

## ОТЗЫВ

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

Определение размерных параметров и формы наночастиц, биомолекул, других наноразмерных структурных неоднородностей в неупорядоченных средах является быстроразвивающейся и чрезвычайно востребованной областью исследований. В диссертации В.В. Волкова рассматриваются методологические и численные аспекты организации программ анализа данных малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния для расчета распределений наночастиц по размерам, а также определения формы одно- и многокомпонентных макромолекул в растворах по данным рассеяния. Особое внимание в работе уделяется способам оценки надежности и устойчивости решений, что очень важно, поскольку решенная В.В. Волковым задача, как правило, плохо обусловлена, а решение задачи осложняется присутствием систематических ошибок в исходных данных, создающих дополнительные препятствия для получения решений, имеющих физический смысл.

В.В. Волковым разработаны методы спектроскопического компонентного анализа смесей химических соединений различной природы, позволяющие проводить исследование образцов с произвольным числом компонентов, которое ограничивается только уровнем шумов измерений. Новизна методов заключается также в разработанных приемах оценки стабильности и досто-

верности получаемых результатов. Развитые методы позволяют достаточно просто проводить компонентный анализ как с привлечением дополнительной спектроскопической или другой информации, так и в условиях отсутствия априорных сведений об изучаемой системе. Данные методы применены для выделения индивидуальных спектров в смесях органических и неорганических соединений. Они впервые были использованы для коррекции интенсивности в наборах данных измерений малоуглового рассеяния и определения числа рассеивающих компонентов. В.В. Волковым показана возможность анализа систем с числом априори неизвестных компонентов более трех (в зависимости от качества экспериментальных данных).

Разработанные способы разложения аддитивных спектров впервые применены для анализа и коррекции данных малоуглового нейтронного рассеяния с вариацией контраста, по которым были определены структурные модели селективно дейтерированных частиц рибосомы 70S E-Coli и 30S Thermus Thermophilus. С помощью разработанного программного обеспечения по данным малоуглового рассеяния от раствора определены формы молекул иммуноглобулина М и ревматоидного фактора человека. Проведен анализ ряда систем с наночастицами – металлических катализаторов на органических и углеродных носителях, органо-неорганических композитов, полимерных систем. Разработанные подходы реализованы и применены для анализа ИК спектров смесей органических соединений, колебательных спектров жидкой воды.

Диссертационная работа В. В. Волкова выполнена на высоком научном уровне, представляет собой законченную научно-квалификационную работу, теоретические и практические аспекты которой являются весомым вкладом в методологию исследования вещества сложного состава и строения, которая развивается в современной химии. Актуальность, новизна и практическая значимость полученных результатов позволяют утверждать, что представленная диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям Постановления правительства Российской Федерации о порядке присуждения ученых

степеней от 24.09.2013 г. № 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".

Заведующий лабораторией структурной химии,  
профессор,  
д.х.н.  
Асланов Леонид Александрович



Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химиче-  
ский факультет  
Ленгоры, Москва 119991  
Телефон: 495-9391327  
Электронная почта: aslanov@struct.chem.msu.ru

18.03.2014

