части выглядит достаточно скудным, приводится описание используемого

оборудования: КР-спектрометров, лазеров и т.д., однако ожидаемые схемы экспериментов отсутствуют. Без них описание постановки эксперимента в том или ином случае становится неочевидным. К примеру, непонятно, фокусировалось ли лазерное излучение на образце или нет (в работе упоминается, что использовались длиннофокусные и короткофокусные объективы, без пояснения); возникала ли фотолюминесценция, смешивающаяся с сигналом КР и если была, каким образом она фильтровалась и т.п.

2. В тексте неоднократно говорилось о соответствии рассчитанных теоретически и экспериментальных спектров. Расхождение в положении полос одного и того же колебания указано. К сожалению, анализ расхождения величины интенсивности соответствующих полос экспериментального и теоретического спектров в работе отсутствует. А ведь без этого анализа утверждать о совпадении рассчитанного и экспериментального спектров невозможно. Кроме того, на рисунках 11, 12, 13 не указано какой из спектров является экспериментальным, как это сделано в рисунках 14, 15 и 16.
3. В работе приводятся следующие термины: предрезонансный, резонансный и нерезонансный (режим возбуждения спектров КР). Хотелось бы иметь более подробное описание техники предрезонансного КР.
4. В работе были использованы квантово-химические расчёты структуры и спектров КР использующие различные функционалы (РВЕ, ШРВЕ, РВЕО, ОБУР и др.). Описания выбранных функционалов не приводятся (только ссылки на литературные источники), чем обусловлен выбор таких функционалов, что их объединяет, и чем они отличаются, без обращения к источникам понять сложно.

Соискатель имеет 7 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 7 работ, из них в рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК опубликовано 6 работ.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

1. Kuznetsov S.M., **Novikov V.S.**, Sagitova E.A., Ustynyuk L.Y., Glikin A.A., Prokhorov K.A., Nikolaeva G.Y., Pashinin P.P. Raman spectra of n - pentane, n -hexane, and n -octadecane: experimental and density functional theory (DFT) study. // *Laser Phys.*, – 2019. – V. 29, N. 8. – P. 085701.
2. Kuzmin V.V., **Novikov V.S.**, Ustynyuk L.Y., Prokhorov K.A., Sagitova E.A., Nikolaeva G.Y. Raman spectra of polyethylene glycols: Comparative experimental and DFT study. // *J. Mol. Struct.* – 2020. – V. 1217, N. 2016. – P. 128331.
3. **Novikov V.S.**, Kuzmin V.V., Kuznetsov S.M., Darvin M.E., Lademann J., Sagitova E.A., Ustynyuk L.Y., Prokhorov K.A., Nikolaeva G.Y. DFT study of Raman spectra of polyenes and β -carotene: Dependence on length of polyene chain and isomer type. // *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.*, – 2021. – V. 255. – P. 119668.
4. Kuzmin V.V., **Novikov V.S.**, Sagitova E.A., Ustynyuk L.Y., Prokhorov K.A., Ivchenko P.V., Nikolaeva G.Y. Correlations among the Raman spectra and the conformational compositions of ethylene glycol, 1,2- and 1,3-propylene glycols. // *J. Mol. Struct.*, – 2021. – P. 130847.
5. **Новиков В.С.**, Кузнецов С.М., Кузьмин В.В., Прохоров К.А., Сагитова Е.А., Дарвин М.Е., Ладеманн Ю., Устынюк Л.Ю., Николаева Г.Ю. Анализ природных и синтетических соединений, содержащих полиеновые цепи, методом спектроскопии комбинационного рассеяния. // *Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки.* – 2021. – V. 500, N. 1. – P. 26–33.
6. **Novikov V.S.**, Kuzmin V.V., Darvin M.E., Lademann J., Sagitova E.A., Prokhorov K.A., Ustynyuk L.Y., Nikolaeva G.Y. Relations between the Raman spectra and molecular structure of selected carotenoids: DFT study of α -carotene, β -carotene, γ -carotene and lycopene. // *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.*, – 2022. – V. 270. – P. 120755.

7. **Новиков В. С.**, Николаева Г. Ю., Конформационная изомерия и спектр КР пентана: квантово-химическое моделирование и эксперимент. // Сборник статей XXII Международной молодежной научной школы "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия", – 2018, – С. 103-106

На автореферат диссертации поступило два отзыва:

1. Из Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова», подписала отзыв доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полимеров и кристаллов физического факультета Образцов Александр Николаевич. Отзыв положительный, содержит три замечания: 1) 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; 2) в автореферате также указано, что методы спектроскопии КРС могут быть использованы для анализа каротиноидов в биотканях, лекарственных и косметических препаратах, но примеры такого анализа с применением разработанных подходов не приведены; 3) при исследовании полиэтиленгликолей автор ограничился рассмотрением только двух стереорегулярных конформаций, однако для жидких полиэтиленгликолей следовало бы исследовать и возможность нахождения молекул в нестереорегулярных конформациях.

2. Из Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского государственного технологического университета «СТАНКИН», подписала отзыв заведующий кафедрой физики, доктор физико-математических наук Ошурко Вадим Борисович. Отзыв положительный, содержит два замечания: 1) в автореферате 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) не упоминается какие именно экспериментальные установки и приборы использовались в работе.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что официальные оппоненты и сотрудники ведущей организации широко известны своими достижениями в соответствующей области науки и способны оценить научную и практическую значимость рассматриваемой в диссертации проблемы.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

показано, что анализ линий КР в области частот около 800 см^{-1} позволяет определять конформационный состав этиленгликоля и 1,3-пропиленгликоля; установлено, что конформацию спирали 7_2 молекул полиэтиленгликолей можно отличить от *транс*-конформации этих молекул по наличию линий КР в области частот около 800 см^{-1} ;

показано, что в спектрах КР *цис*-изомеров *бета*-каротина наблюдаются сдвиги и расщепление полос валентных колебаний С-С и С=С связей по сравнению со спектром *транс*-изомера;

установлено, что для *транс*-изомеров каротиноидов положение полосы валентных колебаний С=С связей определяется длиной сопряжения, и частота этой полосы уменьшается с увеличением длины сопряжения;

продемонстрировано, что положение полосы валентных колебаний С-С связей зависит от длины сопряжения и структуры концевых и боковых групп, в случае *транс*-изомеров каротиноидов эта полоса сдвигается в низкочастотную область с ростом длины сопряжения или массы концевых групп и в высокочастотную область при наличии боковых CH_3 групп;

установлено, что интенсивности полос валентных колебаний С-С и С=С связей молекул каротиноидов увеличиваются с ростом длины сопряжения или массы концевых групп, а наличие боковых СН₃ групп в полиеновой цепи приводит к расщеплению и уменьшению интенсивностей этих полос.

Фундаментальная значимость исследования состоит в том, что методом спектроскопии КР показано, что при комнатной температуре молекулы жидких этиленгликоля и 1,3-пропиленгликоля находятся в конформациях, содержащих *gag*-конформеры относительно торсионных углов О-С-С-О и О-С-С-С, соответственно;

установлено, что молекулы жидких полиэтиленгликолей при комнатной температуре находятся в наиболее выгодной по энергии конформации спирали τ_2 , а содержание молекул в *транс*-конформации является незначительным;

определена качественная зависимость спектров КР каротиноидов от структуры боковых и концевых групп.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики состоит в том, что:

результаты исследований этиленгликоля, 1,2- и 1,3-пропиленгликолей могут использоваться при диагностике химического и конформационного состава молекул этих соединений в продуктах химической промышленности, в том числе, в криопротекторах и антифризах;

результаты исследований полиэтиленгликолей могут быть использованы при анализе этих соединений в составе лекарственных форм и косметических средств, так и при разработке новых продуктов, например, пегилированных лекарственных средств;

результаты исследований каротиноидов могут быть использованы при разработке методов определения содержания, химического и изомерного состава каротиноидов в продуктах питания, лекарственных и косметических препаратах, сельскохозяйственной продукции.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что

экспериментальные данные получены с помощью современного оборудования и с использованием современных математических методов обработки данных. Полученные результаты хорошо согласуются с развитыми теоретическими представлениями и проведенными в работе квантово-химическими расчетами. Положения и выводы, сформулированные в диссертационной работе, получили апробацию на всероссийских и международных конференциях, а также опубликованы в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК.

Личный вклад соискателя состоит в регистрации спектров КР, проведении квантово-химических расчётов структуры и спектров КР исследуемых соединений, разработке программы для уширения линий в рассчитанных спектрах КР, анализе и обобщении результатов, подготовке текстов статей и тезисов.

На заседании 26 сентября 2022 г. диссертационный совет принял решение присудить Новикову В.С. ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за «18», против «0», недействительных бюллетеней «0».

Председатель диссертационного совета
член-корреспондент РАН

Ученый секретарь диссертационного совета
канд. физ.-мат. наук



С.В. Гарнов

А.А. Ушаков

27 сентября 2022 г.