

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Фролкиной Марии Алексеевны на тему «Спиралеобразные олигомеры нанометрового размера как бистабильные динамические системы», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Быстрое развитие микроэлектроники, сопровождающееся постоянным уменьшением размеров функциональных элементов, определяет необходимость разработки новых подходов к созданию миниатюрных бинарных устройств. Стремление к предельной миниатюризации элементной базы обусловлено потребностью в усложнении функциональных возможностей микроэлектронных устройств при сохранении и даже уменьшении их габаритов. В современных условиях особую актуальность приобретает поиск молекулярных структур нанометрового размера, способных выполнять значимые функции.

Диссертационная работа М.А. Фролкиной посвящена актуальной проблеме создания молекулярных аналогов бистабильных осцилляторов ДUFFинга на основе спиралеобразных пиридин-фурановых (ПФ) и пиридин-пиррольных (ПП) фолдамеров. Показано, что бистабильность в таких системах возникает благодаря межвитковым стекингвым взаимодействиям, а переходы между двумя состояниями с частотой в мегагерцовом диапазоне могут индуцироваться тепловым шумом среды.

К числу наиболее значимых результатов следует отнести:

1. Обнаружение и характеризацию режима спонтанных вибраций, индуцированных тепловым шумом в ПФ- и ПП-нанопружинах при комнатной температуре.
2. Доказательство наличия стохастического резонанса в этих системах, что подтверждает их высокую чувствительность к слабым внешним периодическим воздействиям и открывает перспективы для создания высокочувствительных сенсоров.
3. Разработку атомистических моделей фолдамерных «матов» — мезоскопических конструкций из множества нанопружин, связанных графеновым листом. В таких конструкциях впервые продемонстрированы эффекты спонтанной синхронизации вибраций, ведущие к возникновению коллективных мод и преобразованию высокочастотных шумов в низкочастотные колебания.
4. Установление условий (плотная гексагональная упаковка, «ужесточение» графенового листа) для достижения глобальной синхронизации, что является важным шагом к созданию функциональных устройств на основе ансамблей нанопружин.

Достоверность полученных в работе результатов не вызывает сомнений. Автор использовал современные и хорошо зарекомендовавшие себя методы АМД-моделирования (силовое поле OPLS-AA, пакет GROMACS), а также строгие статистические подходы к обработке данных. Дополнительно проведено сопоставление поведения разных систем (ПФ против ПП, вода против ТГФ, одиночные пружины против «матов») между собой. Выводы хорошо согласуются с теоретическими представлениями о динамике бистабильных систем, что дополнительно подтверждает их обоснованность.

Автореферат написан грамотным научным языком, хорошо структурирован и снабжён наглядными иллюстрациями. Основные положения, выносимые на защиту, сформулированы чётко и точно отражают суть проделанной работы.

Несмотря на общую ясность изложения, имеется замечание. Недостаточно подробно описана процедура создания модели «ужесточённого» графенового листа с помощью кулоновского отталкивания зарядов (конструкция 7-ПФ-5-q). В частности, возникает вопрос: насколько физически обоснована фиксация компенсирующих противоионов в пространстве над листом? Как это соотносится с возможной экспериментальной реализацией? Более детальное объяснение помогло бы лучше оценить реалистичность модели.

Указанные недостатки носят частный характер и не оказывают существенного влияния на общую высокую научную ценность исследования. Полученные автором результаты вносят весомый вклад в развитие фундаментальных представлений о динамике молекулярных систем нанометрового масштаба, а также открывают новые перспективы для практического применения разработанных подходов в области нанотехнологий.

В целом, диссертационное исследование полностью отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, как в отношении актуальности темы, так и по уровню научной новизны. Объем проведенных исследований и практическая значимость полученных результатов позволяют считать работу законченным научным исследованием, имеющим существенное значение для развития современной химической физики. Автор работы Фролкина Мария Алексеевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17- химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник
химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Боченков Владимир Евгеньевич

16.03.2026

Контактные данные:

тел. +7 495 939 5442, e-mail: boch@kinet.chem.msu.ru

адрес места работы:

119234, г. Москва, Ленинские горы, д.1, стр.3,

химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова

