

Отзыв

на автореферат диссертации Элеоноры Владимировны Штыковой

«Метод малоуглового рентгеновского рассеяния в структурной диагностике надмолекулярных комплексов»,

представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 01.04.18 – «Кристаллография, физика кристаллов» в диссертационный совет Д 002.114.01

Малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) за последние два десятилетия из малоизвестного и нечасто используемого метода превратился в мощный аппарат структурного анализа различных дисперсных систем. Это безусловно связано с развитием аппаратуры и с появлением множества малоугловых станций, как лабораторных, так и на синхротронных источниках излучения. В настоящее время измерение кривых МУРР с очень хорошей точностью проблем не составляет. Основной проблемой является интерпретация полученных малоугловых данных. Эта связано с тем, что теория МУРР и соответствующие программы обработки данных в основном были разработаны для рассеяния одинаковыми изолированными частицами в разбавленных растворах, то есть для ансамбля невзаимодействующих частиц одного размера и одинаковой формы. Сейчас для решения структурных задач, как в биологии, так и при разработке новых наноразмерных композиционных материалов такой подход резко ограничивает возможности МУРР. Поэтому диссертационная работа Э.В.Штыковой важна прежде всего тем, что в этой работе проведен анализ возможностей и ограничений метода малоуглового рентгеновского рассеяния, на базе компьютерного анализа предложены новые подходы к решению обратных задач и с их помощью изучены структуры широкого класса самых разных по своей природе образцов: полимерные нанокомпозиты (гидрогель/ПАВ комплексы, мультислоевые и гибридные квазикристаллические полимерные матрицы, мицелярные системы, твердотельные полимерные матрицы), монодисперсные нанокомпозиты на основе ферромагнитных наночастиц, стабилизированных биodeградируемыми полимерами, холестерические жидко-кристаллические дисперсии, сформированные из двухцепочечных макромолекул ДНК в комплексе с солью гадолиния и при инкорпорации наночастиц золота, биологические макромолекулы, индивидуальные и в комплексе с другими биологическими компонентами, и некоторые другие.

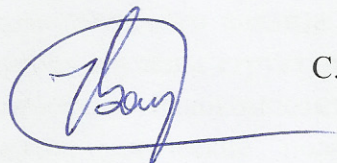
Решение структурных задач, поставленных в диссертации Э.В. Штыковой, было невозможно без применения новых подходов, расширяющих возможности МУРР. Сразу следует отметить, что благодаря большому количеству самых разнообразных образцов, структуру которых изучала Э.В.Штыкова, у диссертанта была возможность сделать обобщения и выводы, применимые при многих структурных исследованиях с помощью МУРР. К каждому из исследованных объектов Э.В. Штыкова применяла творческий подход, позволяющий отойти от рутинных вычислений с использованием ограниченного числа традиционных программ определения структурных параметров. Так, ею впервые были использованы *ab initio* и гибридные методы восстановления формы полидисперсных рассеивающих объектов и найденные подходы были распространены на исследование аналогичных образцов. Такая генерализация стала возможна еще и потому, что диссертантом было проведено компьютерное моделирование, где были подробно рассмотрены возможности и ограничения МУРР при восстановлении структуры полимерных, полиморфных и частично агрегированных образцов.

Важно также отметить, что решение структурных задач, поставленных в диссертационной работе Э.В. Штыковой, необходимо для понимания взаимосвязи структуры и функции различных надмолекулярных комплексов, как биологических, так и синтетических, что создает определенный базис для создания новых синтетических биологических материалов с заданными свойствами.

Автореферат диссертации Э.В.Штыковой написан хорошим профессиональным языком и достаточно полно иллюстрирован. В целом, судя по реферату, диссертантом была проведена большая научно-исследовательская работа, имеющая как научное, так и практическое значение. Результаты проведенных исследований и анализа достаточно полно представлены в выводах диссертации.

Таким образом, считаю, что диссертационная работа Э.В.Штыковой удовлетворяет всем требованиям ВАК, предъявляемых к докторским диссертациям, а ее автор, Элеонора Владимировна Штыкова, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 01.04.18 – Кристаллография, физика кристаллов.

Начальник отдела нанобиоматериалов и структур
ККНБИКСт НИЦ «Курчатовский институт»,
доктор химических наук
профессор

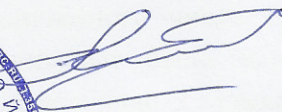


С.Н. Чвалун

123182, Москва, пл. Академика Курчатова,
д. 1, НИЦ «Курчатовский институт»,
Телефон: (499) 196 7460
E-mail: serge@ispm.ru

5 октября 2015 года

Подпись профессора С.Н.Чвалуна заверяю,
Заместитель директора по научной работе –
главный ученый секретарь НИЦ «Курчатовский институт»



В.И.Ильгисонис