

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

Исследование динамических свойств молекулярных структур нанометрового масштаба представляет значительный интерес в контексте развития современных нанотехнологий и наноэлектроники. Особое внимание привлекают системы, обладающие бистабильной динамикой, поскольку они могут рассматриваться в качестве элементной базы для молекулярных переключателей, сенсоров и других функциональных устройств. В этом контексте исследование спиралеобразных фолдамеров как возможных молекулярных систем с бистабильной динамикой и характерными вибрационными режимами представляется актуальной научной задачей.

В диссертационной работе Фролкиной Марии Алексеевны с использованием методов атомистического молекулярно-динамического моделирования исследуются явления, характерные для бистабильных динамических систем, такие как индуцированные шумом переходы между состояниями (спонтанные вибрации), стохастический резонанс и спонтанная синхронизация спонтанных вибраций. Автор определяет условия возникновения бистабильности пиридин-фурановых (ПФ) и пиридин-пиррольных фолдамеров при их механическом растяжении в воде и тетрагидрофуране; исследует характеристики индуцированных тепловым шумом спонтанных вибраций и отклик системы на действие слабого периодического внешнего поля. В работе также рассмотрено влияние присоединения дополнительного олигомерного фрагмента на динамические свойства фолдамеров. Отдельная часть исследования посвящена коллективным динамическим эффектам в системах, состоящих из ансамбля взаимодействующих ПФ-фолдамеров, соединённых листом графена. Продемонстрирована конструкция фолдамерного мата, состоящая из семи ПФ-фолдамеров, накрытых графеном, в которой наблюдается возникновение коллективных вибрационных мод, обусловленных спонтанной синхронизацией динамики отдельных бистабильных элементов.

Автореферат написан на хорошем научном уровне, основные результаты работы ясно сформулированы и проиллюстрированы. Вместе с тем по содержанию автореферата можно высказать следующее замечание.

1. Коллективные эффекты рассматриваются для квадратной, гексагональной и гексагональной с центральным размещением расстановок олиго-ПФ-5. Чем обусловлен выбор таких конфигураций и изменится ли результат в более общем случае, например, когда отсутствует симметрия в конфигурации или олигомеры расположены случайным образом?

Замечание не снижает высокую оценку работы. Автореферат полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор 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.

ведущий научный сотрудник, Факультет математики,
доцент, департамент прикладной математики МИЭМ,
Национальный исследовательский университет «Высшая школа Экономики»,
к. ф.-м. н.,

Email: ovalba@hse.ru

О.В. Вальба

19.03.2026 г.

Подпись Вальба О.В. удостоверяю:

Адрес: 123458, Москва, ул. Таллинская, 29
Московский институт электроники и математики
Национальный исследовательский университет

Высшая школа Экономики

Телефон: (495)916-88-29

Факс: (495)916-88-29

Email: miem@hse.ru



Подпись заверяю

СПЕЦИАЛИСТ
ПО ДЕЛОПРОИЗВОДСТВУ
ПО АРХИВНОМУ АДМИНИСТРИРОВАНИЮ
И ПЕРСОНАЛУ
Н.В.

19.03.2026