

Отзыв

на автореферат диссертации Клинова Артема Павловича на тему "Моделирование одномерных наноструктур: ксенонуклеиновые кислоты и графеновые наноленты", представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.7. Высокомолекулярные соединения.

Диссертация Клинова А.П. посвящена моделированию одномерных наноструктур на основе синтетических аналогов нуклеиновых кислот (ксенонуклеиновых кислот, ксеноНК), их разновидности пептидно-нуклеиновых кислот (ПНК) и графеновых нанолент на подложке гексагонального нитрида бора. Изучение таких систем является актуальной задачей с точки зрения создания наноконструкций для передачи тепловой энергии и электрического тока, а также полупроводниковых элементов.

Исследование выполнено с использованием полноатомной молекулярной динамики и крупнозернистых моделей. К наиболее интересным результатам работы можно отнести следующее. Впервые выполнено изучение двойных спиралей на основе ксеноНК с различной длиной связующего и последовательностями оснований. Показано, что все рассмотренные наноструктуры являются стабильными в вакууме и хлороформе, а в случае воды стабильность сохраняет спираль, построенная из оснований с максимальной длиной углеродного остова. С помощью низкоразмерной модели цепочки ротаторов был выполнен подробный теоретический анализ коэффициента теплопроводности таких систем. Также отдельного внимания заслуживают результаты по изучению стабильности нанолент графена в зависимости от количества слоев, аспектного отношения сторон и граничных условий.

Автореферат написан хорошим языком, содержит подробное изложение сути выполненных исследований и достаточное число иллюстративного материала, необходимого для понимания полученных результатов. Результаты работы опубликованы в 4-х статьях, вышедших в высокорейтинговых рецензируемых журналах, а также неоднократно обсуждались на всероссийских и международных конференциях. Таким образом, материал диссертации прошел хорошее внешнее рецензирование и апробацию.

По содержанию автореферата у нас есть два замечания:

1. Для моделирования дуплексов ксеноНК используется валентно силовое поле (ВСП) AMBER, которое 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 согласоваться 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 спиральям из ксеноНК. Что позволяет их рассматривать именно в

таком качестве? Использовались ли результаты полноатомного моделирования для параметризации взаимодействий в этой системе?

Высказанные замечания не нарушают общего положительного впечатления о работе. Автор в своих исследованиях использовал современные компьютерные методы моделирования одномерных структур. Выводы отражают содержание автореферата. Считаю, что диссертация «Моделирование одномерных наноструктур: ксенонуклеиновые кислоты и графеновые наноленты» Клинова Артема Павловича по своей актуальности, научной и практической значимости, новизне полностью соответствует критериям, установленным пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. в редакции с изменениями, утвержденными постановлениями Правительства РФ № 335 от 21 апреля 2016 г. и № 426 от 20 марта 2021 г., а ее автор Клинов Артем Павлович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.7. Высокомолекулярные соединения.

Заведующий кафедрой физической химии
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»,
д.х.н. Пахомов Павел Михайлович,
специальность 02.00.06 Высокомолекулярные соединения, химические науки,
профессор,
заслуженный работник высшей школы РФ

Пахомов Павел Михайлович

Профессор кафедры общей физики
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»,
д.ф.-м.н. Комаров Павел Вячеславович,
специальность 02.00.04 Физическая химия
доцент

Комаров Павел Вячеславович

170002, г. Тверь, Садовый пер., 35, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»,
Кафедра физической химии, тел.: +7 (4822) 58-05-22 (доб. 138), адрес электронной почты:
Pakhomov.PM@tversu.ru,
Кафедра общей физики, тел.: +7 (4822) 58-55-83 (доб. 127), адрес электронной почты:
Komarov.PV@tversu.ru

Подписи д.х.н., профессора Павла Михайловича Пахомова и д.ф.-м.н., доцента Павла Вячеславовича Комарова заверяю

25.10.2023

