

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.243.01,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ФЕДЕРАЛЬНОГО  
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ ИМ. Н.Н.  
СЕМЁНОВА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА  
СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

Аттестационное дело № \_\_\_\_\_

Решение диссертационного совета от 16 ноября 2023 года № 23

О присуждении Клинову Артему Павловичу, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Моделирование одномерных наноструктур: ксенонуклеиновые кислоты и графеновые наноленты» по специальности 1.4.7 – Высокомолекулярные соединения принята к защите 04 июля 2023 года, протокол № 15 диссертационным советом 24.1.243.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4, созданного по приказу Рособнадзора № 105нк от 11 апреля 2012 года.

**Соискатель** Клинов Артем Павлович, 25.12.1994 года рождения, в 2018 году окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова», с 2018 по 2022 год обучался в очной аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук. Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано Федеральным государственным бюджетным учреждением науки Федеральным исследовательским центром химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук в 2023 году.

Работает научным сотрудником в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Федеральном исследовательском центре химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук.

**Диссертация выполнена** в лаборатории физики и механики полимеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук.

**Научный руководитель** – доктор физико-математических наук, Савин Александр Васильевич, Федеральное государственное бюджетное

учреждении науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, лаборатория физики и механики полимеров, ведущий научный сотрудник.

**Официальные оппоненты:**

Неелов Игорь Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор Центра химической инженерии Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО» (ФГАОУ ВО «НИУ ИТМО»), руководитель Международной лаборатории моделирования биополимеров и биосистем,

Дмитриев Сергей Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор Института физики молекул и кристаллов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (ИФМК УФИЦ РАН), заведующий лабораторией «Компьютерное моделирование в физике молекул и кристаллов»,

дали положительные отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики имени Н.М. Эмануэля Российской академии наук, г. Москва в своём положительном заключении, подписанном Кривновым Валерием Яковлевичем, доктором физико-математических наук, заведующим отделом электрофизики органических материалов и наноструктур, и Атражеевым Вадимом Владимировичем, кандидатом физико-математических наук, старшим научным сотрудником, указали, что диссертация представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, в которой была решена научная задача, состоящая в изучении строения одномерных наноструктур, влияния внешнего воздействия на их структуру, а также в исследовании явлений переноса в этих системах. Диссертационная работа удовлетворяет критериям актуальности, новизны и практической значимости и соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утвержденных постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а её автор, Клинов Артем Павлович, заслуживает присвоения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.7 – Высокомолекулярные соединения.

Соискатель имеет 5 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 4 работы, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 4 работы.

В диссертационной работе отсутствует заимствованный материал без ссылки на автора и (или) источник заимствования, а также результаты научных работ, выполненных в соавторстве, без ссылок на соавторов.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем учёной степени работах, в которых изложены основанные научные результаты диссертации.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Savin A. V., Klinov A. P. Twisting of graphene nanoribbons partially located on flat substrates // EPL. — 2020. — Т. 132, № 3. — С. 36002.

2. Клинов А. П., Мазо М. А., Смирнов В. В. Теплопроводность цепочки ротаторов с двухбарьерным потенциалом взаимодействия // Физика твердого тела. — 2021. — Т. 63, № 7. — С. 975—981.

3. Савин А. В., Клинов А. П. Расслоение многослойных нанолент графена на плоских подложках // Физика твердого тела. — 2022. — Т. 64, № 10. — С. 1592—1599.

4. Strelnikov I. A., Kovaleva N. A., Klinov A. P., Zubova E. A. C–B–A Test of DNA Force Fields // ACS Omega. — 2023. — Т. 8, № 11. — С. 10253—10265.

**На диссертацию и автореферат поступили отзывы:**

**От ведущей организации** – Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биохимической физики имени Н.М. Эмануэля Российской академии наук.

Отзыв положительный, содержит следующие критические замечания:

1. В главе 2 анализируются ксеноНК с новым углеводородным остовом, при этом диссертант не обсуждает многие вопросы, которые обычно волнуют экспериментаторов: будут ли рассмотренные ксеноНК стабильны в растворе, принимая во внимание их сильную агрегацию? Как следует улучшить структуру остова для снижения эффектов агрегации? Какой из вариантов остова (L3, L4, L5) представляет наибольший интерес для дальнейшего исследования? Ответы на эти вопросы позволили бы существенно улучшить восприятие результатов главы.

2. Результаты главы 2 носят качественный характер и получены в рамках силового поля, созданного авторами путём комбинации известных силовых полей. Для большей надежности полученных результатов желательно в дальнейшем повторить эти расчеты в другом силовом поле (например, CHARMM) и сравнить полученные результаты.

3. В главе 5 было бы необходимо сравнить с результатами других расчётов и экспериментов не только энергетические характеристики связывания атома углерода с подложкой h-BN, но и расстояние связи.

4. В главе 7 с практической точки зрения большой интерес представляет кинетика расслоения наноленты, чей верхний слой имеет значительно меньшие размеры по сравнению с нижним. Как в таком случае изменится скорость процесса разделения слоёв?

5. В диссертации встречаются неудачные переводы терминов с английского языка: «явная вода» или «крупнозернистый потенциал». Последний обычно используется для обозначения более грубого потенциала системы с зёрнами, которые объединяют несколько атомов. Автор же именуется этим термином упрощённый потенциал системы без зёрен, что допустимо, но является менее распространённым вариантом.

**От официального оппонента Неелова Игоря Михайловича** – доктора физико-математических наук, профессора Центра химической инженерии Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО» (ФГАОУ ВО «НИУ ИТМО»), руководителя Международной лаборатории моделирования биополимеров и биосистем.

Отзыв положительный, содержит следующие критические замечания:

1. Работа носит преимущественно теоретический характер и довольно слабо обсуждается связь полученных результатов с экспериментальными данными. Это не является существенным недостатком, однако хотелось бы пожелать автору в будущем более внимательно относиться к этому вопросу.

2. В литературном обзоре раздел 1.1.4 о методах моделирования ксеноНК написан общими мазками и не включает множество работ. Например, ПНК моделировалась в десятках экспериментах, а не только в работах Ясинского и соавторов.

3. В главе 2 парциальные заряды на остове ксеноНК определены, исходя из устаревшего силового поля PCFF. Следует заметить, что с этой целью обычно используются квантово-механические пакеты и программа RESP.

4. В главе 2 не обсуждаются критерии достижения равновесия в системах с двойными спиралями ксеноНК. Обычно с этой целью приводят графики функций среднеквадратичного отклонения координат атомов от начальной конфигурации (RMSD) от времени.

5. В главе 3 показано, что полученные результаты зависят от используемого силового поля. Остаётся неясным, как выбор силового поля может повлиять на выводы главы 2. Авторами данный вопрос не исследовался.

6. На большинстве графиков отсутствуют доверительные интервалы для измеренных величин.

**От официального оппонента Дмитриева Сергея Владимировича** – доктора физико-математических наук, профессора Института физики молекул и кристаллов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук (ИФМК УФИЦ РАН), заведующего лабораторией «Компьютерное моделирование в физике молекул и кристаллов».

Отзыв положительный, содержит следующие критические замечания:

1. В главе 4 при обсуждении коэффициента теплопроводности одномерных цепей всегда возникает вопрос о зависимости этой физической величины от длины цепи. Если для одномерных цепочек ротаторов известно о сходимости этой величины при увеличении длины цепи, то её поведение в двухкомпонентных моделях может быть иным.

2. При моделировании взаимодействий графеновых нанолент использовались классические силовые поля, которые не допускают разрыва валентных связей. Между тем, в условиях сильных деформаций в процессе скручивания разрывы могут играть существенную роль.

3. В главе 4 не обсуждается связь полученных результатов для модели 3 с работами Daxing Xiong (10.1103/PhysRevE.85.020102, 10.1103/PhysRevE.90.022117, 10.1103/PhysRevE.95.062140) который работал с аналогичными моделями.

4. Общим недостатком главы 4 является преимущественное внимание к результатам численного расчёта, а объяснение проводится с помощью качественных рассуждений, которые ничем не подкреплены.

5. Рассмотренные автором наноструктуры следовало бы назвать протяженными, а не одномерными.

**От Баимовой Юлии Айдаровны** – доктора физико-математических наук, профессора РАН, заведующей лабораторией «Физика и механика углеродных наноматериалов» Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук.

Отзыв положительный, содержит следующие критические замечания:

1. В автореферат автор пишет «небольшие наноленты достаточно быстро (в течение нескольких нс) распадаются при нагреве до высоких температур», однако непонятно, что автор считает «небольшим».

2. Было бы интересно понять почему была выбрана именно подложка BN, а не углеродная, алмазная, кремниевая или металлическая?

**От Корзниковой Елены Александровны** - доктора физико-математических наук, заведующей лабораторией «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» Евразийского НОЦ ФГБОУ ВО «УУНиТ».

Отзыв положительный, содержит следующее критическое замечание:

1. Следует отметить, что проверка одной из постановок, рассмотренных в диссертации с использованием первопринципного подхода могла бы повысить ценность работы, продемонстрировав уровень её достоверности.

**От Пахомова Павла Михайловича**, доктора химических наук, профессора, заведующего кафедрой физической химии ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет», заслуженного работника высшей школы РФ, и **Комарова Павла Вячеславовича**, доктора физико-математических наук, профессора кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет».

Отзыв положительный, содержит следующие критические замечания:

1. Для моделирования дуплексов ксеноНК используется валентно силовое поле (ВСП) AMBER, которые было дополнено значениями, взятыми из силового поля PCFF. При этом в автореферате нет сведений, как была выполнена проверка такого объединения. Такие проверки важны поскольку при построении ВСП выбор парциальных зарядов должен согласовываться с параметризацией потенциала Леннарда-Джонса, т.к. он вместе с кулоновским потенциалом используется для учета водородных связей. Поскольку водородные связи определяют стабильность наноструктур, построенных из ксеноНК, наблюдаемые автором разрывы моделируемых цепочек могут объясняться неточной параметризацией этого взаимодействия.

2. Не совсем ясно, как была выполнена параметризация низкоразмерных моделей, сопоставляемых спиралам из ксеноНК. Что позволяет их рассматривать именно в таком качестве? Использовались ли результаты полноатомного моделирования для параметризации взаимодействий в этой системе.

**От Шайтана Константина Вольдемаровича** – доктора физико-математических наук, профессора кафедры биоинженерии биологического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова.

Отзыв положительный, содержит следующее критическое замечание:

1. Не всегда при обсуждении результатов приводятся конкретные данные о значимых параметрах протокола моделирования, которые важны для понимания сути наблюдаемых эффектов. Возможно, это сделано в

диссертации. Для удобства чтения автореферата было бы полезно в начале текста привести список сокращений.

**От Лихачева Ильи Вячеславовича** – кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника Института математических проблем биологии – филиала Института прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук.

Отзыв положительный, содержит следующие критические замечания:

1. При создании крупнозернистой модели взаимодействия наноленты графена с подложкой h-BN необходимы эксперименты, доказывающие её корректность на тех же образцах, на которых работают полноатомные модели. Важно понимать, какое мы получаем ускорение в расчётах, во сколько раз модель работает быстрее полноатомной, и что с помощью таких моделей лишаемся, необходимо говорить об условиях применимости модели. В автореферате не хватает упоминания такого сравнения.
2. Необходим обзор других крупнозернистых моделей. У ДНК их достаточно много, зависят от количества переменных, т.е. какие свойства воспроизводит модель (см. обзор Shigaev A.S., Ponomarev O.A., Lakhno V.D. Theoretical and Experimental Investigations of DNA Open States // Math. Biol. Bioinf. 2013. Vol. 8, № 2. P. 553-664).
3. Требуется пояснения использования различных программных пакетов моделирования молекулярной динамики примерно одной и той же функциональности. Если мы передаём координаты из одного пакета на вход другого, то за кадром остаётся целый набор параметров – условий моделирования, термостатирования, работы с периодическими граничными условиями (полагаю, для образца в вакууме они не использовались) и пр. Как правило, такие пакеты имеют свой набор входных параметров. Переход от одного пакета к другому может означать работу с другой системой.
4. Вместо расчёта одной длинной траектории (100 нс и 1,4 мкс) стоит порекомендовать расчёт нескольких независимых траекторий при одних и тех же условиях (различающихся только последовательностью датчика случайных чисел). Как правило, траектории молекулярной динамики довольно быстро расходятся друг от друга (за сотни и даже десятки пикосекунд).
5. Любопытным остаётся вывод «Температура плавления дуплекса растёт при увеличении длины связующего сегмента остова от трёх до пяти атомов». Если взять крупнозернистую модель Пейрарда-Бишопа-Доксуа, то в неё входит межсайтовый потенциал. Можно предположить, что увеличение длины связующего сегмента остова – это уменьшение константы

межсайтового потенциала. Согласно данным моделирования, последний факт приводит к уменьшению температуры плавления. Или же, наоборот, увеличение длины связующего сегмента означать увеличение его жёсткости? Или же дело именно в длине, а одномерные модели это не учитывают?

6. Замечание относительно выражения «нанотехнологических нужд». Жаргонный термин. Непонятно, что имеется в виду. Технологический процесс? Новый прибор? Или новое теоретическое знание?

7. При упоминании структуры из Protein Data Bank крайне желательно указывать её четырёхзначный код (стр. 9, второй абзац).

8. Время жизни водородной связи обычно находится в пределах нескольких пикосекунд при температуре 300 К. Остаётся неясным предложение «Для каждой из систем было обнаружено одно событие долговременного (порядка 400 нс) разрыва и последующего соединения водородных связей между основаниями в концевой паре».

**Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:**

Неелов Игорь Михайлович – доктор физико-математических наук, известный и высококвалифицированный специалист в области теоретического исследования полимеров методами молекулярного моделирования.

Дмитриев Сергей Владимирович – доктор физико-математических наук, признанный специалист, является автором многочисленных работ по теоретическому изучению наноструктур из графена и нитрида бора.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики имени Н.М. Эмануэля Российской академии наук. Основные направления научной деятельности института, в частности, включают: исследование структуры, свойств, функционирования и молекулярного полиморфизма биомакромолекул современными физическими методами и методами математического и квантово-механического моделирования биопроцессов с применением современных суперкомпьютеров, а также исследование электрофизических свойств новых углеродных материалов.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

предложены оригинальные суждения о влиянии химической структуры остова и присоединённых к концу цепи хиральных мономеров на строение двойной спирали ксеноНК с углеводородным и пептидным остовами;



предложена оригинальная крупнозернистая модель взаимодействия наноленты графена с подложкой из гексагонального нитрида бора.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

использованы методы молекулярного моделирования, основанные на полноатомных силовых полях и крупнозернистых моделях;

изучены зависимости структуры, стабильности и теплопроводящих свойств двойных спиралей ксеноНК от химического строения остова;

определены условия разделения слоёв многослойных нанолент графена на подложке h-BN.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

представлены возможные методические подходы к изучению структуры как уже известных, так и новых вариантов ксеноНК, а также к исследованию динамики многослойных нанолент графена на поверхности плоской подложки.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

использованы стандартные методики моделирования наноструктур, в которые входит применение общеизвестных молекулярно-динамических программных пакетов и хорошо изученных полноатомных силовых полей, а также проведение расчётов в суперкомпьютерном центре с целью увеличения объёма статистической выборки;

установлено качественное совпадение авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках по данной тематике, ссылки на которые приведены в тексте диссертации.

**Личный вклад соискателя состоит в:**

участи в формулировке целей и задач выполненных исследований, проведении численных расчётов, обработке и анализе полученных результатов, подготовке научных публикаций и докладов на российских и международных конференциях.

Автореферат и публикации полностью отражают основное содержание диссертации.

Результаты работы могут быть использованы в научных организациях и вузах, которые занимаются исследованием модифицированных полинуклеотидов – ИБХ РАН, ИХБФМ СО РАН, МИРЭА, ИМБ РАН и др., а также в организациях, где изучаются и разрабатываются наноструктуры на основе графена и нитрида бора – ИБХФ РАН, ФИЦ ПХФ и МХ РАН и др.

В ходе защиты диссертации не были высказаны критические замечания  
Соискатель Клинов А.П. ответил на задаваемые ему в ходе заседания  
вопросы.

На заседании «16» ноября 2023 года диссертационный совет принял  
решение: за решение научной задачи, связанной с изучением строения  
одномерных наноструктур, влияния внешнего воздействия на их структуру, а  
также явлений переноса в этих системах, имеющей важное значение для  
областей создания новых модифицированных полинуклеотидов и  
наноструктур на основе графена и нитрида бора, присудить Клинову А. П.  
учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в  
количестве 14 человек, из них 5 докторов физико-математических наук,  
участвовавших в заседании, из 21 человек, входящих в состав совета,  
проголосовали: за 14, против нет, недействительных бюллетеней нет.

Председатель

диссертационного совета

Берлин Александр Александрович

Учёный секретарь

диссертационного совета

Ладыгина Татьяна Александровна

Дата оформления заключения: «20» ноября 2023 г.

