

УТВЕРЖДАЮ:

Директор ФИЦ ХФ РАН

Профессор, д. х. н.

Надточенко В.А.

«30» мая 2023 года

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова
Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)

Диссертация «Моделирование одномерных наноструктур: ксенонуклеиновые кислоты и графеновые наноленты» выполнена в лаборатории физики и механики полимеров отдела полимеров и композиционных материалов.

В период подготовки диссертации соискатель Клинов Артем Павлович обучался в аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук (с 2018 по 2022 год). Соискатель работал в лаборатории физики и механики полимеров отдела полимеров и композиционных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук в должности инженера-исследователя в период с 2018 по 2019 год, в должности младшего научного сотрудника с 2019 года по настоящее время.

В 2018 году окончил кафедру биофизики физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова по специальности «Биофизика».

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.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук Савин Александр Васильевич, ведущий научный сотрудник лаборатории физики и механики полимеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Целью диссертационной работы является изучение структурных и динамических свойств одномерных наноструктур.

Диссертационная работа Клинова А.П. соответствует специальности 1.4.7 – высокомолекулярные соединения в области «решение теоретических задач, связанных с моделированием молекулярной и надмолекулярной структуры олигомеров, полимеров и сополимеров в растворах, расплавах и полимерных твердых тел в аморфном, полукристаллическом и кристаллическом состояниях».

Актуальность темы исследования:

В работе теоретическими методами рассматриваются два класса одномерных наноструктур: молекулы ксенонуклеиновых кислот (ксеноНК - полинуклеотиды с модифицированным остовом) и графеновые наноленты на подложке гексагонального нитрида бора (h-BN). КсеноНК с модифицированным остовом в основном применяются в олигонуклеотидной терапии и при создании наноконструкций. В последнем, как правило, используются гидрофильные или амфифильные остовы, совместимые с биологическими системами. Возможность использовать более подходящие для нанотехнологических нужд гидрофобные остовы представляется актуальной проблемой.

В настоящее время ведётся активная разработка полупроводниковых элементов на основе графеновых нанолент. При этом возникает проблема выбора подложки, которая минимально искажает структуру и свойства листа графена. В качестве подходящего кандидата рассматривается подложка из многослойного кристалла h-BN. В связи с этим, представляется важной и актуальной задачей разработка крупнозернистой (КЗ) модели подложки, которая позволит эффективно изучать поведение нанолент графена на плоской поверхности подложки.

Научная новизна работы состоит в следующем:

Впервые рассматривается динамика дуплексов ксеноНК с гидрофобным остовом на основе углеводородной цепи. Механизм изменения хиральности двойной спирали пептидной нуклеиновой кислоты (ПНК) изучается впервые на атомистическом уровне. Впервые исследуется вопрос о стабильности графеновых нанолент на подложке h-BN в зависимости от температуры системы и внешнего воздействия.

Теоретическая и практическая значимость работы:

Результаты моделирования дуплексов ксеноНК с углеводородным остовом могут быть использованы при создании новых одномерных наноструктур из ксеноНК с гидрофобным остовом. Выводы из расчётов двойных спиралей ПНК с концевыми аминокислотами представляют теоретический интерес при рассмотрении задач об изменении знака хиральности дуплексов. Разработанная методика построения КЗ модели подложки может быть применена для других периодических подложек. Методика оценки времени расслоения графеновых нанолент может быть использована при изучении стабильности агрегатов из наночешуек графена на различных подложках.

Автор принимал личное участие во всех этапах работы, а именно: в постановке цели и задач исследования, планировании и выполнении численных экспериментов, написании научных работ и подготовке докладов на конференциях.

Работа Клинова А.П. выполнена на высоком научном уровне с использованием современных методов моделирования. Основные положения и выводы диссертационной работы научно обоснованы, логично изложены и согласуются с результатами расчётов других исследователей.

Результаты исследований, представленных в диссертации, докладывались и обсуждались на следующих конференциях: XIX Ежегодная молодёжная конференция с международным участием ИБХФ РАН-ВУЗЫ «Биохимическая физика», III симпозиум «Современная материаловедение» (Москва, 2019), научная конференция отдела полимеров и композиционных материалов ФИЦ ХФ РАН (Москва, 2019, 2020, 2021, 2022, 2023), IV международный симпозиум и школа для молодых учёных «Физика, инженерия и технологии для биомедицины» (Москва, 2019), онлайн-конференция «Bringing Molecular Structure to Life: 50 Years of the PDB» (Европейский институт биоинформатики, 2021).

По материалам диссертации опубликованы 4 статьи в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК, 7 трудов конференций:

Статьи:

1. A. V. Savin, A. P. Klinov. Twisting of graphene nanoribbons partially located on flat substrates. EPL, 132 (3), 36002 (2020).
2. А. П. Клинов, М. А. Мазо, В. В. Смирнов. Теплопроводность цепочки ротаторов с двухбарьерным потенциалом взаимодействия. ФТТ, 63 (7), 975–981 (2021).
3. А. В. Савин, А. П. Клинов. Расслоение многослойных графеновых нанолент на плоских подложках. ФТТ, 64 (10), 1592–1599 (2022).

4. Strelnikov, I. A., Kovaleva, N. A., Klinov, A. P., Zubova, E. A. C–B–A Test of DNA Force Fields. ACS Omega, 8(11), 10253–10265 (2023).

Труды конференций:

1. А. П. Клинов, М. А. Мазо. Влияние температуры на структуру аминоэтилглициновой пептидно-нуклеиновой кислоты. Сборник трудов XX Ежегодной научной конференции отдела полимеров и композиционных материалов, г. Москва, 28-29 мая 2019 г. Москва: ТОРУС ПРЕСС, 2019. С. 78-80.

2. А. П. Клинов, А. В. Савин, А. А. Шароградская, М. А. Мазо. Моделирование молекул нуклеиновых кислот с модифицированным остовом. Сборник трудов XIX Ежегодной молодёжной конференции с международным участием ИБХФ РАН-ВУЗЫ "БИОХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА", III симпозиума "СОВРЕМЕННОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ", г. Москва, 28-30 октября 2019 г. Москва: АЛЬТИГРАФИКА, 2019. С. 114-116.

3. А. Р. Klinov, А. V. Savin, А. А. Sharogradskaya, М. А. Mazo. Nucleic acids with modified backbone: a theoretical study. Сборник трудов IV международного симпозиума и школы для молодых ученых «Физика, инженерия и технологии для биомедицины», г. Москва, 26-30 октября 2019 г. Москва, 2019, С. 151-152.

4. А. П. Клинов, М. А. Мазо. Построение модели молекул ксенонуклеиновых кислот. Сборник трудов XXI Ежегодной научной конференции отдела полимеров и композиционных материалов, г. Москва, 17-19 февраля 2020 г. Москва: ТОРУС ПРЕСС, 2020. С. 50-51.

5. А. П. Клинов, М. А. Мазо, В. В. Смирнов. Теплопроводность в одномерной торсионной решетке с бистабильным потенциалом. Сборник трудов XXII Ежегодной научной конференции отдела полимеров и композиционных материалов, г. Москва, 1-3 марта 2021 г. Москва: ТОРУС ПРЕСС, 2021. С. 88-91.

6. А. П. Клинов, В. С. Бруданин, М. А. Мазо. Влияние концевой аминокислоты на свойства пептидно-нуклеиновой кислоты. Сборник трудов XXIII Ежегодной научной конференции отдела полимеров и композиционных материалов, г. Москва, 28 февраля - 1 марта 2022 г. Москва: ТОРУС ПРЕСС, 2022. С. 76-78.

7. А. П. Клинов. Анализ структуры и свойств перспективных наноструктур: ксенонуклеиновые кислоты и графен. Сборник трудов XXIV Ежегодной научной конференции отдела полимеров и композиционных материалов, г. Москва, 27 февраля - 1 марта 2023 г. Москва: ТОРУС ПРЕСС, 2023. С. 94-95.

Опубликованные работы полностью отражают основное содержание диссертации.

Диссертация «Моделирование одномерных наноструктур: ксенонуклеиновые кислоты и графеновые наноленты» Клинова Артема Павловича рекомендуется к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.7 – высокомолекулярные соединения.

Заключение принято на заседании Учёного совета отдела полимеров и композиционных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук. На заседании присутствовало 15 из 20 членов Учёного совета. Решение принято единогласно, протокол № 5 от 9 марта 2023 года.

Секретарь секции № 7 Учёного совета ФИЦ ХФ РАН

к. х. н., доцент



Кузнецова О. П.

Подпись Кузнецовой О.П. удостоверено
Учредитель секретарь ФИЦ ХФ РАН Паршин В.М.Н.

