

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Василия Сергеевича Новикова «Спектроскопия комбинационного рассеяния света каротиноидов и гликолов: экспериментальное исследование и численное моделирование», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертация В.С. Новикова посвящена исследованию двух видов органических соединений: каротиноидов и гликолов, которые имеют важнейшее значение для жизнедеятельности человека, медицины, фармацевтики, косметологии, пищевой и химической промышленности.

Актуальность

Актуальность исследования этих веществ не вызывает сомнений, так как потенциал их использования далеко не исчерпан, а взаимосвязь между структурой и состоянием этих молекул и их важными практическими свойствами до сих пор не определена как для чистых веществ, так и для молекул этих веществ в окружении (смесях и растворах, лекарственных препаратах, биотканях, и т.п.). Кроме того, гликоли являются хорошими модельными системами при фундаментальных исследованиях влияния внутримолекулярных и межмолекулярных водородных связей на структуру и свойства различных веществ, в том числе биомолекул.

Комбинация экспериментальной спектроскопии КР и квантово-химических расчетов структуры и спектров КР является удачным выбором в качестве метода исследования, так как обеспечивает эффективный структурный анализ исследуемых материалов неразрушающим образом и без какой-либо пробоподготовки.

Научная новизна

Научная новизна работы при исследовании каротиноидов состоит в применении оригинального подхода при моделировании структуры и спектров КР молекул путем последовательной структурной модификации, которая позволила однозначно установить влияние основных элементов в структуре молекул каротиноидов: длины сопряжения, структуры боковых и концевых групп, на спектр КР этих веществ. Научная новизна при исследовании низкомолекулярных гликолов заключается в том, что автор проанализировал спектры КР и содержания молекул во всех возможных стабильных конформациях и показал, что отличия между экспериментальными спектрами жидких гликолов и спектрами КР, рассчитанными с учетом всех стабильных конформаций молекул, объясняются неучетом межмолекулярных взаимодействий. При исследовании

полиэтиленгликолей научная новизна состоит в том, что автор показал, что, также, как и в твердых полиэтиленгликолях, в жидких полиэтиленгликолях преобладает молекулярная конформация спирали.

Практическая значимость

Практическая значимость результатов по исследованию каротиноидов определяется возможностями использования этих результатов при разработке методов определения содержания, химического и изомерного состава каротиноидов в продуктах питания, в биодобавках, в лечебных и косметических средствах, биотканях, в том числе при определении влияния на содержание и изомерный состав каротиноидов различных видов обработки пищи, при определении изменений в структуре каротиноидов в биодобавках и косметических средствах при хранении и при использовании различных видов консервации. Практическая значимость результатов по исследованию низкомолекулярных гликолов заключается в возможности использования полученных результатов для определения конформационного состава молекул гликолов в чистом веществах и водных растворах, а также при определении содержания гликолов в водных растворах. В частности, эта информация важна при исследованиях свойств водных растворов гликолов для применения в качестве криопротекторов и антифризов. Практическая значимость результатов исследования полиэтиленгликолей прежде всего связана с использованием этих молекул в пегилированных формах лекарств и для производства мазей, кремов, линиментов и т.п.

Использование результатов квантово-химических расчетов для интерпретации экспериментальных спектров КР, высокая согласованность между закономерностями, полученными для молекул со сходной структурой, однозначно свидетельствует о высокой достоверности полученных результатов и возможности основывать на выводах диссертационной работы реальные практические применения. О достоверности научных результатов также свидетельствуют достаточное число публикаций в журналах с хорошим рейтингом и многочисленные доклады на конференциях.

Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации. Защищаемые положения сформулированы четко и хорошо отражают результаты проделанной работы. Материал диссертационной работы изложен логично и понятно, приведены все необходимые для понимания сведения, материал диссертации хорошо структурирован. Литературный обзор содержит достаточно полное описание литературных данных по структуре и спектрам КР исследуемых соединений. Используемые методы и подходы описаны подробно и обосновано. Выводы диссертационной работы хорошо обоснованы.

Замечания

Высоко оценивая полученные автором результаты, вместе с тем хочу отметить некоторую небрежность в оформлении диссертации. Приведу некоторые замечания:

- В диссертационной работе автор использует для спектральных исследований две подобные экспериментальные установки, от сравнительного применения которых, по-видимому, должны были быть получены дополнительные знания о спектральных свойствах исследуемых веществ. Однако о получении каких-нибудь важных данных на этот счет в диссертации, по крайней мере явно, не говорится.
- В разделе 2.2 на странице 30 допущено использование неконкретных выражений: «...что позволило ... детектировать полосы КР с высоким отношением сигнал/шум...». С каким высоким отношением С/Ш? Или «... с использованием длиннофокусного объектива...». Какие параметры этого объектива? Это важно, поскольку объектив формирует пятно облучения на образце и плотность облучения.
- В этом же разделе указана мощность лазера на «поверхности» исследованных объектов (фруктов и овощей), равная 30 мВт. Однако размер лазерного пятна на образце не указан. Но даже простая оценка для плотности облучения при фокусировке размером около микрона дает плотность на уровне 10^6 Вт/кв.см., что более, чем достаточно для прожигания поверхности объекта.
- По-видимому, размер лазерного пятна был, конечно, на несколько порядков больше микрона. Тем не менее, плотность облучения должна быть указана, поскольку ее величина влияет на известный эффект фотовыцветания (photobleaching), который определяет возможность снятия спектров КР при заданном времени экспозиции. Об этом в главе 2 «Образцы и методы исследования» ничего не говорится.
- Автором сделаны расчеты для изолированных молекул каротиноидов и выполнены эксперименты для чистого бета-каротина. Однако положения линий КР каротиноидов в чистом виде, в биотканях или в смесях могут заметно отличаться. Поскольку практический интерес представляет анализ каротиноидов в биотканях и различных смесях (растворах), то важным развитием полученных результатов должно стать влияние окружения на спектры КР каротиноидов. В данной работе такие исследования не были проведены.

- В диссертационной работе рассчитаны спектры КР всех изомеров *бета*-каротина с одной *чис-связью*, и продемонстрировано, что эти спектры значительно отличаются. Однако, нет экспериментальных спектров различных изомеров *бета*-каротина, а сравнение рассчитанных спектров производится только с данными из литературы, которые были получены в 80-ых годах прошлого века. Наличие экспериментальных спектров КР изомеров *бета*-каротина могло бы существенно повысить значимость работы.

Сделанные замечания не снижают научной ценности работы. Диссертационная работа Василия Сергеевича Новикова «Спектроскопия комбинационного рассеяния света каротиноидов и гликолей: экспериментальное исследование и численное моделирование», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, является завершенным научным исследованием, которое вносит существенный вклад в понимание связи между спектрами КР каротиноидов и гликолей и структурой и состоянием молекул этих веществ и является важным шагом в создании методов спектроскопии КР для количественного анализа структуры гликолей и каротиноидов. Новизна и достоверность результатов и выводов работы не вызывает сомнения, результаты работы имеют важное фундаментальное и прикладное значение.

Считаю, что работа удовлетворяет всем требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор по своей квалификации и по результатам проведенного исследования заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Сергей Александрович Гончуков
Д.ф.-м.н., профессор,

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
Телефон: 7(903)0079946

Адрес электронной почты: gonchukov@mipt.ru

5 сентября 2022 года



Подпись удостоверяю
Заместитель начальника отдела
документационного обеспечения
НИЯ МИФИ

В. М. Сашорова