

ОТЗЫВ

научного руководителя о работе младшего научного сотрудника Новикова Василия Сергеевича в связи с представлением диссертации по теме «Спектроскопия комбинационного рассеяния света каротиноидов и гликолей: экспериментальное исследование и численное моделирование» к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Новиков Василий Сергеевич обучался в аспирантуре ИОФ РАН в период с 1 сентября 2017 года по 31 августа 2021 года. После окончания аспирантуры продолжил работу в ИОФ РАН в должности младшего научного сотрудника.

За время обучения в аспирантуре ИОФ РАН и работы в ИОФ РАН Новиков В.С. подготовил диссертационную работу на тему «Спектроскопия комбинационного рассеяния света каротиноидов и гликолей: экспериментальное исследование и численное моделирование».

При подготовке диссертационной работы Новиков В.С. проводил экспериментальные исследования спектров комбинационного рассеяния (КР) и расчеты методом функционала плотности структуры и спектров КР. Такой комбинированный подход позволил достоверно интерпретировать экспериментальные спектры КР и значительно расширил возможности спектроскопии КР для количественного анализа структуры гликолей и каротиноидов.

При подготовке диссертационной работы Новиков В.С. проделал большой объем экспериментальной и теоретической работы. Так, при исследовании гликолей Новиков В.С. зарегистрировал спектры КР большого числа образцов - от низкомолекулярных соединений до полимеров, а также экспериментально исследовал спектры КР водных растворов гликолей с различными содержаниями компонентов. Спектры КР *бета*-каротина при возбуждении излучением с различными длинами волн были зарегистрированы при использовании нескольких экспериментальных установок, что позволило реализовать резонансный и нерезонансный режимы возбуждения.

Для трёх гликолей (этиленгликоля и двух изомеров пропиленгликоля) были впервые рассчитаны структуры и спектры КР молекул во всех стабильных конформациях. При моделировании спектров КР каротиноидов Новиков В.С. впервые применил оригинальный подход, а именно исследовал

модифицированные молекулы каротиноидов с замещёнными концевыми и боковыми группами, что позволило однозначно установить влияние концевых и боковых групп на структуру и спектры КР каротиноидов.

При проведении квантово-химического моделирования структуры и спектров КР важным и трудоёмким этапом работы Новикова В.С. был подбор параметров расчётов структуры и спектров КР исследуемых соединений, среди которых наиболее важными являются комбинация функционала и набора базисных функций. Эта задача была решена при исследовании хорошо изученного соединения – пентана. Спектры КР двух значительно различающихся по структуре видов органических соединений: гликолей и каротиноидов, рассчитанные с использованием определенных на примере пентана параметров расчетов, хорошо согласуются с экспериментальными спектрами, и, таким образом, эти параметры могут быть потенциально использованы и для расчётов спектров КР других классов веществ.

Во время подготовки диссертационной работы Новиков В.С. проявил себя как инициативный, самостоятельный, трудолюбивый, дисциплинированный и ответственный сотрудник, способный быстро осваивать новые экспериментальные и теоретические методы, эффективно решать поставленные перед ним задачи, плодотворно работать в команде.

Представленная диссертационная работа является законченным научным исследованием. Полученные Новиковым В.С. результаты имеют важное фундаментальное и прикладное значение, опубликованы в высокорейтинговых научных журналах, многократно докладывались на российских и международных конференциях, в том числе, на семинарах и конференциях ИОФ РАН. Работа Новикова В.С. во время подготовки диссертационной работы была поддержана РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90172 Аспиранты.

Высокий уровень научных результатов, представленных в диссертации, однозначно свидетельствует о том, что Новиков В.С. является квалифицированным научным сотрудником, способным самостоятельно ставить и решать научные задачи.

Научный руководитель,
к.ф.-м.н.

Николаева Гульнара Юрьевна

Подпись Николаевой Г.Ю. заверяю

Учёный секретарь ИОФ РАН,
д.ф.-м.н.



Глушков Владимир Витальевич

06.06.2022