

## **ОТЗЫВ**

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

Диссертация Волкова В.В. посвящена решению актуальной задачи современной химии - разработке эффективных методов определения химического состава и структуры сложных многокомпонентных систем, направленных на выявление взаимосвязей структура – свойство. Указанные взаимосвязи являются краеугольным камнем для решения важных практических задач, к числу которых относятся конструирование новых материалов, синтез веществ с заданными свойствами, мониторинг и анализ объектов окружающей среды. Особую актуальность диссертации придает направленность на разработку способов интерпретации данных и свертки химической информации, позволяющих характеризовать строение исследуемых образцов с разрешением от единиц до десятков нанометров. Это определяет востребованность данной диссертации не только с позиций развития современной химии, но и дальнейшего прогресса нанотехнологий.

Научная новизна диссертации во многом обусловлена феноменальным владением автора методами хемометрики и компьютерного моделирования, которые он мастерски использовал для решения обратных задач спектроскопии и малоуглового рассеяния при анализе многокомпонентных систем. Это позволило ему одним из первых в мире предложить целый набор новых или улучшенных алгоритмов и программных пакетов для спектроскопического компонентного анализа смесей химических соединений различной природы, позволяющих проводить исследование образцов с произвольным числом компонентов, которое ограничивается только уровнем шумов измерений.

Особым достоинством работы, определяющим ее высокую научную и практическую значимость, является применение разработанных алгоритмов для интерпретации данных малоуглового рассеяния. Это позволило повысить стабильность результатов и увеличить эффективность поиска формы частиц в монодисперсных образцах и распределений по размерам в полидисперсных системах. Автором блестяще продемонстрирована применимость

разработанного методического комплекса как для изучения морфологии макромолекул белков и биологических комплексов, так и для определения размерных параметров наночастиц и неоднородностей в системах различной природы. Так, в работе выполнен структурный анализ смесей наночастиц по данным малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния, определены формы наночастиц в разбавленных системах, в частности, проанализировано строение белковых макромолекул как в рамках однофазных, так и многофазных моделей. С точки зрения практики особенно важно, что предложенные в работе методы анализа смесей и строения наночастиц реализованы в ряде компьютерных программ и программных комплексов, входящих в систему ATSAS, находящуюся в свободном доступе в Интернете.

Принимая во внимание высокий уровень представленных исследований с точки зрения науки хемометрики, а так же исключительную значимость выполненных автором изысканий для развития метода малоуглового рассеяния, представляется, что данная работа вполне могла бы защищаться по двум специальностям: 01.04.18 и 02.00.02 – аналитическая химия. Это связано и с тем, что автор продемонстрировал удивительную прозорливость и научную интуицию, уделив особое внимание применению и развитию хемометрических подходов для решения обратных задач при анализе многокомпонентных систем. Указанные методы зачастую не требуют априорных данных о составе объектов исследований, поэтому в ряде случаев численный хемометрический анализ оказывается предпочтительнее хроматографических и масс-спектрометрических методов, которые не всегда пригодны, например, для решения задач дистанционного мониторинга или при изучении равновесных систем.

В заключение хотелось бы особо отметить, что автору удалось предвосхитить своими работами интенсивные современные изыскания по поиску эффективных алгоритмов разделения аддитивных сигналов, во многих из которых реализованы основные принципы, аналогичные предложенным автором данной работы, за несколько лет до широкого распространения этих процедур.


В качестве недостатка работы следует отметить:

- излишнюю скромность автора в вопросах формулировки приоритета собственных научных идей и разработок, которые были абсолютно пионерскими, и во многом определили бурное развитие метода малоуглового рассеяния;
- некоторые рисунки не совсем удачно скомпонованы (например, рис. 6), что

затрудняет их восприятие.

Указанные недостатки не влияют на высокую оценку работы. 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. Автореферат хорошо передает особенности и содержание сделанных разработок. 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".

Ведущий научный сотрудник,  
профессор,  
доктор химических наук,  
Перминова Ирина Васильевна

  
18.03.2014

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
химический факультет  
119991 Москва  
Ленинские горы 1-3  
Тел: 8(495)9395546  
e-mail: [iperm@org.chem.msu.ru](mailto:iperm@org.chem.msu.ru)





Декан  
химического факультета  
академик РАН  
В. В. Лукин