

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.243.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ФЕДЕРАЛЬНОГО
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
ИМ. Н.Н. СЕМЁНОВА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ФИЦ ХФ РАН), ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ
СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 15.04.2026, протокол № 2
о присуждении Фролкиной Марии Алексеевне ученой степени кандидата
физико-математических наук

Диссертация «Спиралеобразные олигомеры нанометрового размера как бистабильные динамические системы» в виде рукописи по специальности 1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества принята к защите 04 февраля 2026 года (протокол № 1) диссертационным советом 24.1.243.02, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4, приказом Рособнадзора № 105 н/к от 11 апреля 2012 года.

Соискатель **Фролкина Мария Алексеевна** родилась 31 мая 1995 года, гражданка Российской Федерации. В период с 01 сентября 2012 года по 30 июня 2016 года обучалась на Факультете вычислительной техники Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Пензенский государственный университет», где ей была присуждена степень бакалавра по направлению 01.03.04 «Прикладная математика». С 01 сентября 2016 года по 30 июня

2018 года Фролкина М.А. обучалась в Московском институте электроники и математики им. А.Н. Тихонова Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», где ей была присуждена степень магистра по направлению 01.04.02 «Прикладная математика и информатика». В период с 01 октября 2018 года по 30 сентября 2022 года обучалась в аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук по специальности 01.04.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества. С 19 июля 2018 года до 30 июня 2023 года Фролкина М.А. работала инженером-исследователем в лаборатории теории сложных систем Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук. С 01 июля 2023 года по настоящее время работает научным сотрудником лаборатории теории сложных систем Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук.

Диссертация выполнена в лаборатории теории сложных систем Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук.

Научный руководитель — **Аветисов Владик Аванесович**, гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории теории сложных систем Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

1. **Будков Юрий Алексеевич**, гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории вычислительной физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

2. **Гудимчук Никита Борисович**, гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник кафедры биофизики физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация — **Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ)**, г. Гатчина, в своем положительном заключении, подписанном ведущим научным сотрудником лаборатории теории и моделирования полимерных систем Филиала НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ — Института высокомолекулярных соединений, доктором физико-математических наук, профессором РАН **Полоцким Алексеем Александровичем** и утвержденном заместителем директора по научной работе НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ, доктором физико-математических наук **Ворониным Владимиром Владимировичем**, указала, что:

1. В разделе 3.4, посвященном изучению фолдамера олиго-ПФ-7, следовало бы отметить, что в этом случае компьютерный эксперимент проводится в другом, термодинамически сопряженном, ансамбле —

изометрическом, а не изотензиональном, как во всех остальных рассмотренных случаях, и обсудить принципиальные различия между этими ансамблями.

2. В разделе 3.5 на рисунке 50 в распределение плотности распределения вероятности $p(R_e)$ конца фолдамера олиго-ПФ-5 с присоединенным ЭГФ имеется дополнительный максимум (его можно трактовать как расщепление максимума, отвечающего сжатому состоянию). Чем можно объяснить его появление?

3. При присоединении к фолдамеру олиго-ПФ-5 ЭГФ время жизни в стационарном состоянии в ТГФ увеличивается в 6 раз — с 2,0 нс до 12,5 нс. Соответственно увеличивается и период колебаний, при котором имеет место резонансный отклик — с 4 нс до 25 нс. Какова причина такого увеличения времени жизни, тем более примечательного ввиду того, что моделирование олиго-ПФ-5 с ЭГФ проводилось при более высокой температуре?

4. Было бы полезным изучить продольные флуктуации конца фолдамерной пружины, к которому приложена сила. Возможно, это прояснило бы и происхождение дополнительного пика вероятности распределения $p(R_e)$ конца фолдамера олиго-ПФ-5 с присоединенным ЭГФ.

5. На стр. 93 автор пишет: «В ТГФ конструкция демонстрирует частичную синхронизацию спонтанных вибраций ближних пар нанопружин (1–4) и (2–3) с коэффициентом корреляции $\chi \approx 0,5$, при этом между дальними парами (1–3) и (2–4) корреляции практически отсутствуют.» Судя по изображению фолдамерного мата на рисунке 63, пружины 3 и 4 равноудалены от пружины 1. На каком основании пружины 1–4 считаются ближними, а 1–3 — дальними?

Соискатель имеет 7 печатных работ, включающих 1 коллективную монографию. Работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК — 6, общим объемом 6 печатных листов.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Avetisov V.A., Frolkina M.A., Markina A.A., Muratov A.D., Petrovskii V.S. Short pyridine-furan springs exhibit bistable dynamics of Duffing oscillators // *Nanomaterials*. — 2021. — V. 11, № 12. — 3264: 1–14.

2. Аветисов В.А., Астахов А.М., Валов А.Ф., Маркина А.А., Муратов А.Д., Петровский В.С., Фролкина М.А. Арки Эйлера и пружины Дуффинга размером в несколько нанометров // *Химическая физика*. — 2023. — Т. 42, № 6. — С. 21–39.

3. Frolkina M.A., Markina A.A., Petrovskii V.S., Astahov A.M., Muratov A.D., Valov A.F., Avetisov V.A. Collective bistability of pyridine-furan nanosprings coupled by a graphene plate // *The Journal of Physical Chemistry B*. — 2025. — V. 129, № 18. — P. 4491–4500.

На автореферат поступили отзывы:

1. Отзыв на автореферат диссертации, подписанный ведущим научным сотрудником химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», кандидатом физико-математических наук **Боченковым Владимиром Евгеньевичем**. Отзыв положительный. К автореферату диссертационной работы имеется замечание:

Недостаточно подробно описана процедура создания модели «ужесточенного» графенового листа с помощью кулоновского отталкивания зарядов (конструкция 7-ПФ-5-г). 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.

2. Отзыв на автореферат диссертации, подписанный старшим научным сотрудником лаборатории терагерцовой спектроскопии Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» (МФТИ), кандидатом химических наук **Мотовиловым Константином Александровичем**. Отзыв положительный. В качестве замечаний отмечено следующее:

1). Предложенная модель упаковки фолдамеров внутри мата не может быть названа «плотной». Между фолдамерами не только отсутствует непосредственный контакт, но имеющиеся пустоты достаточны для размещения дополнительных аналогичных фолдамеров.

2). В работе продемонстрировано, что усиление упругого взаимодействия между фолдамерами внутри мата за счет увеличения жесткости конструкции приводит к достижению практически полной синхронизации пружин. При этом жесткость в модельном эксперименте была увеличена с помощью дополнительного кулоновского расталкивающего взаимодействия в местах крепления фолдамеров к графену, вызванного внесением одноименных зарядов. Такой подход может быть оправдан для проверки эффекта в рамках модели, но возможность его реализации в реальном эксперименте представляется крайне трудной. Гораздо проще и ближе к реальному эксперименту было бы повысить жесткость системы либо с помощью замены легко деформируемого этиленгликолевого линкера на более короткую структуру, либо за счет уменьшения расстояния между фолдамерами, упаковка которых, как отмечалось в замечании выше, довольно далека от «плотной».

3. Отзыв на автореферат диссертации, подписанный ведущим научным сотрудником Факультета математики, доцентом департамента прикладной математики Московского института электроники и математики им. А.Н. Тихонова Национального Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», кандидатом физико-математических наук **Вальба Ольгой Владимировной**. Отзыв положительный. У автора возник следующий вопрос:

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?

4. Отзыв на автореферат диссертации, подписанный научным сотрудником лаборатории теории полимерных систем и мягких сред кафедры физики полимеров и кристаллов Физического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, кандидатом технических наук, кандидатом физико-математических наук **Гумеровым Рустамом Анриковичем**. Отзыв положительный. Автором сделаны следующие замечания:

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

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

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что:

1. Официальный оппонент д.ф.-м.н. **Будков Юрий Алексеевич** является признанным специалистом в области теоретических и экспериментальных исследования физических свойств конденсированных неорганических и органических систем и их изменений при различных внешних воздействиях. Область его основных научных интересов включает теорию ионных и полимерных растворов, статистическую теорию жидкостей, коллективные эффекты и критические явления в конденсированных молекулярных и макромолекулярных системах, в том числе, в системах нанометрового размера. Его многочисленные работы по данным направлениям опубликованы в ведущих рецензируемых научных изданиях. Высокая научная квалификация Будкова Ю.А. позволяет ему дать всестороннюю оценку диссертационной работы, представленной Фролкиной М.А.

2. Официальный оппонент д.ф.-м.н. **Гудимчук Никита Борисович** — широко известный специалист в области исследований структурных, динамических и функциональных свойств полимеров и биополимеров, в частности, динамических и механо-химических характеристик молекулярных машин, в том числе, с использованием методов полноатомного и огрубленного компьютерного моделирования. Им опубликован ряд работ по данной теме. Большой и разнообразный опыт, высокая научная квалификация Гудимчука Н.Б. позволяет ему по существу оценить рассматриваемую диссертационную работу.

3. Ведущая организация **Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ)** является крупным научным центром, ведущим, наряду с другими

направлениями, разносторонние фундаментальные и прикладные исследования в области физики и химии макромолекулярных и наноструктурированных систем. В многочисленных работах сотрудников института, включающих, в том числе, методы компьютерного моделирования, активно изучаются структурные, динамические и механические свойства различных полимерных систем, процессы структурной организации макромолекулярных комплексов и их влияние на физико-химические свойства материалов. Высокая научная квалификация сотрудников НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ и наличие исследований, близких по тематике к рассматриваемой диссертационной работе, позволяют им дать компетентную и всестороннюю оценку представленных в ней результатов.

Диссертационный совет отмечает, что в рассматриваемой работе диссертантом методами АМД-моделирования впервые показано, что спиралеобразные ПФ- и ПП-фолдамеры длиной несколько нанометров являются нелинейно-упругими молекулярными нанопружинами, характеризующимися бистабильностью, обусловленной межвитковым стекинговым взаимодействием. Установлено, что бистабильность ПФ- и ПП-нанопружин проявляется себя в виде индуцированных тепловым шумом спонтанных вибраций мегагерцового диапазона, обладающих высоким резонансным откликом на действие слабых осциллирующих полей и воспроизводимых при комнатных температурах как в полярном, так и в неполярном растворителях. Представлены конструкции типа фолдамерных матов, представляющие собой слой бистабильных нанопружин, накрытых связывающей их графеновой пластиной. Показано, что в таких конструкциях могут возникать коллективные вибрационные моды, обусловленные спонтанной синхронизацией спонтанных вибраций встроенных нанопружин.

Теоретическая значимость исследования заключается в развитии представлений о наномеханике одиночных спиралеобразных фолдамеров и сконструированных на их основе фолдамерных матов. В диссертации впервые методами атомистического моделирования показано, что спиралеобразные ПФ- и ПП-фолдамеры могут выступать в качестве бистабильных наномеханических систем, демонстрирующих индуцированные тепловым шумом спонтанные вибрации. Автором установлены не только индивидуальные бистабильные свойства этих фолдамеров, такие как параметры резонансного отклика на воздействие слабых осциллирующих полей в полярном и неполярном растворителях, но и нетривиальные коллективные вибрационные характеристики фолдамеров, объединенных в слой бистабильных молекулярных пружин, накрытых графеновой пластиной.

Полученные результаты вносят вклад в развитие физики нелинейных систем, в частности, за счет установления связи между молекулярной структурой и динамическими режимами, характерными для бистабильных систем. Существенным является также рассмотрение коллективных эффектов в системах связанных фолдамеров, что позволяет масштабировать бистабильное поведение на более высокие уровни организации.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики. Практическая значимость работы определяется общим трендом современного развития нано- и микроэлектроники, стремящейся к предельной миниатюризации бинарных функциональных элементов. Результаты работы создают теоретическую основу прицельного конструирования новых перспективных молекулярных структур для создания бинарных функциональных элементов нанометрового размера. Результаты, полученные в диссертации, говорят, в частности, о возможности использования бистабильных спиралеобразных фолдамеров в

нано- и микроэлектронике для создания логических ячеек, триггеров и различного рода переключателей, включая системы, использующие эффекты стохастического резонанса и спонтанной синхронизации, что может быть востребовано при создании чувствительных нанодетекторов и преобразователей слабых сигналов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила обоснованность выводов работы, которые обеспечиваются корректным выбором и использованием современных методов атомистического моделирования, проведением всех компьютерных экспериментов в необходимом количестве независимых повторов, воспроизводимостью наблюдаемых эффектов в различных средах и при различных температурах, применением статистических методов обработки данных и верификации результатов, а также широкой апробацией материалов диссертации на научных конференциях и семинарах. Ключевые результаты работы опубликованы в ведущих отечественных и зарубежных рецензируемых журналах, что также подтверждает высокий уровень проведенного исследования.

Личный вклад соискателя состоит в личном участии на всех этапах исследования, описанного в диссертации. Постановка цели и задачи исследования осуществлялась непосредственно автором при участии научного руководителя. Автор диссертации анализировал научную литературу, планировал и проводил компьютерные эксперименты, обрабатывал и анализировал полученные результаты, а также готовил публикации и представлял результаты на научных конференциях. Все выводы и результаты, представленные в диссертации, были получены лично автором или при его непосредственном участии.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания и вопросы:

1. Насколько наблюдаемые эффекты (в частности, спонтанные вибрации и стохастический резонанс) зависят от выбора конкретного силового поля?

2. Насколько рассмотренные вами бистабильные структуры могут быть действительно реализованы экспериментально?

Соискатель Фролкина М.А. ответила на задаваемые ей вопросы и привела собственную аргументацию:

1. Хотелось бы отметить два важных обстоятельства. Во-первых, было использовано широко апробированное и массово используемое для моделирования молекулярной динамики подобных структур. Во-вторых, проведенные исследования показывают, что изменение растворителя (с полярного на неполярный), температуры, растягивающих сил в достаточно широком диапазоне не приводит к исчезновению эффекта бистабильности.

2. Если говорить о ПФ и ПП спиралеобразных фолдамерах, то стоит отметить, что протоколы синтеза ПФ и ПП олигомеров с контролем длины до 1-2 звеньев известны, достаточно хорошо отработаны и апробированы. Вопросы их устойчивости остаются частично дискуссионными, однако в литературе недавно появились данные о реальной устойчивости ПП олигомеров длиной 5-7 мономерных звеньев.

Диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года, и «Изменениям, которые вносятся в Положение о присуждении ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации № 335 от 21 апреля 2016 года, и принял решение присудить **Фролкиной Марии Алексеевне** ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности

1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 10 докторов наук по специальности 1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества, участвовавших в заседании, из 30 человек, входящих в состав совета, проголосовали:

за присуждение ученой степени — 20,
против присуждения ученой степени — нет,
недействительных бюллетеней — нет.

Председатель
диссертационного совета 24.1.243.02
доктор физико-математических наук



М.Г. Голубков

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.1.243.02
кандидат физико-математических наук

С.Ю. Сарвадий

15 апреля 2026 года