

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы **Фролкиной Марии Алексеевны** «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.

Выбор темы диссертации Фролкиной Марии Алексеевны представляется полностью обоснованным. Миниатюризация по-прежнему является одним из главных направлений в электронике и нанотехнологии, и поиск аналогов привычных элементов электрических цепей и механизмов в молекулярном мире остается крайне актуальной и комплексной задачей. В свою очередь, одним из наиболее наглядных элементов такого рода является пружина, а в качестве ее наноскопической репрезентации выступают пиридин-фурановые и пиридин-пиррольные фолдамеры. Вместе с тем, до недавнего момента свойства таких соединений были малоизучены, и работа Фролкиной М.А. призвана устранить данную проблему.

Целью диссертационной работы является изучение свойств динамической бистабильности спиралеобразных пиридин-фурановых и пиридин-пиррольных фолдамеров в растворе и в виде ансамбля привитых молекул методом полноатомного компьютерного моделирования. Для этого в диссертации в первую очередь демонстрируется принципиальная возможность существования такой бистабильности на примере одновитковых нанопружин из пиридин-фурана. Затем, в частности, оценивается предельная вытяжка, при которой фолдамер утрачивает пружинную конформацию, и устанавливаются причины возникновения бистабильности за счет внешних воздействий (внешнее электрическое поле и тепловой шум). В дальнейшем, в работе изучаются влияние полярности растворителя, наличия или отсутствия молекулярного тяжа (олигомерного фрагмента на конце молекулы), а также межвитковых ароматических взаимодействий на бистабильную динамику изучаемых соединений. Далее в работе рассматривается ансамбль фолдамеров (размеров в 4 или 6 молекул), привитых через молекулярный тяж к листу графена. В такой системе показываются возможность синхронизации спонтанных вибраций и, что наиболее важно, возможность реализации стохастического резонанса за счет приложения слабого электрического поля. В совокупности, полученные в моделировании результаты показывают высокий потенциал применимости фолдамеров. В частности, они могут выполнять функцию преобразователей высокочастотных спонтанных вибраций в низкочастотные вибрации, что было показано для системы фолдамеры-графен.

Автореферат написан доступным языком, четко и логично структурирован. Сами же результаты являются оригинальными.

В качестве замечаний (скорее пожеланий), следует отметить, что:

1. Из текста не понятно, что означает синяя линия на Рисунке 1б.

2. Понятие «стэкинг» чаще употребляется в биологии для описания внутримолекулярных взаимодействий в белках и молекулах ДНК. В физико-химии же выражение «л-стэкинг» можно отнести скорее к жаргоризмам, поскольку более принятым является словосочетание «л- л взаимодействие» или «ароматическое взаимодействие»

Указанные замечания не снижают общую высокую оценку работы и сделанные в ходе нее выводы. С учетом изложенного выше, считаю, что диссертационная работа Фролкиной Марии Алексеевны «Спиралеобразные олигомеры нанометрового размера как бистабильные динамические системы» полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям согласно критериям, установленным пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. в действующей редакции, а её автор, Фролкина Мария Алексеевна, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Кандидат технических наук (специальность 05.26.03 – Пожарная и промышленная безопасность (нефтегазовая отрасль)), кандидат физико-математических наук (специальность 02.00.06 – Высокомолекулярные соединения), старший научный сотрудник кафедры физики полимеров и кристаллов физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова».



/ Гумеров Рустам Анрикович
«24» марта 2026 г.

Почтовый адрес: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»,
Физический факультет
Тел.: 7(495)939-4756; e-mail: gumerov@polly.phys.msu.ru

Подпись с.н.с Р.А. Гумерова заверяю

