

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Волкова Владимира Владимировича «Спектроскопия и малоугловое рассеяние в решении обратных задач исследования многокомпонентных систем», представленную на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 01.04.18 – «Кристаллография, физика кристаллов» в диссертационный Совет Д 002.114.01

Работа В.В.Волкова посвящена весьма важной и актуальной задаче – разработке эффективных методов определения химического состава и структуры многокомпонентных систем из экспериментальных данных по спектрам поглощения и малоугловому рассеянию.

Современные материалы часто представляют собой физически и химически неразделяемые смеси, и единственный способ получения данных о компонентах, их составляющих, это компьютерная обработка результатов измерений с помощью алгоритмов анализа многомерных сигналов. В ряде случаев численный анализ является предпочтительнее экспериментальных методов. В настоящее время используется ряд программ, основные принципы которых были предложены автором настоящей работы.

Безусловно, актуальной задачей является определение наноразмерных структурных неоднородностей в неупорядоченных средах. В работе рассматриваются методологические и численные аспекты программ анализа данных малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния для определения размерных параметров и форм наночастиц, биомакромолекул и других наноразмерных неоднородностей в растворах.

Таким образом, работа состоит из двух частей, что и отобразено в ее названии. Во-первых, разработаны алгоритмы и программы решения обратных задач анализа спектров смесей, включающие оценку числа независимых компонентов, определение контуров индивидуальных спектров и способы исследования устойчивости решений. Разработанные программы применены к анализу ИК-спектров жидкой воды, смесей органических соединений, определения комплексов в растворах и ряда других задач. Разработанные способы разложения аддитивных спектров впервые применены для анализа данных малоуглового нейтронного рассеяния с вариацией контраста.

Во-вторых, разработана модифицированная схема поиска размерных распределений частиц по данным малоуглового рассеяния с повышенной устойчивостью решений. С помощью разработанного программного обеспечения было проведено исследование нескольких десятков систем различной природы: микроэмульсий воды в органических растворителях, металлических наночастиц в полимерах и углеродных матрицах, полимерных и биологических системах.

Следует отдельно выделить основные работы автора с биологическими системами:

1. определение формы молекул иммуноглобулина М и ревматоидного фактора человека. Выдвинута гипотеза о большей гибкости периферийных фрагментов ревматоидного фактора, подтвержденная другими методами исследования.
2. определение структурных моделей селективно дейтерированных частиц рибосомы 70S и 30S

Подчеркнем, что новизна защищаемой работы заключается в новизне разработки методов исследования, в разработанных приемах оценки стабильности и достоверности получаемых результатов, в эффективности поиска формы частиц в монодисперсных образцах и распределений по размерам в полидисперсных системах.

Практическая значимость данной работы очевидна. Это спектральный анализ неразделяемых смесей, определение числа компонентов и коррекция экспериментальных данных; это структурный анализ смесей наночастиц по данным малоуглового рассеяния, определение формы наночастиц в разбавленных растворах, в частности анализ строения белковых макромолекул, и т.д.

Диссертационная работа В.В.Волкова выполнена на высоком научном уровне и представляет собой законченную научно-квалификационную работу, теоретические и практические аспекты которой являются весомым вкладом в методологию исследования вещества сложного состава и строения. Актуальность, новизна и практическая значимость полученных результатов позволяют сделать вывод, что представленная диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям Постановления правительства Российской Федерации о порядке присуждения ученых степеней от 24.09.2013г. №842, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор – Волков Владимир Владимирович – заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 01.04.18 – «Кристаллография, физика кристаллов».

Главный науч. сотр. ИОНХ РАН
профессор
докт.хим.наук
Родникова Маргарита Николаевна



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова
Российской академии наук (ИОНХ РАН)
119991, г. Москва, ГСП-1, Ленинский проспект, 31.
Тел. (495) 952-0787, факс (495) 954-1279,
E-mail: info@igic.ras.ru

Подпись заверяю:

