

Отзыв

с.н.с. ИМПБ РАН – филиала ИПМ им. М.В.Келдыша РАН

к.ф.-м.н. Лихачева Ильи Вячеславовича

на автореферат Клинова Артема Павловича,

научного сотрудника лаборатории физики и механики и полимеров

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Федерального исследовательского центра химической физики имени Н.Н. Семёнова

Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)

Автор данной работы провел обширное и важное исследование, посвященное моделированию двух классов одномерных наноструктур – двойных спиралей ксено-НК и графеновых нанолент на подложке h-BN.

Одним из ключевых результатов было открытие стабильности двойных спиралей ксено-НК с новым углеводородным остовом в различных средах, что имеет большое значение для дальнейшего исследования и практического применения этих структур. Кроме того, анализ воздействия аминокислот на хиральность двойной спирали ПНК дал интересные результаты и предоставил понимание механизма дестабилизации.

Особым достижением я бы выделил создание крупнозернистой модели взаимодействия графеновой наноленты с подложкой h-BN. Крупнозернистые модели (или грубые модели) позволяют работать с большим количеством частиц. При создании такой модели необходимы эксперименты, доказывающие её корректность на тех же образцах, на которых работают полноатомные модели. Важно понимать, какое мы получаем ускорение в расчетах, 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.

Необходим обзор других крупнозернистых моделей. У ДНК их достаточно много, зависят от количества переменных, т.е. какие свойства воспроизводит модель [1].

Требуется пояснение 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.

Длина траекторий (100 нс и 1,4 мкс) действительно впечатляет. Однако, вместо расчета одной длинной траектории стоит порекомендовать расчет нескольких независимых траекторий при одних и тех же условиях (различающиеся только последовательностью датчика случайных чисел). Как правило, траектории молекулярной динамики довольно быстро расходятся друг от друга (за сотни и даже десятки пикосекунд).

Любопытным остаётся вывод «Температура плавления дуплекса растёт при увеличении длины связующего сегмента остова от трёх до пяти атомов». Если взять модель крупнозернистую модель Пейрарда-Бишопа-Доксуа [2,3], 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 жесткости? Или же дело именно в длине, а одномерные модели это не учитывают?

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

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

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».

В целом, данная работа представляет собой важный вклад в область наноматериалов и молекулярной динамики, и ее результаты могут найти практическое применение в будущих исследованиях и разработках.

Безусловно, диссертант заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук.

1. Shigaev A.S., Ponomarev O.A., Lakhno V.D. Theoretical and Experimental Investigations of DNA Open States: 2 // Math.Biol.Bioinf. 2013. Vol. 8, № 2. P. 553–664.
2. Dauxois T., Peyrard M., Bishop A.R. Entropy-driven DNA denaturation: 1 // Phys. Rev. E. American Physical Society, 1993. Vol. 47, № 1. P. R44–R47.
3. Dauxois T., Peyrard M., Bishop A.R. Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation: 1 // Phys. Rev. E. American Physical Society, 1993. Vol. 47, № 1. P. 684–695.

Старший научный сотрудник

ИМПБ РАН – филиала им. М.В. Келдыша РАН,

кандидат физико-математических наук Лихачев Лихачев Илья Вячеславович

*Подпись Лихачева И.В. в заверение:
Лихачев Илья Вячеславович - Кандидат Т.А.*

